

UNICAMP - UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

"ESTUDO DA EFICIÊNCIA DE SEPARAÇÃO EM UMA COLUNA
DE DISCOS ROTATIVOS PERFURADOS "

AUTOR: Leinig Antonio Perazolli ^K

Tese submetida à comissão de Pós - Graduação da Faculdade de
Engenharia Química - UNICAMP como parte dos requisitos necessários
para a obtenção do grau de " MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA "

Aprovado por

A. Basile Tambourgi

Orientador Prof. Dr. Elias Basile Tambourgi ^K

João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira

Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira

Gil Anderson da Silva

Prof. Dr. Gil Anderson da Silva

Campinas - São Paulo - Brasil

15 de Março de 1991

Este exemplar corresponde à redação final da tese defendida
por Leinig A. Perazolli em 15/03/91

A. Basile Tambourgi

629.10.4474

A MINHA ESPOSA. LUCIANA

A MINHA FILHA. BARBARA

E

AOS MEUS PAIS. EGEL E MARIA HELENA

AGRADECIMENTOS

A todos que participaram da realização, direta ou indiretamente, deste trabalho e especialmente ao amigo e orientador Prof. Dr. ELIAS BASILE TAMBOURGI.

Ao Departamento de Engenharia de Sistemas Químicos da Faculdade de Engenharia Química de Campinas - UNICAMP.

Ao Departamento de Química Tecnológica e de Aplicação do Instituto de Química da UNESP - ARARAQUARA.

A CAPES pelas bolsas concedidas.

RESUMO

Extratores líquido - líquido com discos rotativos tem sido utilizados nos mais diversos setores industriais. Estes extratores, também, podem ser utilizados como alternativa tecnológica para processos convencionais de separação líquido - líquido, dos quais podemos citar a purificação de antibióticos e do ácido fosfórico, produzido através do ataque da rocha fosfática com ácido clorídrico.

Com objetivo de obtermos experimentos comparativos das condições de inundação do extrator utilizando sistema bifásico, com transferência de soluto entre as fases, e estabelecermos as condições de transferência de massa no extrator de discos rotativos perfurados foram realizados experimentos com variações na geometria e nas condições operacionais do extrator. As variações estudadas na geometria do extrator foram o número de discos rotativos e a área livre de escoamento. As variações operacionais foram a velocidade de rotação e a relação entre as vazões das fases contínua e dispersa. O sistema adotado foi água - n-butanol - ácido acético.

Foram realizadas, comparações entre os resultados obtidos experimentalmente com os resultados obtidos por correlações propostas por diversos outros pesquisadores para a velocidade característica, verificações da região de escoamento em função da velocidade de rotação e foi proposta uma correlação para a determinação da eficiência de separação no extrator utilizado.

Observou-se que o escoamento no interior do extrator é do tipo toroidal, que boas eficiências de separação foram obtidas mesmo a baixas velocidades de rotação dos discos e a correlação obtida descreveu os experimentos com um erro médio de 5%.

ABSTRACT

Rotary disc extractors have been utilized in different industrial sectors. Nevertheless this extractor can be used as technological alternative for many others conventional process of liquid - liquid separation. Purification of antibiotics and fosforic acid are important examples of this used. The fosforic acid can be produced by the attack of phosphatic rock with chloridric acid.

In an attempt to realize comparative experiments of flooding conditions, using bifase system with solute transport between fases, and establish mass transfer conditions, experiments were carried out at different operations conditions and extractor geometries. The different geometries of the rotary disc extractor used were, free area for flow and number of rotary disc. The differents operational conditions used were, disc rotating velocity and rate of fase's flow, continue and dispersed fases. The sistem utilized was water - n-butanol - acetic acid. The used solute substance was acetic acid.

Comparactions of experimental results with results by correlations construct by other workers for characteristic velocity and verifications of flow region, how rotary velocity function, were realized. Also, a separation efficient correlation was construct to describe the studied extractor.

The flow in the P.R.D.C. separator is toroidal pattern. good separation efficiency have been observed and the observed correlation described the experimental results with $\pm 5\%$ difference.

INDICE GERAL

- INTRODUÇÃO.....C	01	)
- CAPÍTULO 1 - ANÁLISE DA LITERATURA E REVISÃO BIBLIOGRÁFI		
CA.....C	05	)
1.1 - Sistemas em estágios ou bateladas.....C	06	)
1.2 - Sistemas diferenciais ou contínuos.....C	07	)
1.2.1 - O extrator de discos rotativos.....C	11	)
1.2.2 - O extrator de discos rotativos perfura-		
dos (P.R.D.C.).....C	23	)
1.3 - Conclusão.....C	28	)
CAPÍTULO 2 - MATERIAIS E MÉTODOS.....C	30	)
2.1 - Introdução.....C	30	)
2.2 - Equipamentos e montagem experimental.....C	31	)
2.3 - Experimentos.....C	37	)
2.3.1 - Determinação do ponto de inundação.....C	38	)
2.3.2 - Estudo da transferência de massa.....C	39	)
2.3.3 - Análise dos resultados.....C	44	)
CAPÍTULO 3 - CONDIÇÕES DE INUNDAÇÃO EM ESCOAMENTO BIFÁSI-		
CO CONTRACORRENTE COM TRANSF.DE MASSA.....C	46	)
3.1 - Introdução.....C	46	)
3.2 - Inundação.....C	47	)
3.2.1 - Introdução.....C	47	)
3.2.2 - Velocidade característica: Definição...C	50	)

3.2.3 - Determinação experimental da velocidade característica.....	(53)
3.2.4 - Velocidade crítica de rotação.....	(55)
3.3 - Comparação dos resultados obtidos.....	(62)
3.4 - Conclusão.....	(65)
CAPÍTULO 4 - TRANSFERÊNCIA DE MASSA.....	(67)
4.1 - Modelos matemáticos.....	(68)
4.1.1 - Teoria da renovação superficial.....	(69)
4.1.2 - Modelo diferencial.....	(73)
4.1.2.1 - Unidade global de transferência.....	(76)
4.1.3 - Modelo da gota rígida.....	(79)
4.1.3.1 - Formação e coalescência na interface.....	(79)
4.1.3.2 - Ascensão ou queda livre das gotas formadas.....	(81)
4.1.4 - Análise dos modelos matemáticos.....	(84)
4.2 - Retirada e análise dos resultados.....	(86)
4.2.1 - Retirada das amostras.....	(86)
4.2.1.1 - Inundação.....	(86)
4.2.1.2 - Transferência de massa.....	(89)
4.2.2 - Análise dos resultados.....	(90)
4.2.2.1 - Inundação.....	(91)
4.2.2.2 - Transferência de massa.....	(92)
4.2.3 - Determinação das composições no equilíbrio de fases.....	(93)
4.2.3.1 - Equações simultâneas.....	(94)
4.2.3.2 - Procedimento iterativo de cálculo....	(98)

4.2.3.3 - Descrição do método de WEGSTEIN.....	(102)
4.3 - Estudo da influência das variáveis geométricas e operacionais na efic. de sep....	(106)
4.3.1 - Estudo da influência da velocidade de rotação dos discos.....	(108)
4.3.2 - Estudo da influência do número de discos rotativos.....	(115)
4.3.3 - Estudo da influência da área livre de escoamento.....	(116)
4.3.4 - Estudo da influência da relação entre as velocidades superficiais das fases contínua e dispersa.....	(119)
4.4 - Modelagem matemática.....	(120)
4.5 - Conclusão.....	(126)
CONCLUSÃO FINAL E RECOMENDAÇÕES	(128)
ANEXO (A - I) - Resultados experimentais obtidos relativos a vel. característica.....	(134)
ANEXO (A - II) - Resultados experimentais obtidos relativos a transf. de massa.....	(137)
ANEXO (A - III) - Volumetria de neutralização.....	(141)
ANEXO (A - IV) - Calibração dos rotâmetros.....	(143)
ANEXO (A - V) - Listagem do programa EQUIL3.....	(149)
ANEXO (A - VI) - Listagem do programa ADTRANSF.....	(169)
- NOMENCLATURA UTILIZADA.....	(181)
- REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	(187)
- COEFICIENTES DE CORRELAÇÃO DOS GRÁFICOS EXPERIMENTAIS...	(191)

INDICE DAS FIGURAS

CAPÍTULO - 1

Figura (1.1) - Sistema de estágios em contracorrente....(	07)
Figura (1.2) - Extratores mecanicamente agitados.....(	10)
Figura (1.3) - Detalhe do interior do extrator R.D.C(	11)
Figura (1.4) - Escoamento padrão observado por G.H.REMAN (⁹) (1951).....(	13)

CAPÍTULO - 2

Figura (2.1) - Detalhe do espaçamento entre os discos...(	32)
Figura (2.2) - Detalhe da construção do extrator PRDC...(	33)
Figura (2.3) - Detalhe dos discos rotativos.....(	34)
Figura (2.4) - Montagem experimental.....(	40)

CAPÍTULO - 3

Figura (3.1) - Balanço das forças em uma gota isolada do líquido disperso escoando em contracorren te no extrator.....(	51)
---	------

Figura (3.2) - Gráfico para cálculo da velocidade característica em função das condições experimentais de inundação.	
l = 40 cm; dp = 5,1 cm e dc = 5,3 cm.....(	56)
Figura (3.3) - Gráfico para cálculo da velocidade característica em função das condições experimentais de inundação.	
l = 40 cm; dp = 5,1 cm e dc = 5,3 cm.....(	57)
Figura (3.4) - Gráfico para cálculo da velocidade característica em função das condições experimentais de inundação.	
l = 40 cm; dp = 5,1 cm e dc = 5,3 cm.....(	58)
Figura (3.5) - Influência da velocidade de rotação na velocidade característica para as duas geometrias estudadas.....(	59)
Figura (3.6) - Comparação entre os resultados relativos à velocidade característica, obtidos experimentalmente neste trabalho com os resultados obtidos pelas correlações propostas por outros pesquisadores.....(	64)

CAPÍTULO - 4

Figura (4.1) - Extração em contato contínuo $R_2 < R_1$(	74)
Figura (4.2) - Escoamento ao redor da gota.....(	80)
Figura (4.3) - Dispositivo para retirada de amostras....(	91)

Figura (4.4) - Fluxogr. simplificado do programa EQUIL3.	(104)
Figura (4.5) - Montagem dos discos rotativos na haste central do extrator P.R.D.C.....	(107)
Figura (4.6) - Influência do número de discos rotativos.	(110)
Figura (4.7) - Influência da relação V_c/V_d ($N_d = 5$)...	(111)
Figura (4.8) - Influência da relação V_c/V_d ($N_d = 7$)...	(112)
Figura (4.9) - Influência da área livre de escoamento $N_d = 5$	(113)
Figura (4.10) - Influência da área livre de escoamento $N_d = 7$	(114)
Figura (4.11) - Comportamento do corante num compartimen- to do ext. em função do aumento da vel. rot. dos discos. E.B.TAMBOURGI ³⁰ (1989)...	(118)
Figura (4.12) - Comparação entre os resultados exp. e os resultados obtidos pela cor. (4.74), pa- ra a eficiência de sep. (λ).....	(125)

ANEXOS

Figura (A - IV.1) Curva de calibração do rotâmetro de água.....	(147)
Figura (A - IV.2) Curva de calibração do rotâmetro de n-butanol.....	(148)

INDICE DAS TABELAS

CAPÍTULO - 2

Tabela (2.1) - Variação da área livre de escoamento.....	(36)
Tabela (2.2) - Geometrias utilizadas nos experimentos para a determinação das condições de inundação.....	(39)
Tabela (2.3) - Geometrias e variáveis utilizadas.....	(41)

ANEXOS

Tabela (A - I.1) - Resultados experimentais relativos a inundação, $l = 40$ cm ; $dp = 5,3$ cm e $dp = 5,1$ cm.....	(135)
Tabela (A - I.2) - Comparação entre os resultados obtidos em diversos estudos para a velocidade característica.....	(136)
Tabela (A - II.1) - $Nd = 7$; $Al = 40\%$	(138)
Tabela (A - II.2) - $Nd = 7$; $Al = 20\%$ periferia.....	(138)
Tabela (A - II.3) - $Nd = 7$; $Al = 20\%$ central.....	(138)
Tabela (A - II.4) - $Nd = 7$; $Al = 20\%$ centro - periferia.....	(139)
Tabela (A - II.5) - $Nd = 5$; $Al = 20\%$ centro - periferia.....	(139)
Tabela (A - II.6) - $Nd = 5$; $Al = 20\%$ periferia.....	(139)
Tabela (A - II.7) - $Nd = 5$; $Al = 20\%$ central.....	(140)

INDICE DAS LISTAGENS

- Programa EQUIL3.....(150)
- Arquivo INPUT.DAT.....(165)
- Arquivo OUTPUT.DAT.....(167)
- Programa ADTRANSF.....(170)
- Arquivo TRANSF1.DAT.....(175)
- Arquivo TRANSF2.DAT.....(178)

Tabela (A - II.8) - Nd = 5; Al = 40%.....	(140)
Tabela (A - IV.1) - Resultados experimentais obtidos na calibração do rotâmetro de água.....	(145)
Tabela (A - IV.2) - Resultados experimentais obtidos na calibração do rotâmetro de n-butanol	(146)

INTRODUÇÃO

A extração líquido - líquido vem sendo utilizada, há muitos anos, como uma poderosa técnica laboratorial de separação. Seu emprego abrange, também diversos setores industriais como, extração de metais, purificação de antibióticos, combate a poluição e muitos outros. No entanto, sua maior aplicação se concentra na indústria petroquímica.

Com a modernização dos processos industriais e as alterações nas regras sócio - econômicas verificadas ultimamente em todo o nosso globo terrestre, existe uma grande procura por tecnologias alternativas, econômica ou tecnicamente mais viáveis que as técnicas convencionais. Neste sentido a extração líquido - líquido mostra - se ser um campo tecnológico extremamente interessante, tanto do ponto de vista básico como aplicado. Sendo um processo de separação a extração líquido - líquido compete com outros métodos de separação, tais como, destilação, cristalização, entre outros. A escolha entre os métodos, normalmente, é realizada por critérios puramente econômicos.

A extração líquido - líquido por ser um método indireto de separação, exige a introdução de uma nova substância no sistema (o solvente), e até o momento é empregada nos casos em que um outro método direto se apresenta anti - econômico ou impraticável, como nos casos em que os componentes,

são pouco solúveis, têm baixa volatilidade relativa, são sensíveis a temperatura, têm pontos de ebulição próximos ou quando o componente desejado é pouco volátil e está presente em pequena quantidade na solução.

No presente trabalho objetiva - se estudar e desenvolver um extrator de discos rotativos, com vantagens econômicas tanto na instalação como na operação e manutenção em relação aos extratores convencionais de discos rotativos. Este extrator poderá ser utilizado em processos de produção de ácido fosfórico, obtido via ataque da rocha fosfática com ácido clorídrico. Atualmente no Brasil o ácido fosfórico é produzido pelo ataque da rocha fosfática por ácido sulfúrico. Neste processo o enxofre necessário para a produção do ácido sulfúrico é totalmente importado e durante o processo ocorre a formação de fosfogesso, sulfato de cálcio, que é um sub - produto insolúvel de baixa comercialização.

Desta forma a produção de ácido fosfórico com ataque da rocha fosfática por ácido clorídrico, torna - se altamente viável, pois o ácido clorídrico se encontra em excesso em nosso mercado. Esta alternativa apresenta como inconveniente a produção de cloreto de cálcio solúvel na solução de ácido fosfórico resultante. Porém a remoção do cloreto de cálcio da solução, pode ser obtida através da extração líquido - líquido.

A utilização de extratores verticais nos processos de extração líquido - líquido se justifica pelo fato destes equipamentos ocuparem pequena área, terem boa eficiência

de separação, bem como apresentarem facilidades de operação e manutenção.

Portanto, dentro do objetivo maior, que é a obtenção de dados que permitam a utilização do extrator de discos perfurados como alternativa tecnológica para os processos de extração líquido - líquido, pretende - se estudar as condições de transferência de massa deste extrator. Com este propósito iniciamos este trabalho, e no Capítulo 1 analisamos a literatura disponível, que nos revela que, atualmente, somente o comportamento hidrodinâmico, o consumo de energia e as condições de inundação foram estudas para este tipo de extrator sendo que existem poucas informações referentes as condições de transferência de massa.

No Capítulo 2 é apresentada uma descrição detalhada dos materiais, equipamentos e métodos utilizados para a obtenção dos resultados experimentais. Esta descrição inclui as modificações do equipamento e as diferentes condições operacionais empregadas na realização dos diversos testes experimentais.

O Capítulo 3, nos mostra os resultados experimentais obtidos quando se realizou um estudo comparativo entre os resultados experimentais obtidos com os citados na bibliografia para as condições de inundação do extrator, e também, a obtenção da região de escoamento em função da velocidade de rotação dos discos, para sistema bifásico com transferência de soluto entre as fases.

No Capítulo 4, estabelecemos as condições de transferência de massa, em escoamento bifásico contra - corrente. Os resultados são apresentados na forma de uma correlação empírica em termos de eficiência de separação do extrator, importante parâmetro para o projeto de extratores em escala industrial.

Por último, apresentamos uma conclusão global envolvendo um resumo de todas as conclusões encontradas, contendo algumas recomendações para trabalhos posteriores.

CAPÍTULO 1

ANÁLISE DA LITERATURA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Um dos problemas mais comumente encontrados em Engenharia Química é a separação dos constituintes de uma mistura líquida homogênea composta de dois ou mais componentes, que podem ser líquidos ou sólidos dissolvidos. Esta separação pode ser realizada utilizando-se um processo de destilação, ou extração líquido - líquido, entre outros. Nos últimos anos, principalmente devido a crise energética e consequente necessidade de procurar alternativas mais economicamente viáveis para uma dada separação, tem - se utilizado de maneira crescente a extração líquido - líquido, também denominada extração por solvente. Esta crescente utilização se torna mais evidente comparando - se o grande número de novos equipamentos desenvolvidos no campo da extração por solvente e a sua utilização em muitas separações onde antes se utilizava a destilação.

Na extração líquido-líquido a separação de um componente da solução homogênea líquida se faz pela adição de um outro constituinte líquido, insolúvel ou parcialmente solúvel na solução, o *solvente*, no qual o componente a ser extraído da solução, o *solute*, é preferencialmente solúvel. O soluto difunde-se no solvente com uma velocidade característica até

que sejam atingidas as concentrações de equilíbrio em cada uma das fases (C_R^e e C_E^e).

A extração por solvente vem sendo aplicada há muitos anos como uma poderosa técnica laboratorial de separação de constituintes líquidos. Mas a sua aplicação industrial em larga escala teve início, apenas, nas primeiras décadas deste século, quando se buscava uma técnica para remoção de hidrocarbonetos aromáticos do querosene. Deste então teve grande desenvolvimento na indústria abrangendo os mais diversos setores, desde a extração de metais nobres até a purificação de antibióticos, destacando-se na indústria petroquímica, onde é usada para remover componentes indesejáveis dos óleos lubrificantes e de outras frações de petróleo cru. Outras aplicações importantes são a separação do nióbio do tântalo e a separação do ácido fosfórico produzido via ácido clorídrico.

Atualmente na indústria emprega - se não somente equipamentos por estágios, mas também equipamentos de contato contínuo. .

1.1 - SISTEMAS EM ESTÁGIOS OU BATELADA

Estes sistemas são indentificados por uma série de estágios formados por tanques misturadores - decantadores, onde a solução e o solvente são misturados até serem atingidas as concentrações de equilíbrio em ambas as fases.

em seguida deixa-se decantar a fase mais densa e, então, realiza-se a separação das fases antes de serem enviadas para próximo estágio, como mostrado na figura (1.1).

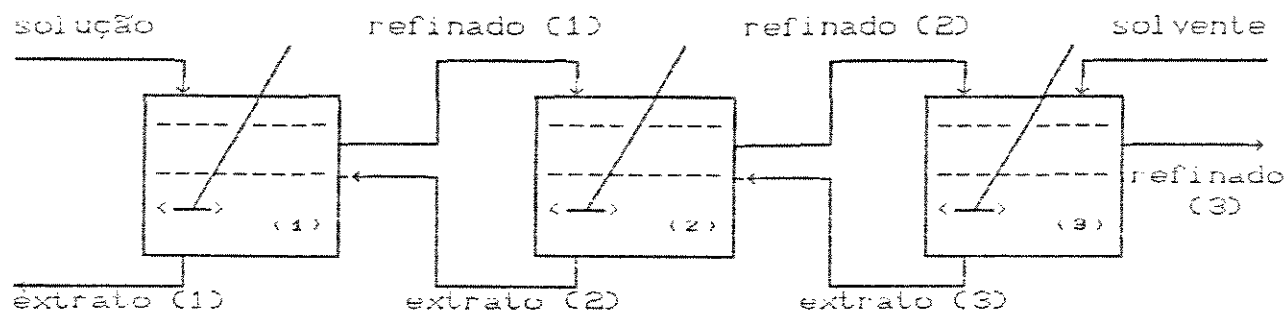


Figura (1.1) Sistema de estágios em contracorrente.

Nestes equipamentos são obtidas altas eficiências de separação em cada estágio, e isto facilita a realização do projeto onde deseja-se otimizar o volume de cada estágio de mistura e a relação entre as fases necessárias para uma determinada separação. A grande desvantagem destes equipamentos é o grande espaço físico requerido para sua instalação, principalmente nos casos em que o tempo para se atingir o equilíbrio ou a decantação da fase densa é muito grande.

1.2- SISTEMAS DIFERENCIAIS OU CONTÍNUOS

Nestes sistemas os líquidos escoam

continuamente em contra-corrente, sem misturadores ou decantadores intermediários, e isto ocorre normalmente em colunas verticais. O escoamento em contra - corrente se dá em função da *diferença de densidade* entre os líquidos em contato na coluna. A fase mais densa é alimentada no topo e flui descendente na coluna e a fase menos densa é alimentada na base e flui em direção ao topo da coluna. Somente uma das fases pode ser introduzida na coluna à vazões pré- fixadas, sendo que a vazão da segunda fase será limitada pela vazão da primeira fase e pelas propriedades físicas e químicas de ambas. Estas colunas de contato diferencial são equipamentos mais compactos e ocupam um menor espaço físico que os anteriores.

As colunas de contato diferencial podem ser divididas em quatro classes principais:

- 1° Colunas baseadas apenas na força da gravidade.
- 2° Colunas agitadas por pulsações.
- 3° Colunas mecanicamente agitadas.
- 4° Extratores baseados na força centrífuga.

Nos equipamentos da primeira classe a força motriz para a promoção do contato entre as fases (solução e solvente ou fase contínua e dispersa), e portanto para a transferência de massa é fornecida apenas pela ação da força gravitacional, devida a diferença de densidades entre as duas fases. Representam os equipamentos mais simples dos extratores diferenciais utilizados na extração por solvente, apresentam baixo custo de instalação, manutenção e ocupam reduzido espaço físico. Como principal inconveniente apresentam baixa eficiência

de separação. Colunas de " SPRAY ", colunas de recheios e colunas de pratos perfurados, são exemplos típicos destes equipamentos.

Nos extratores da segunda classe, temos a força da gravidade e a ação da agitação causada pelas pulsações, atuando conjuntamente como força motriz para a transferência de massa na coluna. Nestes equipamentos a eficiência de separação é aumentada apreciavelmente em relação aos equipamentos anteriores. O principal inconveniente é o alto consumo de energia necessário para produzirmos estas pulsações.

Nas colunas mecanicamente agitadas, que compõe a terceira classe de equipamentos, temos a força da gravidade atuando em conjunto com a energia introduzida na coluna pela agitação mecânica. Esta agitação é produzida por uma série de dispositivos rotativos no interior da coluna (discos rígidos, discos perfurados, pás, turbinas, etc). O grau de dispersão e consequentemente o grau de transferência de massa é substancialmente aumentado em relação aos outros equipamentos. Os principais extratores desta classe são: o extrator " OLDSHUE - RUSTON ", o extrator " SCHEIBEL " e o extrator de discos rotativos RDC todos citados por R.E.TREYBAL⁽¹⁴⁾ (1968), os quais são mostrados na figura (1.2).

Os equipamentos da quarta classe utilizam a força centrífuga como força motriz na transferência de massa, são de desenvolvimento mais recente. Estes extratores centrífugos tem alta eficiência de separação, ocupam reduzido espaço físico mas tem como desvantagem o alto custo de implantação.

A seleção de uma coluna para uma dada

separação é geralmente função de variáveis econômicas além de fatores ligados diretamente com o sistema líquido utilizado. A presença de sólidos ou a formação de emulsão, devem ser levados em conta nos critérios de seleção de um dado extrator. Colunas de discos rotativos, por apresentarem uma boa relação eficiência capacidade, excelente flexibilidade de operação e terem um consumo médio de energia são apontados por E.D.OLIVER⁽¹²⁾(1966) como a melhor alternativa para uma dada operação. Esta flexibilidade de operação também é citada por H.J.VERMIJS e H.A.KRAMERS⁽⁴⁾(1954) como principal vantagem das colunas de discos rotativos. Neste tipo de coluna a facilidade de contato entre as duas fases líquidas depende principalmente da velocidade de rotação. Pelo ajuste desta variável independente, podemos encontrar as condições mais favoráveis para um dado processo de separação.

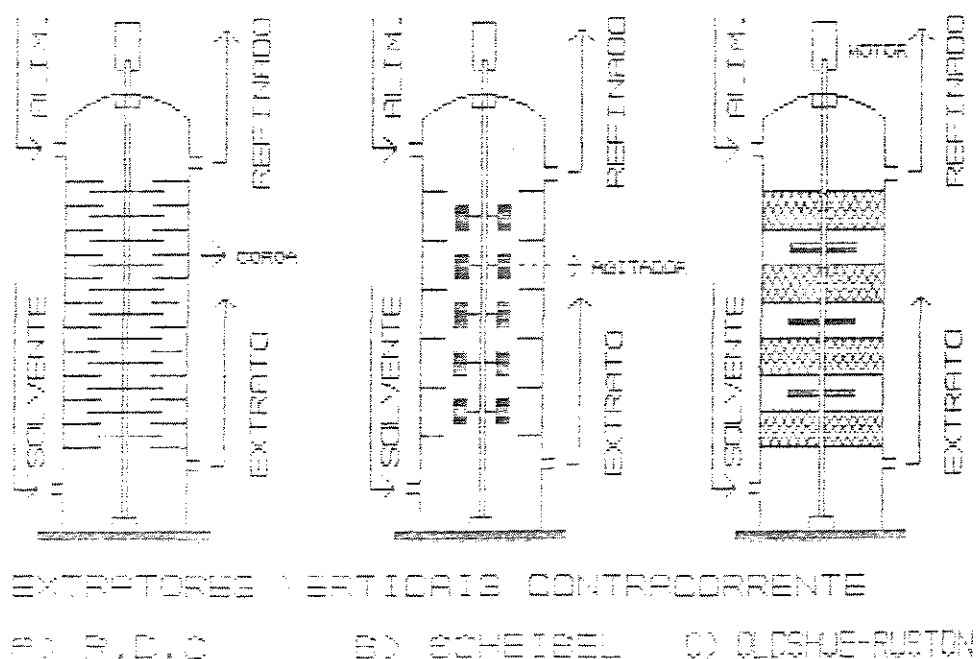


Figura (1.2) Extratores mecanicamente agitados.

1.2.1- O EXTRATOR DE DISCOS ROTATIVOS

O extrator de discos rotativos (RDC) foi introduzido primeiramente por G.H.REMAN⁽³⁾ (1951) para aplicações específicas na indústria petroquímica. Esta coluna é formada por vários compartimentos delimitados por uma série de chicanas horizontais em forma de coroas circulares colocadas no interior da coluna, tendo um disco rotativo rígido em cada compartimento, isto é, entre uma coroa e outra, como mostrado na figura (1.3).

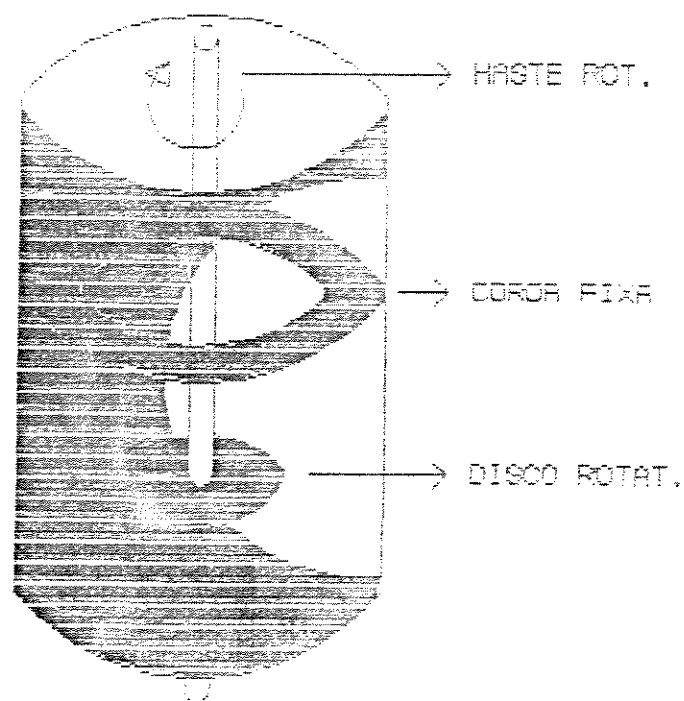


Figura (1.3) Detalhe do interior do extrator RDC.

G.H.REMAN⁽³⁾ (1951) utilizou vários fluidos com dois sistemas básicos. (1) Água - metil-isobutilcetona - ácido acético. (2) Água - querose - n-butilamina. Este autor determinou a eficiência de separação deste equipamento, em função das velocidades de rotação utilizadas. A capacidade total introduzida no interior do equipamento $(Q_c + Q_d)$, foi relacionada com o tamanho médio das gotas ascendentes da fase dispersa, sendo o tamanho das gotas uma função da velocidade de rotação dos discos, também, foi relacionada com a quantidade de energia introduzida por unidade de volume pelo grupo adimensional mostrado abaixo:

$$\frac{N^3 \cdot dp^3}{h \cdot dc^2} \quad (1.1)$$

onde N é a velocidade de rotação dos discos, dp é o diâmetro dos discos, dc é o diâmetro interno da coluna e h é a altura do compartimento

G.H.REMAN⁽³⁾ (1951) concluiu que o fluxo entre dois discos rotativos, ou em cada compartimento era do tipo *toroidal*, onde dois vórtices de sentido de rotação contrários são gerados juntos de modo a formar um vortex completo, fig. (1.4).

De acordo com as observações experimentais e medidas feitas por G.H.REMAN⁽³⁾ (1951), as velocidades de inundação da coluna de discos rotativos variam de sistema para sistema e permaneceram constantes com a variação dos RDCs; e a eficiência de transferência de massa por estágio não sofre variações durante a mudança de escala, no projeto de

equipamentos. Na análise da eficiência de transferência de massa o autor não se utilizou de parâmetros de mistura, como o coeficiente de dispersão axial, que caracteriza com maior precisão a transferência de massa no interior do extrator, como verificado na prática por T.MISEK⁽⁹⁾(1963).

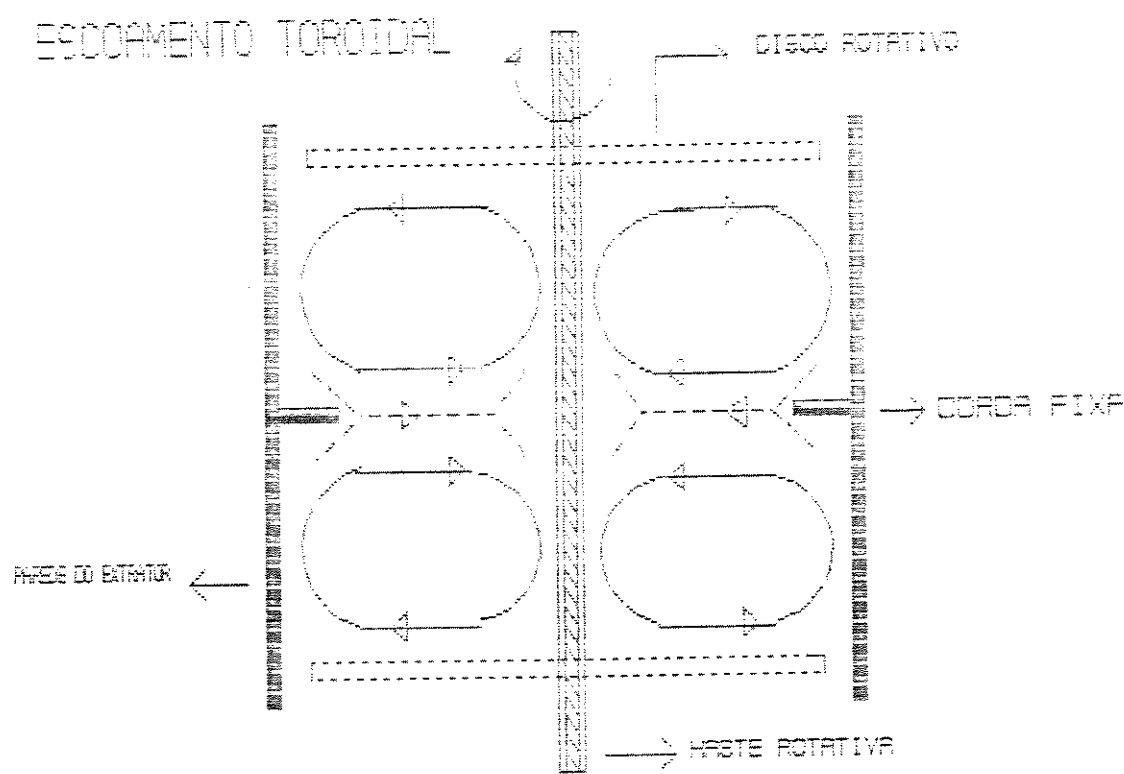


Figura (1.4) Escoamento padrão observado por G.H.REMAN^(a)(1951).

estudaram o efeito de variações da velocidade de rotação, carga total introduzida no equipamento e da razão entre a vazão da fase dispersa e da fase contínua, na eficiência de uma coluna de discos rotativos, com 410mm de diâmetro interno, utilizando o sistema metil- isobutilcetona - água - ácido acético . Variações geométricas, tais como espaçamento, número de discos rotativos e comprimento da coluna não foram estudadas. Estes autores compararam a eficiência de separação na coluna com a fração volumétrica retida da fase dispersa (hold up), e concluíram que, sob certas condições específicas, a eficiência diminui, e a fração volumétrica retida da fase dispersa aumenta. Estes autores também não investigaram as condições de inundação do equipamento.

D.H.LOGSDAIL e outros⁽⁶⁾(1961). trabalhando com uma coluna de discos rotativos de 600 mm de comprimento e 80 mm de diâmetro interno, estudaram a influência de variáveis geométricas nas condições de inundação da coluna. Para tanto, utilizaram - se dos conceitos de velocidade característica e fração volumétrica retida da fase dispersa. A velocidade característica é calculada a partir da velocidade média de ascensão das gotas em relação a fase contínua (considerada como sendo a soma das velocidades superficiais médias das fases dispersa e contínua). Com isto, D.H.LOGSDAIL e outros⁽⁶⁾(1961) assumiram que nas condições de inundação, as vazões de alimentação atingem um valor máximo, e obtiveram a seguinte relação para velocidade característica:

$$\frac{V_D}{x} + \frac{V_C}{(1-x)} = V_n \cdot (1-x) \quad (1.2)$$

onde V_D é a velocidade superficial média da fase dispersa, V_C é a velocidade superficial média da fase contínua e x é a fração volumétrica retida da fase dispersa e V_n a velocidade característica. Estes autores obtiveram a seguinte relação empírica entre os valores da velocidade característica, propriedades físicas dos sistemas utilizados, geometria da coluna e velocidades de rotação, através de análise dimensional e regressão linear multivariável.

$$\frac{V_n \cdot \mu_c}{\sigma} = 0,012 \cdot \left[\frac{\Delta \rho}{\rho_c} \right] \cdot \left[\frac{g}{dp \cdot N^2} \right] \cdot \left[\frac{di}{dp} \right]^{2,3} \cdot \left[\frac{h}{dp} \right]^{0,9} \cdot \left[\frac{dp}{dc} \right]^{2,7} \quad (1.3)$$

onde di é o diâmetro interno da coroa.

Estes autores obtiveram resultados para ambas as direções de transferência de massa usando o sistema tolueno - butilacetato - acetona, os resultados foram correlacionados para este sistema em função da geometria da coluna e velocidade de rotação pela correlação mostrada abaixo:

$$\begin{aligned} \left[\frac{[HTU]_{oc}}{V_C} \cdot \left[\frac{g^2 \cdot \rho_c}{\mu_c} \right]^{1/3} \right] \cdot x &= \left[\frac{x}{K_{oc} \cdot a} \cdot \left[\frac{g^2 \cdot \rho_c}{\mu_c} \right]^{1/3} \right] = \\ &= K \cdot \left[\frac{\mu_c \cdot g}{V_n \cdot (1-x)^3 \cdot \rho_c} \right]^{2 \cdot m/3} \cdot \left[\frac{\Delta \rho}{\rho_c} \right]^{2 \cdot (m-1)/3} \quad (1.4) \end{aligned}$$

onde $[HTU]_{oc}$ é o comprimento global da unidade de transferência de massa da fase contínua e K_{oc} o coeficiente global de transferência de massa da fase contínua.

As constantes K e m desta correlação devem ser determinadas em escala de laboratório para o referido sistema. Esta correlação foi baseada na teoria da transferência de massa de uma gota isolada ascendente da fase dispersa.

G.S.LADDHA⁽¹⁰⁾ (1978) estudaram a hidrodinâmica, a velocidade crítica de rotação e a velocidade característica para sistemas com e sem transferência de soluto entre as fases e, também, realizaram estudos relativos à transferência de massa no extrator RDC. Utilizaram uma série de substâncias como fase dispersa e água como fase contínua. Para estudos com e sem transferência de soluto em escoamento bifásico os autores utilizaram, tolueno e hexano como fase dispersa, água como fase contínua e acetona como soluto. A direção de transferência de massa foi estudada nos dois sentidos de extração. A velocidade de rotação foi variada deste 0rpm até 1.450rpm em colunas de 7,62cm e 10,0cm de diâmetro interno.

Para a operação sem transferência de massa, G.S.LADDHA e outros⁽¹⁰⁾ (1978), obtiveram a seguinte correlação para a velocidade característica:

$$\frac{V_n}{\left[\sigma \cdot \Delta \rho \cdot g / \rho_c^2 \right]^{0,25} \cdot G_f} = C \cdot \left[Fr^{-1} \cdot \psi_2 \right]^n \quad (1.5)$$

onde:

$$Gf = \left[h / d_p \right]^{0,9} \cdot \left[d_i / d_p \right]^{2,1} \cdot \left[d_p / d_c \right]^{2,4}$$

$$Fr^{-1} = d_p \cdot N^2 / g$$

$$\psi_2 = \left[(C \cdot \sigma^3 \cdot \rho_c) / (\mu_c^4 \cdot g) \right]^{0,25} \cdot \left[\Delta\rho / \rho_c \right]^{0,6}$$

onde Fr é o número de Froude.

Analizando - se os resultados experimentais de velocidade característica em função da velocidade de rotação dos discos, estes autores verificaram a existência de duas regiões distintas, a região I onde a velocidade característica é independente da velocidade de rotação dos discos, que ocorre, para baixas velocidades de rotação, e a região II, que ocorre, para altas velocidades de rotação, onde a velocidade característica é função da velocidade de rotação dos discos. Os valores das constantes (C e n) da equação (1.5) para as duas regiões foram estabelecidas pelos autores e são :

Para a região I

$$C = 1,08 \quad , \quad n = 0,08$$

e para a região II

$$C = 0,01 \quad , \quad n = 1,0$$

Para a identificação destas regiões G.S.LADDHA e outros⁽¹⁷⁾(1978) utilizaram o seguinte critério:

Para região I . $(Fr^{-1} \psi_2) > 180,0$

e para região II. $(Fr^{-1} \psi_2) < 180,0$.

Para casos com transferência de massa G.S.LADDHA e outros⁽¹⁷⁾(1978) realizaram medidas experimentais de fração retida da fase dispersa, para os sistemas descritos anteriormente e a partir da análise matemática dos resultados experimentais, propuseram a seguinte correlação generalizada para a velocidade característica:

$$\frac{V_n}{\left[\sigma \cdot \Delta \rho \cdot g / \rho_c^2 \right]^{0,25} \cdot Gr} = \beta \cdot \left[Fr^{-1} \cdot \psi_2^{0,5} \right]^p \quad (1.6)$$

Na região I, para ambas as direções de transferência de massa,

$$\beta = 1,46 \text{ e } p = 0,08 ;$$

na região II . para a direção de transferência de soluto da fase dispersa para a fase contínua, (D --> C);

$$\beta = 0,11 \text{ e } p = 1,0 \text{ e}$$

para a direção da fase contínua para a fase dispersa.(C --> D);

$$\beta = 0,077 \text{ e } p = 1,0$$

O critério que demarca a divisória entre as regiões I e II obtido pelos autores foi

$$(Fr^{-1} \cdot \psi_2^{0,5}) = 16,0 \text{ para a direção (D --> C) e}$$

$$(Fr^{-1} \cdot \psi_2^{0,5}) = 25,0 \text{ para a direção (C --> D).}$$

A velocidade onde ocorre a mudança entre as regiões I e II foi denominada de "velocidade de rotação crítica".

G.S.LADDHA e outros⁽¹⁷⁾(1978) derivaram o modelo de transferência de massa da teoria da renovação superficial de P.V.DANCKWERTS⁽²⁾(1950) assumindo a mesma velocidade interfacial para ambas as fases contínua e dispersa e correlacionando o coeficiente global de transferência de massa e a área interfacial ($K_o \cdot a$) com a velocidade característica. Para a determinação do diâmetro médio das gotas da fase dispersa foi utilizado o método fotográfico proposto por R.B.OLNEY⁽¹¹⁾(1964) e para a obtenção das correlações para ambas as direções de transferência de soluto estes autores não levaram em conta os efeitos de mistura axial no interior do extrator.

G.S.LADDHA e outros⁽¹⁷⁾(1978) determinaram as seguintes correlações experimentais para a transferência de

soluto, para a região I:

$$K_{OD} \cdot a = C^* \cdot (x - 1) \cdot x \cdot \left[\frac{g^3 \cdot \Delta \rho^3}{\sigma \cdot \rho_c^2} \right]^{0,25} \cdot (\psi^{-1}) \quad (1.7)$$

onde: $C^* = 0,068$

Para a região II

$$K_{OD} \cdot a = \alpha \cdot x \cdot (1 - x) \cdot \left[\frac{g^3 \cdot \Delta \rho^3}{\sigma \cdot \rho_c^2} \right]^{0,25} \cdot \left[\frac{g}{dp \cdot N^2} \right] \cdot \psi_2^n \cdot \psi_1^{-1} \quad (1.8)$$

onde $\psi^1 = [(Sc)^{0,5} + m \cdot (Sc)^{0,5}]$,

(Sc) o número de Schmit ($\mu / \rho \cdot D$).

$n = -0,5$; $\alpha = 0,95$ e m o coeficiente de distribuição $\left[C_E / C_R^e \right]$.

D é difusividade do soluto e K_{OD} o coeficiente global de transferência de massa da fase dispesa.

As correlações mostradas acima foram utilizadas para ambas as direções de transferência de soluto.

S.H.ZHANG e outros⁽²²⁾ (1981) utilizaram os seguintes sistemas, querosene - glicerina para estudos sem transferência de massa e querosene - água - ácido butírico para estudos com transferência de massa. A coluna utilizada era formada por um tubo de vidro de 10cm de diâmetro interno e 2m de

altura, na qual existiam 40 compartimentos semelhantes ao da coluna de G.H.REMAN⁽⁹⁾(1951).

S.H.ZHANG e outros⁽²²⁾(1981), obtiveram correlações para a velocidade característica abaixo e acima da velocidade crítica de rotação com e sem transferência de soluto entre uma fase e outra, e correlações para K_{OD} considerando a ocorrência de mistura axial no interior do extrator, pela determinação do número de Peclet

$$Pe = V \cdot L / E \quad (1.9)$$

onde V é a velocidade superficial, L comprimento efetivo do extrator e E coeficiente de dispersão axial.

Os autores verificaram que como em outros tipos de extratores diferenciais agitados em contracorrente, a ação dos discos rotativos aumenta a eficiência da coluna pelo aumento da turbulência e da área interfacial.

Através de análise por regressão exponencial múltipla S.H.ZHANG e outros⁽²²⁾(1981) sugeriram a seguinte correlação para a velocidade característica na região I:

$$\frac{V_n}{\left[\sigma \cdot \Delta \rho \cdot g / \rho_c^2 \right]^{0,25} \cdot Gf} = 0,798 \left[\frac{\sigma^3 \cdot \rho_c}{\mu^4 \cdot g} \right]^{0,029} \cdot \left[\frac{g}{dp \cdot N^2} \right]^{0,26} \quad (1.10)$$

e para a região II :

$$\frac{V_n}{\left[\sigma \cdot \Delta \rho \cdot g / \rho_c^2 \right]^{0,25} \cdot Gf} = \beta \cdot \left[Fr^{-1} \cdot \psi_2^{0,5} \right]^p \quad (1.11)$$

onde para a direção (D --> C);

$$\beta = 0,11 \quad , \quad p = 1,0 \quad \text{e} \quad (Fr^{-1} \cdot \psi_2^{0,5}) = 16,0$$

para a direção (C --> D);

$$\beta = 0,077 \quad , \quad p = 1,0 \quad \text{e} \quad (Fr^{-1} \cdot \psi_2^{0,5}) = 25,0$$

e sem transferência de soluto

$$\beta = 0,092 \quad , \quad p = 1,0 \quad \text{e} \quad (Fr^{-1} \cdot \psi_2^{0,5}) = 19,0$$

Nos estudos com transferência de massa, na coluna de extração, S.H.ZHANG e outros⁽²²⁾ (1981) obtiveram os coeficientes globais de transferência de massa entre a fase contínua e a população de gotas ascendentes de diversos tamanhos da fase dispersa, através de um mecanismo de transferência de massa na gota desprezando os efeitos da redispersão e coalescência das gotas. Os autores obtiveram os seguintes resultados:

$$\frac{K_{od}}{K_{od,e}} = 0,941 + 0,231 \cdot \left[Pe_{dr} \cdot 10^{-4} \right] + 0,0132 \cdot \left[Pe_{dr} \cdot 10^{-4} \right]^2$$

(1.12)

onde $Pe_{dr} = V_s \cdot dp_s / D_D$. V_s é a velocidade de deslizamento entre os dois fluxos. D_D é a difusividade do soluto da fase dispersa. K_{od} é o coeficiente global de transferência de massa da fase dispersa, dp_s é o diâmetro médio de Sauter da gota ascendente da fase dispersa e $K_{od,e}$ é o coeficiente global de transferência de massa calculado através do modelo de gota estagnada.

1.2.2- O EXTRATOR DE DISCOS ROTATIVOS PERFURADOS

(P.R.D.C.)

B.J. POPE e N.R. SHAH⁽¹⁵⁾ (1971), verificaram que a eficiência do extrator líquido - líquido em contracorrente é aumentada pela melhoria do contato entre as fases no plano ortogonal em relação ao fluxo. Retorno axial da fase dispersa. (back mixing) e da fase contínua. (back flow), sempre são prejudiciais para a transferência de massa no interior do extrator. Estes autores construíram um extrator de discos rotativos perfurados (P.R.D.C.) de alta eficiência, de tal forma a minimizar a dispersão axial. Este extrator consistia de uma série de discos perfurados rotativos montados em uma carcaça

tubular, intercalados por discos perfurados fixos, (stators). Os resultados experimentais obtidos neste tipo de equipamento mostraram a ocorrência de um excelente contato entre as fases, com conseqüente aumento das taxas de dispersão com um mínimo de retorno axial.

O extrator montado por B.J. POPE e N. R. SHAH⁽²¹⁾ (1971) foi operado com varios espaçamentos entre os discos e várias velocidades de rotação com a finalidade de determinar a eficiência de separação e a capacidade total do extrator ($Q_c + Q_d$). Os testes foram realizados com o sistema MIBK - água - ácido acético. Os autores apresentaram correlações para a capacidade total do extrator no ponto de inundação e para a eficiência de separação em termos do comprimento do compartimento unitário de transferência de massa, utilizando o modelo do extrator diferencial.

O extrator P.R.D.C. foi comparado pelos autores com os extratores de discos rotativos fixos através do índice de eficiência (I_e), definido como :

$$I_e = \frac{\text{capacidade total (} Q_c + Q_d \text{)}}{\text{(H.T.U.)}_{\text{teórico}}} \quad (1.13)$$

Como mostrado na equação acima, este índice combina a eficiência de separação e a capacidade do extrator. O extrator P.R.D.C., mostrou-se, desta forma, ser um dos mais eficientes e de maior capacidade de operação em relação aos outros extratores diferenciais e também obteve índices de

eficiência semelhantes aos outros para uma velocidade de rotação, aproximadamente, dez (10) vezes menor.

L.M.NELSON de GÖES⁽²⁹⁾(1987), estudou um extrator do tipo P.R.D.C. formado apenas por discos rotativos sem discos fixos entre eles, montados em uma haste comum concêntrica a uma carcaça cilíndrica, com o objetivo de obter as características de dispersão e hidrodinâmicas do extrator. O autor realizou testes com as seguintes variáveis geométricas (número de discos rotativos, comprimento do extrator, espaçamento entre os discos e modificações na área livre de escoamento) e as seguintes variáveis operacionais (velocidade de rotação da haste e vazão da fase contínua). Foram utilizadas colunas de acrílico com 5,4cm de diâmetro interno, 20cm e 30cm de comprimento, onde água foi utilizado como fluido contínuo, introduzido na base da coluna e retirado no topo da mesma. Para a determinação das características de agitação L.M. NELSON de GÖES⁽²⁹⁾(1987) mediu as concentrações do traçador sulfato de cobre ($\text{Cu} \cdot \text{SO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$), introduzido na base da coluna e retirado no topo, utilizando a técnica teste traçador " tipo pulso ". Para as características de agitação o autor determinou a potência necessária para a agitação do fluido que circula no interior do extrator. Através de análise dimensional e regressão linear múltipla L.M. NELSON de GÖES⁽²⁹⁾(1987) obteve a seguinte correlação para o número de dispersão ($E \propto V \cdot h$), que caracteriza o grau de mistura no extrator:

$$\frac{E}{V_c \cdot h} = \left[\frac{\mu}{d_p^2 \cdot N \cdot \rho_c} \right]^{0,2704} \cdot \left[\frac{N^3 \cdot d_p^5 \cdot \rho_c}{P \cdot g} \right]^{0,0127} \cdot \left[\frac{d_p \cdot N}{V_c} \right]^{0,231} \cdot \left[\frac{L \cdot Nd}{d_p} \right]^{0,637} \quad (1.14)$$

Este autor não realizou testes para escoamento bifásico e relativos à transferência de massa no interior do extrator.

E. B. TAMBOURGI⁽³⁰⁾ (1989), estudou as características hidrodinâmicas e de operação do extrator de discos rotativos perfurados, formado por uma carcaça tubular de 5.4cm de diâmetro interno, com 20cm ou 30cm de comprimento efetivo e discos perfurados de 5.2cm de diâmetros, montados em uma haste comum concêntrica à carcaça. O autor utilizou dois diferentes sistemas em seus estudos: (1) água como fase contínua e (2) água - n-butanol como fase contínua e fase dispersa respectivamente. E. B. TAMBOURGI⁽³⁰⁾ (1989) realizou estudos dos números de potência, das condições de inundação e da fração volumétrica retida da fase dispersa, com as seguintes variáveis geométricas: número de discos rotativos, espaçamento entre os discos, altura da coluna e área livre de escoamento e das seguintes variáveis operacionais: velocidade de rotação da haste e vazão total ($Q_c + Q_d$) através da coluna. Obteve as seguintes correlações utilizando método de análise dimensional e regressão linear multivariável:

Nos estudos relativos à potência necessária para a agitação E. B. TAMBOURGI⁽³⁰⁾ (1989) obteve a seguinte correlação para o número de potência:

$$Np = A \cdot \left[\frac{1}{Re^*} \right]^B \cdot \left[Al \right]^C \cdot \left[\frac{dc}{L} \right]^D \quad (1.15)$$

onde Np é o número de potência, Al é a área livre de escoamento e

$$Re^* = \frac{dp^2 \cdot N \cdot \rho}{\mu_c} \rightarrow \text{Número de Reynolds de agitação} \quad (1.16)$$

onde para 7 discos rotativos temos

$$A = 0.13 \cdot 10^4, \quad C = 1.43$$

$$B = 1.26, \quad D = 0.99$$

para 5 discos rotativos

$$A = 0.82 \cdot 10^3, \quad C = 0.66$$

$$B = 0.77, \quad D = 3.02$$

e para 3 discos rotativos

$$A = 0.42 \cdot 10^2, \quad C = 1.61$$

$$B = 0.14, \quad D = 5.4$$

Para a velocidade característica

E. B. TAMBOURGI⁽³⁰⁾ (1989) obteve a seguinte correlação :

$$\frac{Vn}{L \cdot N} = 1.51 \cdot \left[\frac{\mu_c}{dp^2 \cdot N \cdot \rho_c} \right]^{0.856} \cdot \left[Al \right]^{-0.018} \cdot \left[\frac{Nd}{Nd + 1} \right]^{-1.319} \cdot \left[\frac{h}{dp} \right]^{-2.630} \cdot \left[\frac{g}{N^2 \cdot dp} \right]^{0.142} \quad (1.17)$$

E. B. TAMBOURGI⁽³⁰⁾ (1989), fez também observações relativas ao tipo de escoamento no interior do

extrator, foi constatado ser do tipo toroidal como descrito por G.H.REMAN⁽³⁾(1951) e também, quanto à velocidade crítica de rotação, mas não determinou um critério para a determinação desta velocidade.

O autor, no entanto, não fez estudos referentes às condições de transferência de massa no interior do extrator P.R.D.C..

1.3- CONCLUSÃO

A análise da literatura realizada mostra que a maioria dos autores se preocuparam com estudos hidrodinâmicos e de transferência de massa, utilizando a primeira concepção surgida dos extratores de discos rotativos desenvolvida por G.H.REMAN⁽³⁾(1951). Apenas recentemente houve a preocupação com outras formas de construção geométrica do extrator de discos rotativos, como por exemplo, a variação da área livre de escoamento, (caracterizada pela ausência de coroas circulares fixas e por discos rotativos com diferentes perfurações), nos estudos hidrodinâmicos, operacionais e de transferência de massa neste tipo de extrator.

Este extrator é de concepção arrojada, não foi completamente estudado e também não temos notícias do uso deste tipo de equipamento em escala, quer laboratorial ou industrial. O objetivo deste trabalho é a obtenção de resultados

experimentais que nos facilitem o estabelecimento das reais condições de operação deste tipo de extrator (P.R.D.C.), para posterior desenvolvimento de projeto em escala industrial. Fica clara a necessidade da realização de estudos das características hidrodinâmicas e de transferência de massa no interior do extrator para escoamento bifásico com troca de soluto entre as fases.

CAPÍTULO 2

MATERIAIS E MÉTODOS

2.1 - INTRODUÇÃO:

No presente capítulo serão apresentados os equipamentos e métodos experimentais utilizados para os estudos das condições de inundação e transferência de massa no interior do extrator P.R.D.C. com escoamento bifásico com transferência de soluto, entre as fases. Uma descrição detalhada dos equipamentos e técnicas utilizadas no diversos experimentos realizados é apresentada na seção (2.2).

As características de inundação do extrator serão conhecidas através da determinação das vazões das fases contínua e dispersa no ponto de inundação " flood point ". As características de transferência de soluto serão conhecidas através da determinação das concentrações do soluto nas entradas e saídas do equipamento, fases dispersa e contínua e fases extrato e refinado, respectivamente, assim como o cálculo das concentrações no equilíbrio das fases.

Os procedimentos experimentais para a determinação das características de inundação são apresentados na na seção (2.3.1) e para a determinação das características de transferência de massa são apresentadas na seção (2.3.2). Os

procedimentos utilizados para a interpretação e análise dos resultados são apresentados na seção (2.3.3). O conhecimento destas características nos permite estabelecer as melhores condições de operação do extrator P.R.D.C.

2.2- EQUIPAMENTOS E MONTAGEM EXPERIMENTAL

A montagem experimental utilizada neste trabalho visou a obtenção das características de inundação e transferência de massa no extrator de discos rotativos perfurados (P.R.D.C.). Para este fim foram construídas duas colunas, uma de PVC rígido com 5.3cm de diâmetro interno e 40.0cm de comprimento e outra de acrílico transparente com as mesmas dimensões da anterior. No interior foram colocados 5 ou 7 discos de PVC rígido com 5.1cm de diâmetro e 0.4cm de espessura, formando compartimentos de 5.6cm ou 3.6cm de espaçamento entre um disco e outro. Para obtermos os espaçamentos desejados para os experimentos, utilizamos pequenos anéis circulares de 0.6cm de comprimento com rosca interna. Esses anéis foram conectados numa haste rosqueada de PVC e dispostos entre os discos rotativos. Assim, o número de anéis determinou o espaçamento entre os discos. Este detalhes são mostrados na figura (2.1).

Os discos rotativos foram montados coaxialmente numa haste rosqueada de PVC que atravessa a coluna em toda a sua extensão longitudinal. Esta haste de PVC tem 60.0cm

de comprimento e 0.6cm de diâmetro. No topo da coluna ela atravessa um tubo guia de PVC , com diâmetro interno de 0.8cm. um rolamento de aço inoxidável com 2.0cm de diâmetro e 0.36cm de espessura e outro tubo de PVC transparente de 2.4cm de diâmetro interno. O primeiro tubo de PVC e o rolamento foram colocados para evitar vibrações e permitirem a centralização da haste ao longo da coluna. o segundo tubo de PVC tem por finalidade eliminar o efeito do movimento produzido pela rotação da haste sobre a interface líquido-líquido. Na base da coluna a haste atravessava um tubo de PVC transparente de 2.4cm de diâmetro

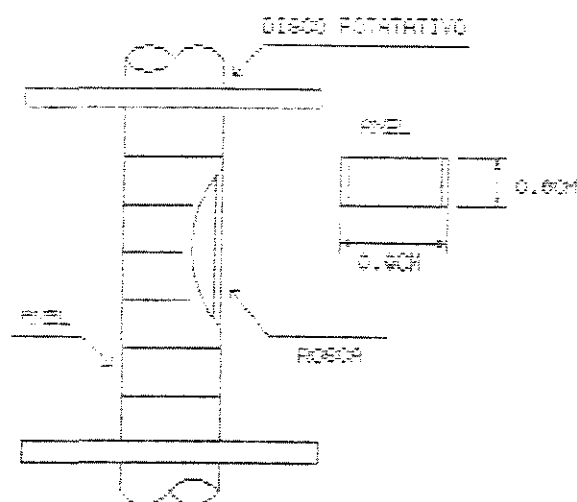


Figura (2.1) Detalhe do espaçamento entre os discos.

interno e foi fixado a outro rolamento idêntico ao anterior com funções semelhantes, como já descrito. A figura (2.2) ilustra esta descrição. A haste foi conectada a um redutor de velocidades com redução de 1/10, construído em nossas oficinas (DESQ - FEO - UNICAMP), este por sua vez redutor foi conectado a um motor BOCH

DE 12V - 200W, corrente contínua, através de tubos flexíveis de borracha de silicone. O controle da velocidade de rotação foi efetuado através de um "dimmer" regulador de tensões. A velocidade de rotação foi medida por meio de um tacômetro digital MICROTEST F45 sem contato, com resolução de 1rpm na faixa de 70 a 999 leituras por minuto, com sensor óptico por emissão de luz infravermelha, focalizado em um cilindro de PVC acoplado a haste de agitação. Este cilindro, que foi pintado de preto fosco tem 3.8cm de diâmetro e 3.0cm de altura, contendo duas fitas refletivas auto adesivas de 1.2 X 1.2cm, separadas entre si por 180°, que nos permitiu obter medidas mais precisas.

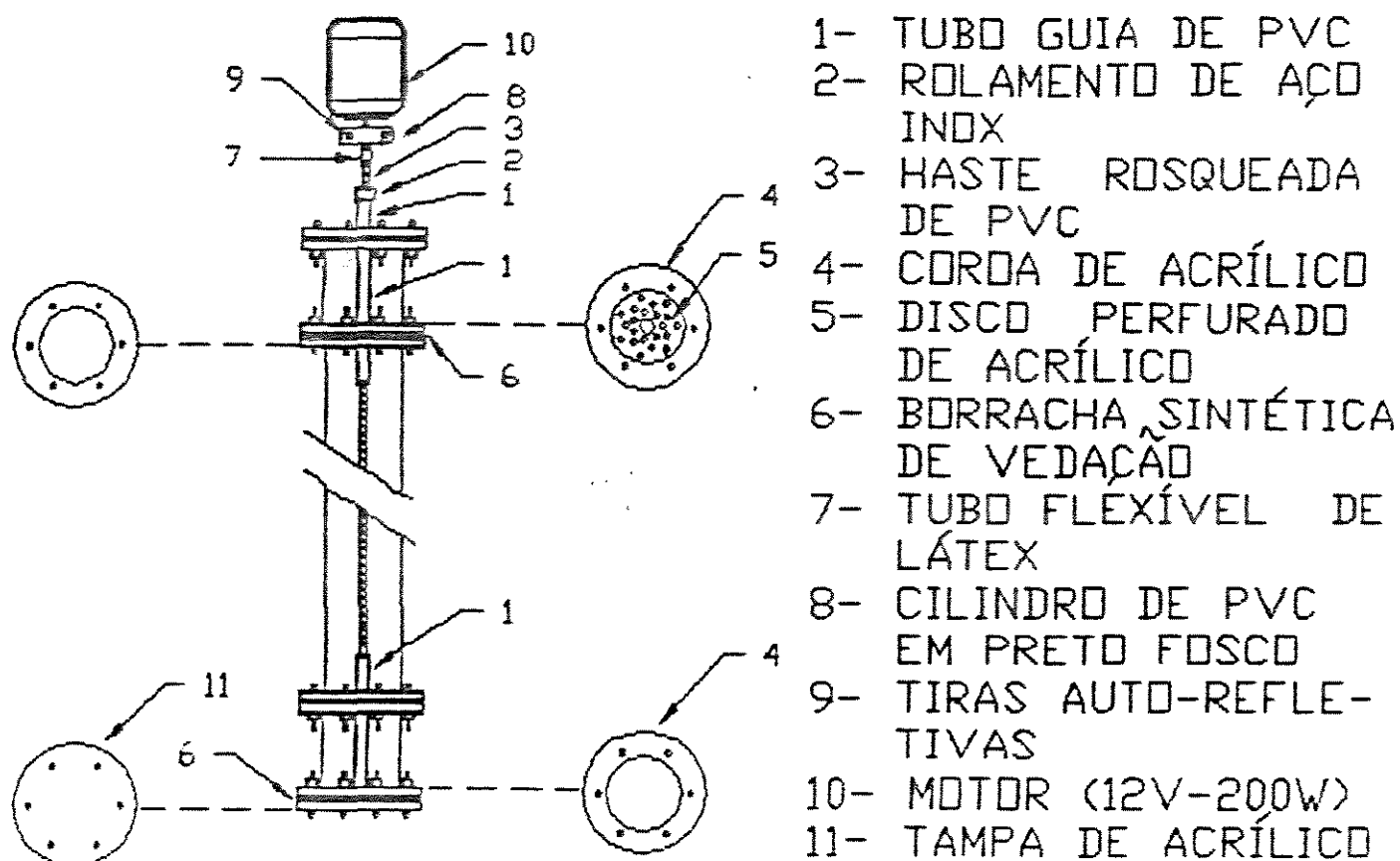
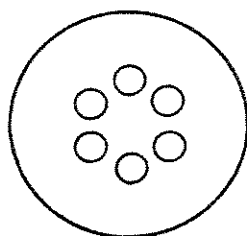
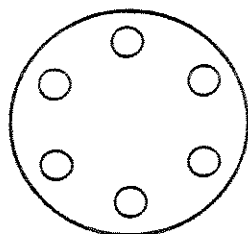


Figura C.2.2) Detalhe da construção do extrator P.R.D.C..

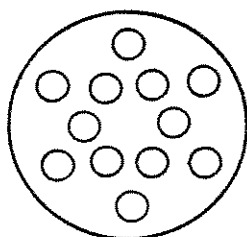
Os discos que foram utilizados nos diversos experimentos são: discos com 6 furos na periferia, discos com 6 furos no centro e discos com 12 furos, com diâmetro de furo de 0,9cm. conforme mostrados na figura (2.3).



DISCO COM 6 FUROS
PRÓXIMO AO CENTRO



DISCO COM 6 FUROS
NA PERIFERIA



DISCO COM 12 FUROS

Figura (2.3) Detalhe dos discos rotativos.

Os discos com furos na periferia foram construídos com 6 furos radialmente equidistantes de 2,0cm do centro do disco, sendo separados por 60° uns dos outros, os discos com furos no centro foram construídos por 6 furos radialmente equidistantes de 1,0cm do centro e sendo separados, também, por 60°, os discos com 12 furos foram construídos com furos equidistantes radialmente 2,0cm do centro (a primeira meia dúzia) e 1,0cm do centro os restantes, com os furos separados entre si por 30° alternadamente centro - periferia. Além destas configurações de discos rotativos também foram realizados experimentos colocando-se alternadamente discos com 6 furos no centro e discos com 6 furos na periferia. A utilização de discos perfurados fez variar a área livre de escoamento no extrator, calculada da seguinte forma:

$$A_l = \frac{\text{Área total de furos}}{\text{Área total do disco}} \quad (2.1)$$

A tabela mostrada a seguir ilustra esta variação.

O extrator utilizado nos experimentos foi flangeado, no topo e na base, formando regiões correspondentes a alimentação e retirada das fases. Estas flanges foram formadas de coroas circulares de acrílico com diâmetro externo de 7,1cm e interno de 6,1cm. A união do corpo do extrator com os compartimentos do topo e da base foi realizada através de 6 parafusos de 1/8 de polegada, colocados equidistantes entre si na

CONFIGURACAO	A1
Discos com 6 furos na periferia	20%
Discos com 6 furos no centro	20%
Discos com furos alternados cen.-per.	20%
Discos com 12 furos	40%

Tabela (2.1) Variação da área livre de escoamento.

coroa, ou flange. A vedação desta união foi realizada com coroa de borracha sintética. Na divisória entre os compartimentos de entrada e saída e o corpo do extrator foram instalados discos de PVC perfurados para evitar a recirculação das fases devido ao escoamento no interior do corpo do extrator, sendo estes discos em número de dois e nestes foram fixados os rolamentos e os tubos de PVC transparentes de 2,4cm de diâmetro interno.

O sistema líquido ternário escolhido para a realização dos estudos referentes a este trabalho foi (água - n-butanol - ácido acético) e optou - se por este sistema pois a relação de densidades e solubilidades entre a água e o n-butanol é propícia para a extração líquido-líquido, as concentrações do ácido acético podem ser determinadas por titulação simples em todas as fases formadas durante a operação do extrator, as propriedades de interesse dos três reagentes são conhecidas e facilmente encontradas na literatura e a curva de equilíbrio do

sistema pode ser determinada teoricamente.

Os procedimentos para a titulação são mostrados no anexo (A - III) e o procedimento para o desenvolvimento do programa computacional para a determinação da curva de equilíbrio do sistema água - n-butanol - ácido acético é mostrado no item (4.2.3).

A vazão da fase contínua (água pura) alimentada no topo da coluna foi controlada por uma válvula de agulha e por um rotâmetro ALLIYNOX calibrado na faixa de $3,5\text{cm}^3/\text{s}$ até $24,0\text{cm}^3/\text{s}$. A vazão da fase dispersa (n-butanol), foi alimentada na base da coluna e foi controlada por uma válvula de agulha e por um rotâmetro OMEL calibrado originalmente na faixa de $1,0\text{cm}^3/\text{s}$ até $5,0\text{cm}^3/\text{s}$. Os procedimentos de calibração dos rotâmetros estão descritos em detalhes no anexo (A - IV).

Para os estudos das condições de inundação o soluto, ácido acético, foi adicionado à fase contínua, água pura. Para os estudos das condições de transferência de massa o soluto foi adicionado à fase dispersa, n-butanol, devido a dificuldades na purificação e reaproveitamento do n-butanol.

2.3- EXPERIMENTOS

Para a retirada dos pontos experimentais foram utilizada água como fase contínua, a qual foi alimentada no topo do extrator com vazão controlada, e a fase dispersa constituída

por n-butanol, foi alimentada por gravidade na base da coluna, com controle de vazão. As fases contínua e dispersa entram em contato íntimo no interior do extrator, onde ocorre a transferência de soluto entre as fases. As fases que deixam a coluna desta forma são: extrato, constituído principalmente por água e por soluto extraído da fase dispersa, esta fase sai do extrator pela base e segue para um reservatório para posterior recirculação ou eliminação e refinado, fase rica em n-butanol a qual, sai do extrator pelo topo e segue para outro reservatório para posterior recuperação.

O controle da operação e separação das fases nos compartimentos de entrada e saída foi realizado com o auxílio de um sifão instalado na saída da fase extrato na base da coluna. Este sifão tinha a finalidade de controlar a altura da interface entre as fases, mantendo o selo de n-butanol, no topo da coluna. A figura (2.4) mostra em detalhes a montagem experimental acima descrita. As concentrações do ácido acético nas fases dispersa, extrato e refinado foram determinadas por titulação volumétrica simples.

2.3.1- DETERMINAÇÃO DO PONTO DE INUNDAÇÃO

Após a alimentação e o controle da vazão da fase contínua, a velocidade de rotação dos discos foi fixada numa faixa de 50rpm e 200rpm. Em seguida aumentamos gradualmente a

vazão da fase dispersa, controlando a altura da interface de separação no topo do extrator com auxílio do sifão, até alcançarmos o ponto de inundação (flood point). Este ponto é caracterizado pela rejeição da fase dispersa e a formação de uma interface na base do extrator. Ocorrendo a inundação foram anotadas as vazões das fase contínua e dispersa e a velocidade de rotação empregada.

Foram realizados experimentos com o procedimento descrito anteriormente, para as seguintes geometrias, com a concentração do soluto fixada em 0,2960mol/l na fase contínua.

Nd	7 Discos				5 Discos		
Al	40 %				20 % Periferia		
N (rpm)	60	100	125	150	175	200	220

Tabela (2.2) Geometrias utilizadas nos experimentos para a determinação das condições de inundação.

Após a retirada destes resultados experimentais de inundação foi obtida a velocidade característica (V_n) através de procedimento descrito por D.H.LOGSDAIL e outros⁽⁶⁾(1957).

2.3.2 - ESTUDO DA TRANSFERENCIA DE MASSA

Com o objetivo de estudarmos o comportamento do extrator P.R.D.C. em relação a transferência de massa foram realizados diversos experimentos onde procurou - se envolver as principais variáveis pertinentes ao estudo: área livre de escoamento, número de discos rotativos, relação entre as velocidades superficiais das fases contínua e dispersa, velocidade de rotação, espaçamento entre os discos, altura do

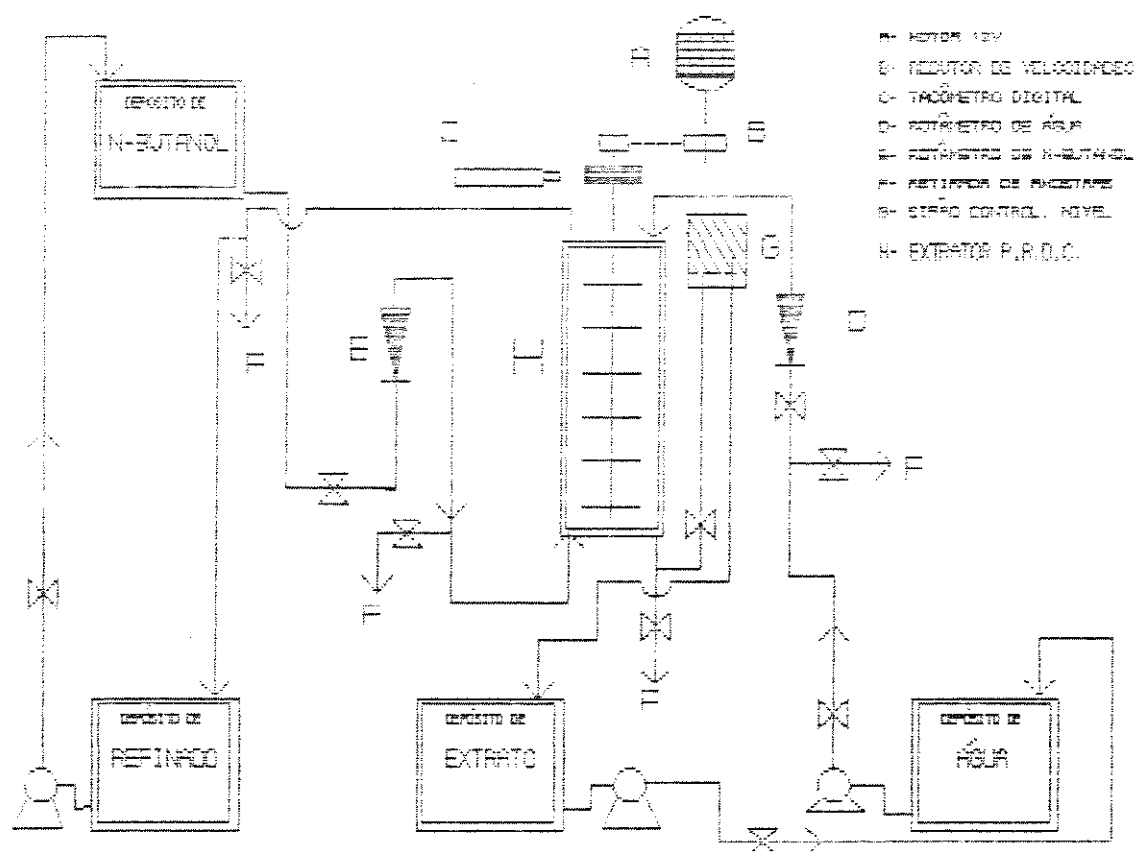


Figura (2.4) Montagem experimental

compartimento, diâmetro do extrator e tipo de sistema líquido utilizado. No presente estudo foram analisadas as quatro primeiras variáveis descritas anteriormente, mostradas na tabela (2.3), sendo as outras variáveis fixadas a um valor constante.

Nd	Al	Vel. Rotação	Rel. Vel.
5	20% p	80rpm	$V_d = V_c$
	20% c		
7	20%cp	120rpm	$V_d < V_c$
	40%	170rpm	$V_d > V_c$

Tabela (2.3) Geometrias e variáveis utilizadas.

Foram adotadas as seguintes velocidades superficiais em cada experimento: Para $V_d = V_c$

$$V_d = 0.260\text{cm/s} \quad , \quad V_c = 0.260\text{cm/s} ;$$

para $V_d < V_c$

$$V_d = 0.260\text{cm/s} \quad , \quad V_c = 0.351\text{cm/s} \text{ e } V_c = 0.319\text{cm/s}^1 ;$$

(1) A velocidade superficial da fase contínua foi reduzida, devido a dificuldades no controle da operação do extrator, ver tabelas (A - II.1) até (A - II.10) do anexo (A - II).

para $V_d > V_c$

$$V_d = 0,310\text{cm/s} \quad , \quad V_c = 0,157\text{cm/s}$$

Para a retirada das amostras e a obtenção dos resultados experimentais obedeceu-se o seguinte procedimento:

A coluna foi preenchida com água pura (fase contínua) até alcançar o compartimento superior do extrator. Após este procedimento, foi criado um selo de aproximadamente 3cm de n-butanol no compartimento superior. Regulou-se a tensão no motor Boch, através do "dimmer", até a haste de agitação atingir a velocidade de rotação desejada. Com velocidade de rotação estabilizada, abriu-se a válvula que controla a alimentação da fase contínua até obtermos uma vazão constante relativa a velocidade superficial desejada, controlando-se sempre a altura da interface de n-butanol no selo do compartimento superior com auxílio do sifão. Quando a altura da interface estabilizou-se, abriu-se a válvula do n-butanol (fase dispersa), controlando-se a vazão, até atingir a velocidade superficial desejada e simultaneamente controlou-se a altura da interface no selo do compartimento superior do extrator. Após o escoamento atingir o equilíbrio, duas a três vezes o maior tempo médio de residência das fases, foram retiradas amostras das fases dispersa, contínua e refinado com auxílio de provetas graduadas e um cronômetro digital CASIO 470S, para posterior determinação das vazões e das concentrações do ácido acético (soluto), de cada amostra. Com o

conhecimento das vazões e das concentrações do soluto, realizou-se um balanço de massa, para verificar se não ocorreu uma grande variação da massa do soluto entre as entradas e saídas. Quando o erro percentual (Δ), entre a alimentação e descarga fosse maior que $\pm 10\%$, o experimento deveria ser repetido.

O cálculo de Δ foi realizado da seguinte forma.

Balanço total:

$$Q_C + Q_D = Q_E + Q_R \quad (2.2)$$

Balanço para o soluto:

$$x_{AA}^C \cdot Q_C + x_{AA}^D \cdot Q_D = x_{AA}^E \cdot Q_E + x_{AA}^R \cdot Q_R \quad (2.3)$$

como $x_{AA}^C = 0.0$ e tomando um fator auxiliar de correção (FC), obtemos:

$$FC = \frac{x_{AA}^D \cdot Q_D}{x_{AA}^E \cdot Q_E + x_{AA}^R \cdot Q_R} \quad (2.4)$$

então Δ foi definido como:

$$\Delta = | 1 - FC | \cdot 100 \quad (2.5)$$

onde x_{AA}^i é a concentração do soluto na fase i (C,D,E e R) em moles/litro.

2.3.3- ANÁLISE DOS RESULTADOS

Primeiramente para a análise dos resultados obtidos experimentalmente foi necessário o conhecimento das condições de equilíbrio ternário líquido - líquido do sistema, água - n-butanol - ácido acético, através de teoria desenvolvida por J.M. PRAUSNITZ e outros⁽²⁰⁾(1980). Foi desenvolvido um programa computacional em linguagem FORTRAN IV, a qual, permitiu o cálculo e a montagem da curva teórica de equilíbrio do sistema adotado. Este programa utiliza as propriedades individuais de cada substância e também os parâmetros de iteração binário UNIQUAC entre um e outro, os detalhes são mostrados no Anexo (A - V).

Para a titulação das soluções foi utilizado técnica descrita em detalhes por N.BACCAN e outros⁽¹⁸⁾(1979), um resumo desta técnica é mostrado no anexo (A - III).

Obtidas as velocidades superficiais das fases contínua e dispersa no ponto de inundação, utilizamos a técnica proposta por D.H.LOGSDAIL e outros⁽⁶⁾(1957) para a análise das condições de inundação e obtenção das velocidades de características para cada configuração geométrica utilizada. Comparamos os resultados obtidos com os trabalhos de diversos pesquisadores, ver Tabela (A - I.2) e figura (3.6).

A análise da literatura realizada nos permite afirmar que as variáveis que mais influenciam nas características

de inundação são: velocidade de rotação dos discos, comprimento da coluna, viscosidade da fase contínua, densidade da fase contínua, diâmetro dos discos rotativos, área livre de escoamento, número de discos rotativos e espaçamento entre os discos.

O estudo da transferência de massa foi realizado através do cálculo da eficiência de separação (λ), da seguinte forma:

$$\lambda = \frac{C_D - C_R}{C_D - C_R^e} \quad (2.6)$$

Com o conhecimento de λ para as várias configurações geométricas estudadas, ver tabela (2.2), foi proposta uma correlação experimental, para a descrição matemática do comportamento do extrator em relação à eficiência de separação, em função das variáveis descritas anteriormente e mais as seguintes: concentrações de equilíbrio, concentração da fase dispersa, velocidade superficial da fase dispersa e velocidade superficial da fase contínua. Esta correlação é uma função f da forma mostrada a seguir:

$$f = f(C_D, C_R, C_R^e, Qr, Od, N, L, \mu_c, \rho_c, dp, Al, Nd, h, g) \quad (2.7)$$

Para a estruturação da função f foram utilizados os conhecimentos de análise dimensional e de análise linear multivariável.

CAPÍTULO 3

CONDIÇÕES DE INUNDAÇÃO EM ESCOAMENTO BIFÁSICO CONTRACORRENTE COM TRANSFERÊNCIA DE MASSA

3.1- INTRODUÇÃO:

Nos capítulos anteriores foram apresentados os estudos relativos a análise da literatura e aos materiais e métodos empregados para a realização deste trabalho. No presente capítulo serão apresentados os procedimentos experimentais utilizados para a determinação das condições de inundação no extrator P.R.D.C., caracterizada pela rejeição de uma das fases conforme descrito na seção (2.3.1). Utilizamos nestas determinações o sistema ternário água - n-butanol - ácido acético, com o soluto (ácido acético) dissolvido na fase contínua (água), portanto a direção de extração foi realizada da fase contínua para a fase dispersa. As variáveis geométricas e operacionais utilizadas neste estudo são mostradas na tabela (A-I.1) do anexo (A-I).

Nas seções (3.2.1) a (3.2.3), com a determinação das condições de inundação, descrevemos um método para a estimativa experimental da velocidade característica (V_n)

) definida como sendo a velocidade de uma única gota da fase dispersa em relação a fase contínua e que pode ser determinada conhecendo - se as velocidades superficiais das fases contínua (V_c) e dispersa (V_d). Na seção (3.2.4) estudamos a relação entre a velocidade característica e a velocidade crítica de rotação (N_{cr}) causada por mudanças bruscas na hidrodinâmica das fases, com transferência de soluto entre as fases.

Na seção (3.3) realizamos uma comparação entre os resultados experimentais obtidos neste trabalho com os resultados obtidos por correlações empíricas propostas por diversos pesquisadores. A seção (3.4) mostra uma conclusão realtiva aos estudos deste capítulo.

3.2- INUNDAÇÃO

3.2.1- INTRODUÇÃO

O desempenho de um extrator de discos rotativos é caracterizado pela taxa de remoção de um determinado soluto e dependente do sistema líquido envolvido e das condições de operação do processo. R.E. TREYBAL⁽¹⁴⁾ (1968) cita alguns fatores que normalmente influenciam o desempenho de um equipamento de extração contracorrente:

- Influência química entre as fases:

propriedades correspondentes: neste caso também podemos incluir a presença ou não de agentes tensoativos, sólidos finamente divididos e impurezas. A concentração do soluto a ser removido deve ser conhecida, pois esta exerce influência direta nas propriedades físicas do sistema formado.

- Direção de extração: D.H. LOGSDAIL e outros⁽⁶⁾ (1961) verificaram a importância de se estabelecer em que fase o soluto vai estar dissolvido, antes de se realizar a remoção deste soluto.

- Vazões totais de líquidos alimentados no extrator: o conhecimento destas vazões nos permite estimar a capacidade total de operação da coluna.

- Relações entre as vazões: um parâmetro importante que influencia o desempenho do extrator é o chamado efeito de entrada e saída, que resulta da introdução e retirada de líquidos do extrator. Esta operação pode ocasionar a perturbação do escoamento entre as fases podendo ocorrer recirculações verticais dos líquidos, no interior do extrator, no sentido oposto às suas direções naturais de escoamento, o que implica numa redução da força motriz responsável pela extração e conseqüentemente numa diminuição das taxas de transferência de massa.

- Especificação das fases dispersa e contínua: para a obtenção da área interfacial necessária para a transferência de massa deve ocorrer a dispersão de um dos

líquidos, sob a forma de pequenas gotas no outro líquido. A princípio podemos escolher tanto a fase mais ou menos densa, como sendo a fase dispersa. De uma maneira geral, existem algumas regras básicas que podem ajudar na especificação das fases dispersa e contínua.

a) Se a relação entre as vazões volumétricas das correntes é diferente da unidade, será melhor dispersar o líquido de menor vazão volumétrica.

b) A fase dispersa comumente tem a menor fração volumétrica retida na coluna. Por questões econômicas ou de segurança pode ser desejável dispersar o líquido mais caro ou mais instável.

c) A taxa de transferência de massa é fortemente influenciada pela direção da transferência de soluto, bem como das condições de inundação. De maneira geral, encontra-se elevadas taxas de transferência de soluto, quando esta ocorre da fase dispersa para a fase contínua.

- Hidrodinâmica do equipamento: o conhecimento hidrodinâmico de duas fases líquidas escoando em contracorrente através de uma coluna agitada e o estabelecimento das condições de inundação deste equipamento são importantes, principalmente, na previsão da capacidade do extrator de discos rotativos. A velocidade com que as gotas do líquido disperso percorrem em contracorrente a fase contínua, que pode ser estimada a partir da velocidade característica e da fração volumétrica retida da fase dispersa, deve ser prevista para

podermos determinar a capacidade do extrator e a eficiência esperada da extração ou para determinar o diâmetro do extrator e a altura requerida para atingirmos os objetivos de projeto, bem como o conhecimento da fração volumétrica retida da fase dispersa em função das condições operacionais e geométricas empregadas se torna importante na previsão da taxas de transferência de massa.

3.2.2 - VELOCIDADE CARACTERÍSTICA: DEFINIÇÃO

O conceito de velocidade característica é determinado analisando - se uma população de gotas líquidas de uma fase menos densa (fase dispersa) escoando em contracorrente com uma fase mais densa (fase contínua). Se a velocidade superficial da fase dispersa é V_D e a da fase contínua é V_C , a velocidade média real das duas fases ($\bar{V}_C$ e $\bar{V}_D$) relativamente à parede do extrator, serão dadas por:

$$\bar{V}_D = V_D / x \quad (3.1)$$

$$\bar{V}_C = - V_C / (1 - x) \quad (3.2)$$

onde x é a fração volumétrica retida da fase dispersa. A velocidade média das gotas (V_s) relativa a fase contínua, também chamada de velocidade de deslizamento é obtida das

equações (3.1) e (3.2), e assim:

$$V_s = \bar{V}_d - \bar{V}_c \quad (3.3)$$

Substituindo (3.1) e (3.2) em (3.3),
obtemos:

$$V_s = \frac{V_d}{x} + \frac{V_c}{(1 - x)} \quad (3.4)$$

Analisando - se o conjunto de forças que agem
numa gota suspensa e isolada como mostrado na figura (3.1),

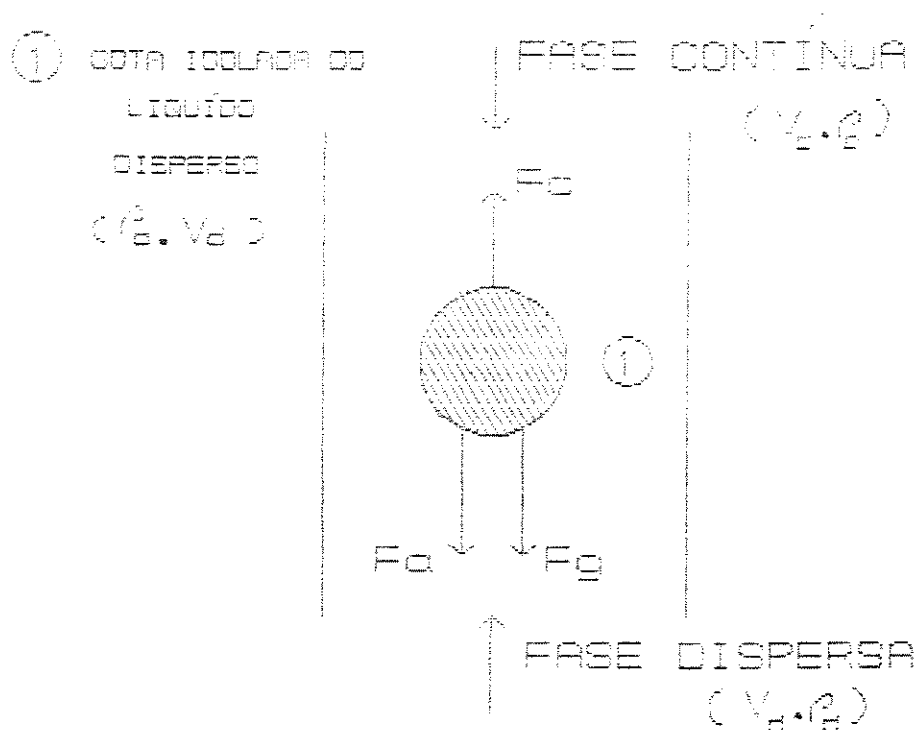


Figura (3.1) Balanço de forças em uma gota isolada do líquido
disperso escoando em contracorrente no extrator.

verifica - se que, no ponto de inundação, o somatório destas

forças é nulo, isto é:

$$F_g + F_a + F_e = 0 \quad (3.5)$$

ou,

$$\rho_d \cdot \left[\frac{\pi \cdot dg^3}{6} \right] + \rho_c \cdot Cd \cdot \left[\frac{\pi \cdot dg^2}{4} \right] \cdot \frac{V_f^2}{2} - \rho_m \cdot \left[\frac{\pi \cdot dg^3}{6} \right] \cdot g = 0 \quad (3.6)$$

onde F_g é a força devido à ação da gravidade, F_a a força de arraste, F_e a força devido ao empuxo, dg o diâmetro da gota, Cd o coeficiente de arraste, ρ_m a massa específica da mistura bifásica, ρ_d a massa específica da fase dispersa, ρ_c a massa específica da fase contínua, g a aceleração da gravidade e V_f a velocidade de arraste incipiente ou velocidade de inundação, encontrada quando a soma do conjunto de forças que agem numa gota suspensa e isolada é nula, de acordo com a equação (3.5). Em termos de velocidade de inundação a equação (3.6) fica:

$$V_f = E1 \cdot \left[\frac{\rho_m - \rho_d}{\rho_c} \right]^{1/2} \cdot F \cdot (1 - x) \quad (3.7)$$

onde

$$E1 = \left[\frac{4 \cdot dg \cdot g}{3 \cdot Cd} \right]^{1/2} \quad (3.8)$$

e $F \cdot (1 - x)$ é um fator que leva em conta a interação entre a

gota suspensa e revolada, considerados no balanço de volume, e as gotas vizinhas.

E. Y. KUNG e R. B. BECKMAN⁽³²⁾ (1961) relacionaram as velocidades superficiais de ambas as fases com a velocidade característica e fração volumétrica retida da fase dispersa, através da seguinte equação:

$$\frac{V_D}{x} + \frac{V_C}{(1 - x)} = V_n \cdot (1 - x) \quad (3.9)$$

3.2.3- DETERMINAÇÃO EXPERIMENTAL DA VELOCIDADE CARACTERÍSTICA

Para a determinação experimental da velocidade característica a partir dos resultados obtidos no extrator P.R.D.C. realizamos um conjunto de experimentos onde mantivemos constante a vazão da fase contínua e variamos a vazão da fase dispersa até a ocorrência da inundação.

A velocidade característica experimental é determinada utilizando a equação (3.9) através de técnica experimental proposta por D.H. LOGSDAIL e outros⁽⁶⁾ (1961), tendo estes autores verificado que, com valores de velocidade superficial da fase contínua (V_C) constantes e com o aumento gradativo da velocidade superficial da fase dispersa (V_D) teremos um acréscimo gradativo do valor da fração volumétrica retida da fase dispersa (x) até atingir o ponto de inundação.

onde é atingida a condição de máxima velocidade superficial da fase dispersa, assim:

$$\left(\frac{\partial V_D}{\partial x} \right) \bigg|_{(V_C = \text{cte})} = 0 \quad (3.10)$$

Analogamente se mantivermos V_D fixo, atingiremos a condição de máxima velocidade superficial da fase contínua, assim:

$$\left(\frac{\partial V_C}{\partial x} \right) \bigg|_{(V_D = \text{cte})} = 0 \quad (3.11)$$

Estas duas condições substituídas na equação (3.9) nos levam a:

$$V_{Df} = 2 \cdot V_n \cdot x_f^2 \cdot (1 - x_f) \quad (3.12)$$

e

$$V_{Cf} = V_n \cdot (1 - x_f) \cdot (1 - 2 \cdot x_f) \quad (3.13)$$

onde V_{Df} é a velocidade superficial da fase dispersa no ponto de inundação, V_{Cf} é a velocidade superficial da fase contínua no ponto de inundação e x_f é a fração volumétrica retida da fase dispersa no ponto de inundação. Eliminando V_n das equações (3.12) e (3.13) obtemos:

$$x_f = \frac{(A^2 + 8 \cdot A)^{1/2} - 3 \cdot A}{4 \cdot (1 - A)} \quad (3.14)$$

de $A = V_{df} / V_{cf}$.

Dentre os inúmeros métodos para o cálculo da velocidade característica (V_n) destaca -se o descrito por D.H. LOGSDAIL⁽⁶⁾ (1961) onde os valores de V_n foram determinados utilizando - se a equação (3.14) para o cálculo de x_f , a partir de dados experimentais de V_{cf} e V_{df} , e da construção de gráficos de V_{df} " versus " $x_f^2 \cdot (1 - x_f)$ de acordo com equação (3.12). Estes autores verificaram que estes gráficos são linhas retas que passam pela origem. Os valores experimentais de V_n foram obtidos pelos coeficientes angulares destas retas. As figuras (3.1), (3.2) e (3.3) ilustram três exemplos de cálculo da velocidade característica a partir dos resultados experimentais obtidos das velocidades superficiais das fases dispersa e contínua sob condições de inundação. Valores experimentais de V_n obtidos através da utilização do método descrito acima são ilustrados na tabela (A - I.1) do anexo (A - I).

3.2.4- VELOCIDADE CRÍTICA DE ROTAÇÃO

As velocidades características obtidas através de medidas experimentais das condições de inundação são,

conforme observado por T.MISEK⁽⁹⁾(1963), relacionadas com a velocidade de rotação dos discos. A figura (3.5) mostra a influência da velocidade de rotação na velocidade característica experimental, para as duas diferentes variações na geometria do extrator. Analisando estas figuras verificamos que os valores de

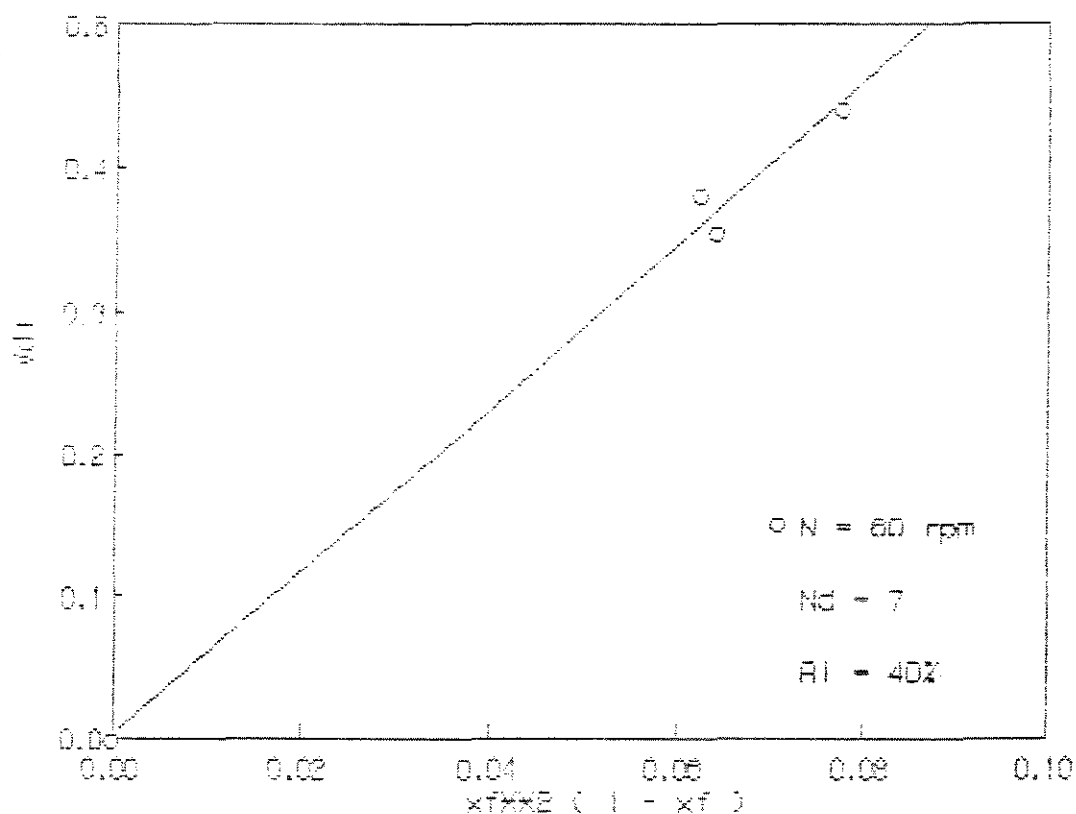


Figura (3.2) Gráfico para cálculo da velocidade característica em função das condições experimentais de inundação, $L = 40 \text{ cm}$, $d_p = 5,1 \text{ cm}$, $d_c = 5.3 \text{ cm}$.

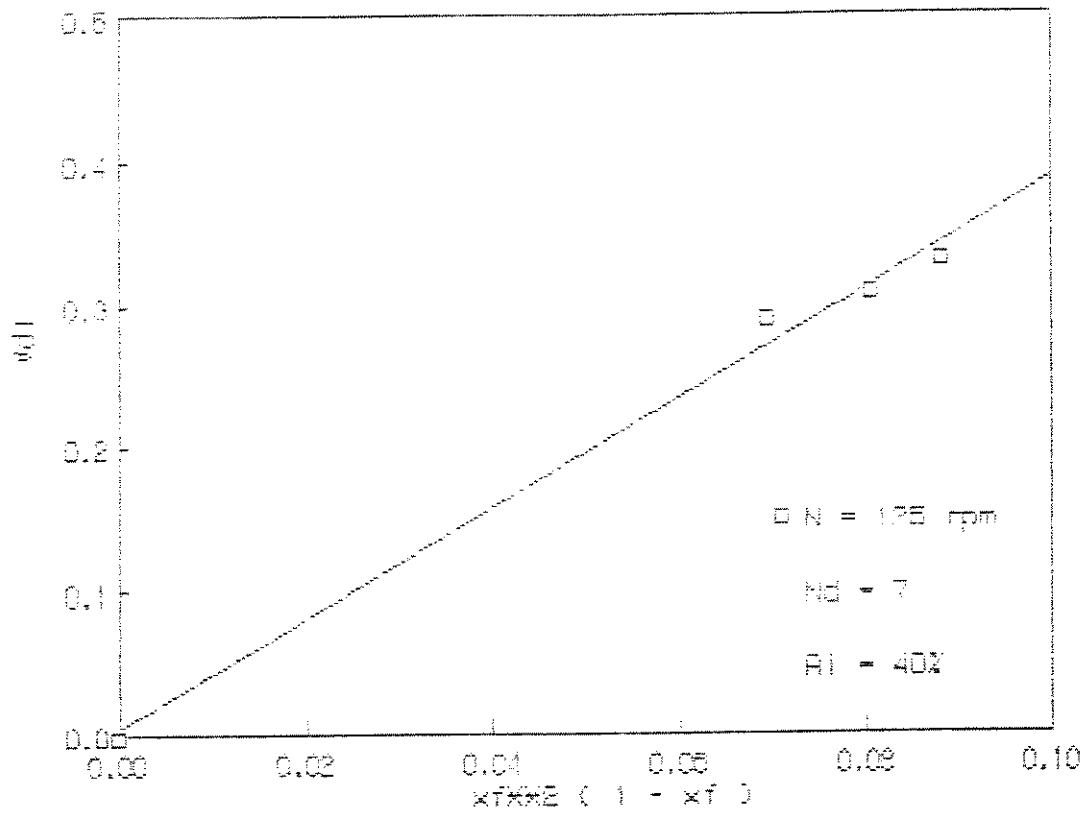


Figura (3.3) Gráfico para cálculo da velocidade característica
 em função das condições experimentais de
 inundação. $L = 40 \text{ cm}$, $d_p = 5.1 \text{ cm}$, $d_c = 3.3 \text{ cm}$.

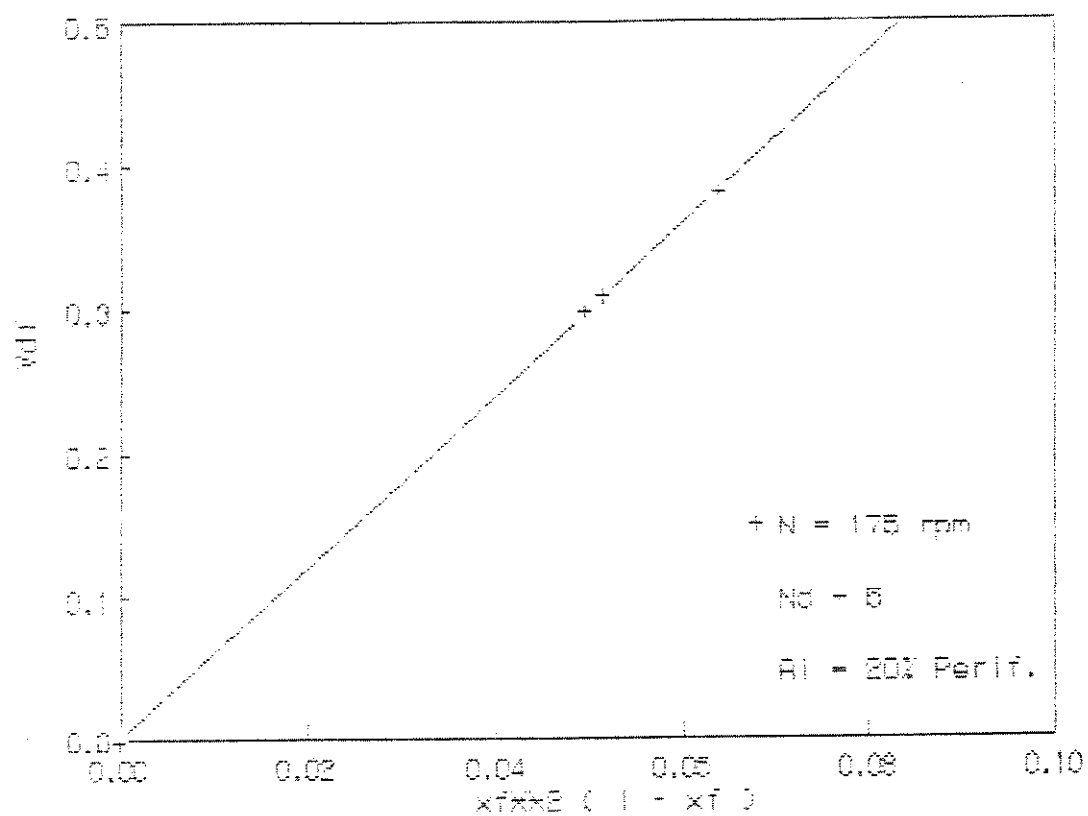


Figura (3.4) Gráfico para cálculo da velocidade característica em função das condições experimentais de inundação. $L = 40$ cm, $d_p = 5,1$ cm, $d_c = 5,3$ cm.

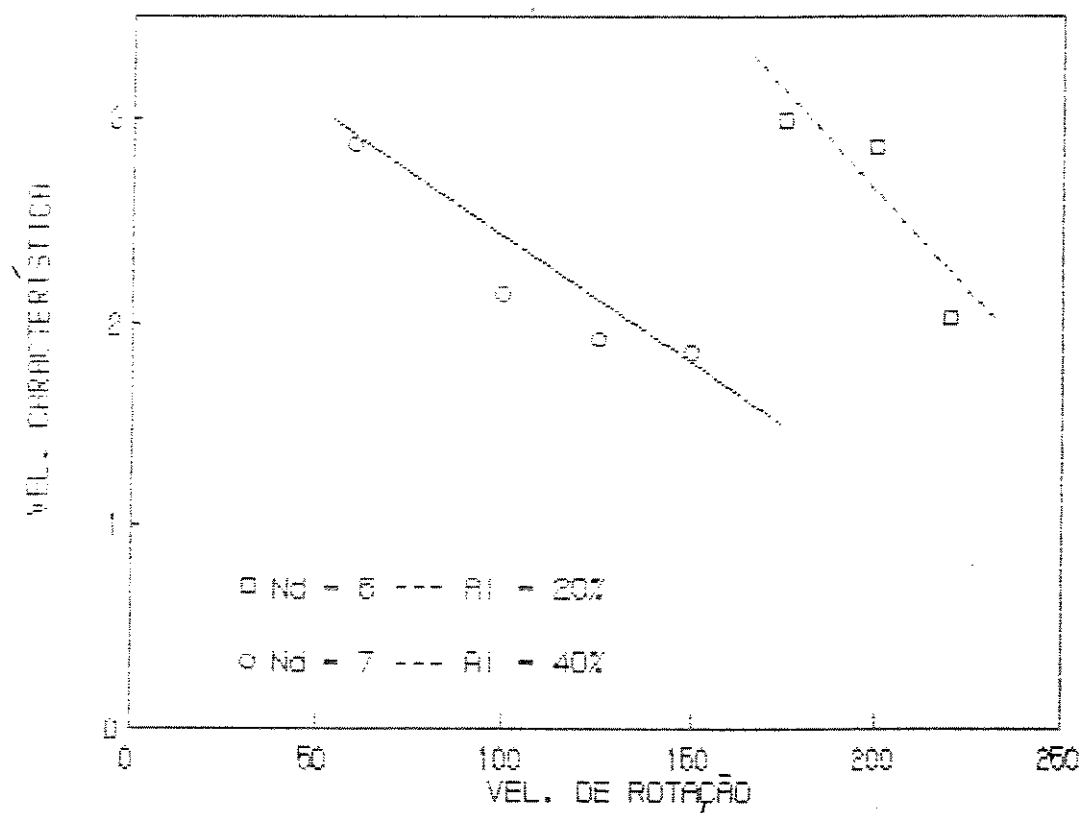


Figura (3.5) Influência da velocidade de rotação na velocidade característica para as duas geometrias estudadas.

V_n são maiores para a geometria com 5 discos rotativos, isto porque, os discos rotativos impõe menor resistência ao escoamento no interior do extrator P.R.D.C..

Quando construímos um gráfico de velocidade característica versus a velocidade de rotação dos discos é observado a formação de duas regiões distintas. A primeira onde a V_n é independente da velocidade de rotação (N) e a segunda onde a velocidade característica decresce com a velocidade de rotação. Esta mudança brusca de inclinação na curva no ponto crítico é atribuída à mudança na hidrodinâmica das fases; este ponto é denominado de ponto crítico onde ocorre a velocidade de rotação crítica (N_{cr}), termo este primeiramente definido por T.MISEK⁽⁹⁾ (1963). Este autor observou que, para velocidades menores que N_{cr} , o fluxo é essencialmente contracorrente com a massa inteira circulando em torno do eixo e a energia dissipada no rotor, neste regime, é gasta para rebater as gotas sem quebrá-las, independente de manter o conteúdo do compartimento circulando em volta do rotor. À baixas velocidades de rotação teremos camadas da fase dispersa retidas abaixo dos discos rotativos e certamente, que com o aumento gradativo dos valores da velocidade de rotação, esta camada diminui. Este autor também observou que, uma vez atingida a velocidade de rotação crítica de rotação ocorre uma queda brusca na velocidade característica causada pela distribuição das gotas ao atingirem o disco rotativo.

Analisando - se a figura (3.5) de

velocidade característica em relação a velocidade de rotação para ambas as geometrias estudadas. ver tabela (A - I.1) do Anexo (A - I). observamos que a velocidade característica decresce para ambas as geometrias. A velocidade crítica de rotação e portanto a segunda região de operação do extrator foram atingidas a uma velocidade de rotação dos discos rotativos menor que 60 rpm, para 7 discos rotativos e área livre de 40% e menor que 175 rpm para 5 discos e 20% de área livre na periferia, o que nos permite concluir que mesmo a baixas velocidades de rotação dos discos, ocorre um pequeno acúmulo de gotas da fase dispersa abaixo dos discos rotativos do extrator de discos rotativos perfurados.

G.S.LADDHA e outros⁽¹⁶⁾ (1978) após investigação do comportamento hidrodinâmico de um extrator R.D.C. indicaram que a velocidade crítica de rotação (N_{cr}) pode ser prevista, para qualquer sistema líquido e geometria do extrator, pela seguinte relação:

$$\left(\frac{g}{dp \cdot N_{CR}^2} \right) \cdot \left[\frac{\sigma^3 \cdot \rho_c}{\mu_c^4 \cdot g} \cdot \mu_c \cdot g \right]^{0,125} \cdot \left(\frac{\Delta \rho}{\rho_c} \right)^{0,6} = (Fr_{CR}^{-1} \cdot \psi_2^{0,5}) \quad (3.15)$$

No ponto crítico entre as regiões I e II, esta relação assume o seguinte valor para a direção de extração de soluto (D $\rightarrow$ C)

$$(Fr_{CR} \cdot \psi_2^{0,5}) \cong 16.0, \quad (3.16)$$

e para a direção (C ---> D)

$$(Fr_{CR} \cdot \psi_2^{0,5}) \cong 25,0 \quad (3.17)$$

Certamente que a aplicação desta correlação generalizada para o extrator P.R.D.C., obtida para a coluna R.D.C. tradicional, deve ser acompanhada de um estudo preliminar, tendo em vista as diferenças geométricas entre as colunas estudadas.

3.3- COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS OBTIDOS

Na análise da literatura realizada no capítulo 1, verificamos a quase inexistência de estudos detalhados sobre as condições de inundação, bem como da previsão de velocidades características para o extrator P.R.D.C., principalmente quando ocorre transferência de soluto entre as fases.

As correlações utilizadas para o estudo da comparação entre os resultados experimentais obtidos e os resultados obtidos por estas correlações foram a equação (1.17) proposta por E.B.TAMBOURGI⁽³⁰⁾ (1989), a equação (1.3) proposta por D.H.LOGSDAIL e outros⁽⁶⁾ (1961) e a equação (1.6) proposta por G.S.LADDHA e outros⁽¹⁶⁾ (1978).

No anexo (A - II) são mostradas as configurações utilizadas neste trabalho, no estudo da comparação entre resultados, bem como os resultados relativos a velocidade característica obtidas neste estudo e os resultados, relativos a velocidade característica, obtidos pelas correlações propostas pelos demais autores citados anteriormente.

A figura (3.6) nos mostra uma comparação gráfica dos resultados obtidos pelas correlações propostas por diversos pesquisadores para a velocidade característica (V_n) e os resultados experimentais obtidos neste trabalho . Através de análise da figura (3.6) podemos concluir que o grande afastamento entre resultados obtidos pela correlação proposta por D.H.LOGSDAIL e outros⁽⁶⁾(1961) foi devido, principalmente, as diferenças na geometria dos extratores.

Os resultados obtidos pela correlação proposta por E.B.TAMBOURGI⁽³⁰⁾(1989), também divergiram dos resultados obtidos neste trabalho, porque este autor não estudou os efeitos da transferência de soluto na previsão da velocidade característica. Os resultados obtidos pela correlação proposta por G.S.LADDHA e outros⁽¹⁶⁾(1978), foram os que mais se aproximaram dos resultados obtidos neste trabalho, isto porque, estes autores realizaram estudos para a previsão da V_n levando em conta a transferência de soluto entre as fases e a ocorrência dos retornos axiais, apesar do extrator estudado por estes autores ser do tipo R.D.C..

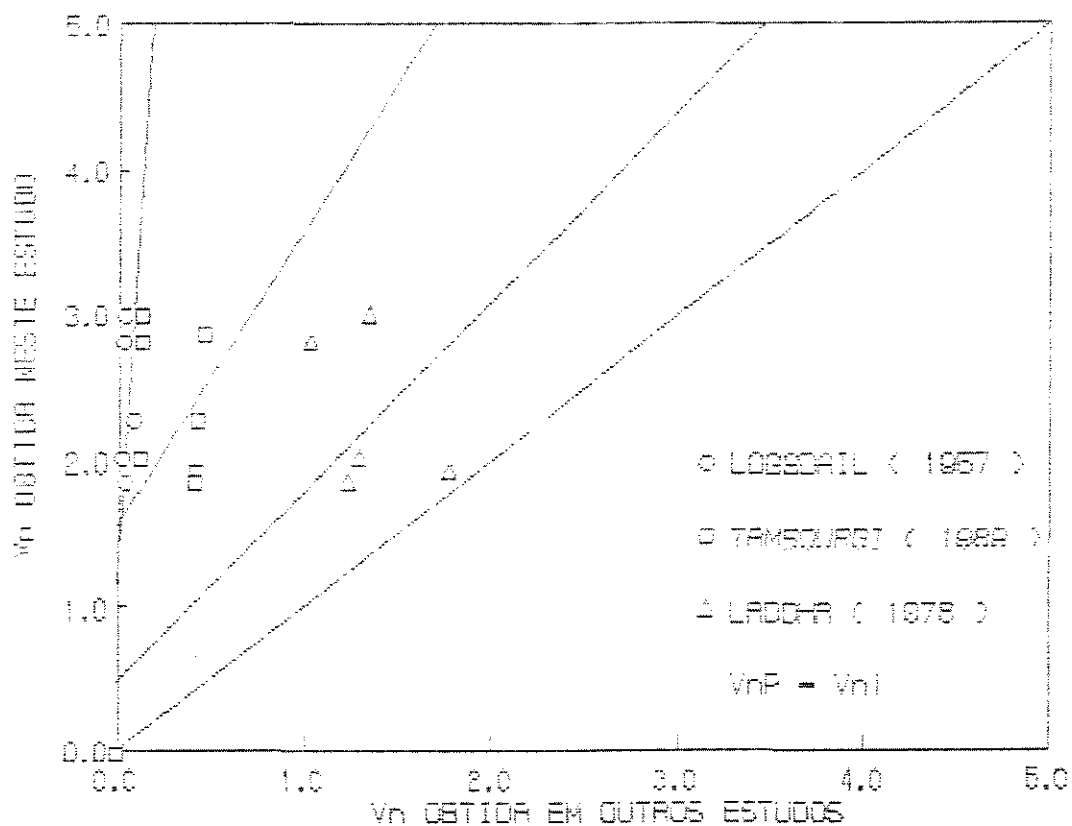


Figura (3.6) Comparação entre os resultados relativos a V_n . obtidos experimentalmente neste trabalho com os resultados obtidos pelas correlações propostas por diversos pesquisadores.

3.4- CONCLUSÃO

No presente capítulo determinamos as condições de inundação no extrator P.R.D.C. utilizando diversas condições operacionais e geométricas. Foram realizadas observações, sobre o tipo de escoamento no interior do extrator entre um disco e outro, sobre a região de operação do extrator e foi realizada uma comparação gráfica entre os resultados experimentais obtidos neste trabalho com os resultados obtidos por correlações empíricas propostas por diversos pesquisadores, utilizando uma coluna de 5,3cm de diâmetro interno, construída em acrílico.

Podemos concluir que o escoamento no interior do extrator P.R.D.C. era do tipo toroidal, como verificado por G.H.REMAN⁽³⁾ (1951) para o extrator R.D.C. tradicional.

Para as duas geometrias estudadas, verificou-se que, mesmo para baixas velocidades de rotação dos discos, o escoamento se encontrava na segunda região de operação (região II). Este fato traz vantagens operacionais para o extrator P.R.D.C. em relação ao extrator R.D.C., pois, mesmo a baixas velocidades de rotação o escoamento no interior do extrator é função da velocidade de rotação dos discos e, assim, não ocorre acúmulo da fase dispersa sob os discos rotativos.

Da comparação gráfica realizada dos resultados obtidos neste trabalho com os resultados obtidos

através das correlações empíricas propostas por diversos pesquisadores, verificou - se que, a correlação que mais se aproximou dos resultados experimentais obtidos neste trabalho foi a proposta por LADDHA e outros⁽¹⁶⁾ (1978). Fica evidente que, para a obtenção de conclusões mais aprofundadas, será necessário a realização de estudos mais detalhados das condições de inundação do extrator P.R.D.C. com transferência de soluto entre as fases , visto terem sido realizados poucos experimentos e a tensão superficial do sistema água - n-butanol - ácido acético não foi encontrada, sendo usada a tensão superficial para o sistema água - n-butanol, à temperatura ambiente. Isto pois, este estudo teve carácter de verificação e comparação, não visando a elaboração de uma correlação empírica que descreva as condições de inundação no extrator P.R.D.C..

CAPÍTULO 4

TRANSFERÊNCIA DE MASSA

No capítulo anterior foram realizados estudos sobre os fatores que influenciam a ocorrência de inundação em extrator líquido - líquido. Definimos velocidade característica e velocidade crítica de rotação. Foram mostrados os resultados referentes às condições de inundação no extrator estudado e apresentamos uma comparação entre os resultados experimentais obtidos neste trabalho com os resultados obtidos através de correlações empíricas propostas por diversos outros pesquisadores.

No presente capítulo apresentamos na seção (4.1) alguns modelos matemáticos para a descrição da transferência de massa no interior de extratores de discos rotativos. Nas seções (4.2.1) e (4.2.2) são apresentados os procedimentos experimentais utilizados para a retirada das amostras e os métodos utilizados para a análise destas amostras. A seção (4.2.3) nos mostra em detalhes os métodos para a determinação teórica, via micro computador, da curva de equilíbrio de fases do sistema ternário água - n-butanol - ácido acético. Nas seções (4.3.1) a (4.3.4) mostramos a influência

das variáveis geométricas e operacionais na eficiência de separação do extrator P.R.D.C.. Na seção (4.4) realizamos a modelagem matemática dos resultados experimentais obtidos com o objetivo de propormos uma correlação experimental que descreva a eficiência de separação do extrator. A seção (4.5) diz respeito da conclusão relativa aos resultados obtidos neste capítulo.

4.1 - MODELOS MATEMÁTICOS PARA A TRANSFERENCIA DE MASSA

Com o objetivo de encontrar um modelo matemático que descreva a transferência de massa no interior do extrator líquido - líquido de discos rotativos perfurados foram analisados os seguintes modelos matemáticos.

1- Determinação do coeficiente de transferência de massa a partir da teoria da renovação superficial proposta por P.V.DANCKWERTS⁽²⁾(1950) descrita por G.S.LADDHA e outros⁽¹⁰⁾(1978).

2- Determinação da altura da unidade de transferência de massa através do modelo diferencial de transferência de massa.

3- Determinação do coeficiente global de transferência de massa considerando que a transferência ocorra somente na gota ascendente da fase dispersa pelo modelo da gota rígida.

A descrição destes modelos é mostrada nas seções (4.1.1) a (4.1.3) e a seção (4.1.4) mostra uma análise destes modelos à luz dos experimentos e resultados obtidos neste estudo.

4.1.1 - TEORIA DA RENOVAÇÃO DA SUPERFÍCIE

O coeficiente global de transferência de massa da fase dispersa K_{OD} no extrator P.R.D.C. pode ser obtido através da determinação dos coeficientes individuais, k_D e k_G . A equação para o coeficiente individual de transferência de massa k , para ambas as fases é derivada a partir da teoria da renovação da superfície de P.V.DANCKWERTS⁽²⁾(1950), G.S.LADDHA e outros⁽¹⁶⁾(1978), podendo ser escrita como:

$$k = (D \cdot s)^{1/2} \quad (4.1)$$

onde s é a taxa de renovação da superfície e D é a difusividade molecular. A equação (4.1) também pode ser expressa da forma abaixo:

$$k = (\mu \cdot s / \rho)^{1/2} \cdot Sc^{-1/2} \quad (4.2)$$

O grupo $(\mu \cdot s / \rho)^{1/2}$ da equação (4.2) tem dimensões de velocidade, e pode ser indentificado como a

velocidade interfacial proporcional, relativa à velocidade média das gotas em relação a fase contínua v_R . Desta forma,

$$k \propto v_R \cdot Sc^{-1/2} \quad (4.3)$$

a taxa de transferência de massa Na é definida da seguinte forma,

$$Na = k \cdot (C_D - C_R) \quad (4.4)$$

e pode ser escrita, para o extrator contracorrente, na forma de diferenças logarítmicas em termos de área superficial da fase dispersa e do volume do extrator baseados no coeficiente individual de transferência de massa, por

$$Na = k_a \cdot V \cdot (\Delta C)_{ln} \quad (4.5)$$

$$Na = k \cdot Ad \cdot (\Delta C)_{ln} \quad (4.6)$$

para a obtenção de $(\Delta C)_{ln}$ foi adotado método análogo ao utilizado para a obtenção da média logarítmica da diferença de temperatura $(\Delta T)_{ln}$, no estudo de trocadores de calor, DONALD Q. KERN⁽²⁸⁾ (1987). Da equação (4.5) e (4.6)

$$K_a = Ad \cdot k / V \quad (4.7)$$

A fração volumétrica retida da fase dispersa

x é definida por,

$$x = V_d/V \quad (4.8)$$

A equação (4.7) pode ser expressa como,

$$k_a = (A_d/V_d) \cdot k \cdot x \quad (4.9)$$

o termo (A_d/V_d) pode ser considerado como sendo o diâmetro médio das gotas da fase dispersa, dp_s . Combinações das equações (4.3) e (4.9) resultam em,

$$k_a = x/dp_s \cdot v_R \cdot Sc^{-1/2} \quad (4.10)$$

v_R é relacionada a fração volumétrica retida da fase dispersa e a velocidade característica pela relação,

$$v_R = (1 - x) \cdot v_n \quad (4.11)$$

desta forma a equação (4.10) é, então, expressa por

$$k_a \propto x \cdot (1 - x) \cdot \frac{v_n}{dp_s} \cdot Sc^{-1/2} \quad (4.12)$$

Baseado na equação (4.12) podemos escrever os coeficientes individuais de transferência de massa, k_{ca} e k_{da} , como,

$$k_{Ca} \propto x \cdot (1 - x) \cdot \frac{Vn}{dp_s} \cdot Sc_c^{-1/2} \quad (4.13)$$

$$k_{Da} \propto x \cdot (1 - x) \cdot \frac{Vn}{dp_s} \cdot Sc_D^{-1/2} \quad (4.14)$$

O coeficiente global de transferência de massa k_{OD} pode ser obtido usando - se a equação da aditividade

$$\frac{1}{k_{OD} \cdot a} = \frac{1}{k_D} + \frac{m}{k_{Ca}} \quad (4.15)$$

onde m é o coeficiente de distribuição de equilíbrio C_R^e / C_E e a é a área interfacial efetiva de contato entre as fases.

Pela combinação das equações (4.13) a (4.15), a equação para o coeficiente global de transferência de massa, torna - se,

$$K_{OD} \cdot a \propto x \cdot (1 - x) \cdot \frac{Vn}{dp_s} \cdot \left[\left[Sc_D \right]^{1/2} + m \cdot \left[Sc_c \right]^{1/2} \right]^{-1} \quad (4.16)$$

A equação (4.16) pode ser usada como modelo para a representação do coeficiente global de transferência de massa, se a razão (Vn/dp_s) puder ser estimada. A eliminação da proporcionalidade depende da análise matemática para a determinação de cada termo da razão (Vn/dp_s).

4.1.2 - MODELO DIFERENCIAL

Considere a torre de extração da figura (4.1), onde as fases extrato e refinado escoam em contracorrente. A fase refinado entra na torre na taxa $D = R_1$, (moles/h·cm² de seção transversal da torre), que é a velocidade superficial molar, com a concentração de soluto distribuído C_{R1} , em termos de fração molar e deixa a torre na taxa $R = R_2$ com concentração C_{R2} . R_2 é menor que R_1 pelo efeito de extração. Similarmente, o solvente extrator que forma a fase extrato entra na torre na taxa $C = E_2$ (moles/h·cm²) e sofre uma variação de concentração de C_{E2} para C_{E1} , e sai na taxa $E = E_1$. Para uma seção transversal da torre com 1 cm², a superfície interfacial total entre as fases é A cm². Por unidade de volume de controle da torre, a superfície interfacial exposta é a cm²/cm³. Numa determinada posição da torre onde as taxas são R e E, a variação diferencial nas concentrações destas correntes ocorrerá numa altura diferencial dh. Esta variação na concentração resulta da difusão do soluto distribuído da fase R para a fase E devido aos gradientes de concentração existentes no sistema. Se N1 é o total transferido de soluto, moles/h·cm², então a taxa de transferência para a seção transversal pode ser descrita pela aplicação da equação (4.17), para a situação analisada.

$$dN1 = d(R \cdot C_R) = K_R \cdot dA \cdot C_{Rm} \cdot (C_R - C_{R1}) \quad (4.17)$$

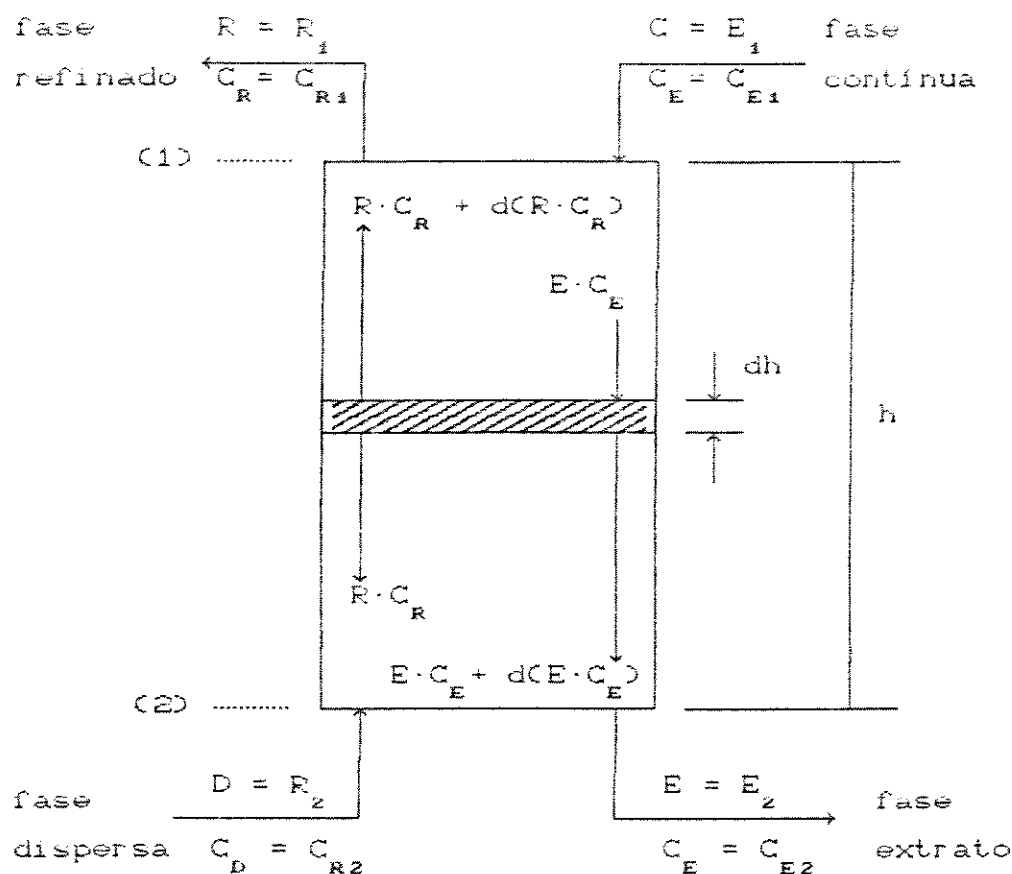


Figura (4.1) - Extração em contato contínuo $R_2 < R_1$.

onde C_{Rm} é concentração molar média entre os valores do seio da fase C_R e da interface C_{R1} . O uso desta equação limita a sua aplicação aos casos onde os solventes são completamente imiscíveis ou para soluções relativamente diluídas, pois o coeficiente de transferência de massa, K , inclui somente a difusão do soluto e não as difusões dos solventes. Para outras situações o coeficiente K deve ser corrigido para levar em conta estes efeitos.

A vazão total de refinado R varia ao longo da torre, no entanto o refinado isento de soluto, $R \cdot (1 - C_R)$, permanece constante. Consequentemente,

$$d(R \cdot C_R) = R \cdot (1 - C_R) \cdot d\left(\frac{C_R}{1 - C_R}\right) = \frac{R \cdot dC_R}{1 - C_R} \quad (4.18)$$

O coeficiente de massa K_R inclui um termo $(1 - C_R)_{lm}$ que varia ao longo da torre. A quantidade $K_R \cdot (1 - C_R)_{lm}$ é mais próxima a uma constante. Temos também que, $dA = a \cdot dh$. Deste modo a equação (4.17) pode ser modificada

$$\frac{(1 - C_R)_{lm} \cdot R \cdot dC_R}{(1 - C_R)} = K_R \cdot a \cdot (1 - C_R)_{lm} \cdot C_{Rm} \cdot (C_R - C_{Ri}) \cdot dh \quad (4.19)$$

$$\frac{(1 - C_R)_{lm} \cdot R \cdot dC_R}{(1 - C_R) - (C_R - C_{Ri})} = \frac{K_R \cdot a \cdot (1 - C_R)_{lm} \cdot C_{Rm}}{R} \cdot dh \quad (4.20)$$

Como os termos $(1 - C_R)_{lm}$ e $(1 - C_R)$ são usualmente próximos da unidade, a parte esquerda da equação (4.20) é essencialmente a variação de concentração dC_R experimentada pela unidade de diferença de concentração $(C_R - C_{Ri})$ causadora da variação e representa uma medida da dificuldade de extração. Esta, por sua vez, é designada por [N.T.U]. (NUMBER OF TRANSFER UNIT), isto é, número de unidades de transferência, que quando multiplicado por um fator determinado experimentalmente [H.T.U] (HEIGHT PER TRANSFER UNIT), isto é, altura de uma unidade de transferência,

fornece a altura da torre. Deste modo,

$$(NTU)_R = \int_{C_{R2}}^{C_{R1}} \frac{(1 - C_R)_{lm} \cdot dC_R}{(1 - C_R) - (C_R - C_{R1})} = \int_0^L \frac{dL}{(NTU)_R} = \frac{L}{(HTU)_R} \quad (4.21)$$

Comparando - se as equações (4.20) e (4.21) verifica - se que o $(HTU)_R$ e o coeficiente de transferência de massa estão relacionados por

$$(HTU)_R = \frac{R}{K_R \cdot \omega \cdot (1 - C_R)_{lm} \cdot C_{Rm}} \quad (4.22)$$

Do mesmo modo, podemos usar a diferença de concentração em termos de fase extrato que resultaria em

$$(NTU)_E = \int_{C_{E2}}^{C_{E1}} \frac{(1 - C_E)_{lm} \cdot dC_E}{(1 - C_E) - (C_E - C_{E1})} = \int_0^L \frac{dL}{(NTU)_E} = \frac{L}{(HTU)_E} \quad (4.23)$$

e

$$(HTU)_E = \frac{E}{K_E \cdot \omega \cdot (1 - C_E)_{lm} \cdot C_{Em}} \quad (4.24)$$

4.1.2.1 - UNIDADE GLOBAL DE TRANSFERÊNCIA

Na prática, a aplicação das equações anteriores, (4.17) a (4.24), fica dificultada pela impossibilidade de se obter as verdadeiras concentrações da interface. Isto levou a introdução dos coeficientes globais de transferência de massa K_{OE} e K_{OR} , que expressam a taxa de difusão em termos de gradientes globais de concentração ($C_R - C_R^e$). Quando não se possui o valor dos K individuais de cada fase, o uso dos coeficientes globais exige que o coeficiente de distribuição,

$$m = C_E / C_R^e \quad (4.25)$$

seja realmente constante sobre toda a faixa de concentração encontrada no projeto. Isto é uma séria restrição, e na prática as equações baseadas nos coeficientes globais são usadas mesmo que o coeficiente de distribuição não seja constante. Usando - se então as concentrações de equilíbrio e as concentrações das fases no lugar das composições da interface e os coeficientes globais, K_{OE} e K_{OR} , ao invés dos coeficientes individuais de cada fase, K_E e K_R , têm - se

$$(\text{NTUD})_{\text{OR}} = \int_{C_{R2}}^{C_{R1}} \frac{(1 - C_R)^{\theta_{\text{LM}}} \cdot dC_R}{(1 - C_R) - (C_R - C_R^e)} \quad (4.26)$$

$$(\text{HTUD})_{\text{OR}} = \frac{R}{K_{\text{OR}} \cdot \omega \cdot (1 - C_R)^{\theta_{\text{LM}}} \cdot C_{Rm}} \quad (4.27)$$

$$(\text{NTUD})_{\text{OE}} = \int_{C_{E2}}^{C_{E1}} \frac{(1 - C_E)^{\theta_{\text{LM}}} \cdot dC_E}{(1 - C_E) - (C_E - C_E^e)} \quad (4.28)$$

$$(\text{HTUD})_{\text{OE}} = \frac{R}{K_{\text{OE}} \cdot \omega \cdot (1 - C_E)^{\theta_{\text{LM}}} \cdot C_{Em}} \quad (4.29)$$

sendo

$$(1 - C_E)^{\theta_{\text{LM}}} = \frac{(1 - C_E^e) - (1 - C_E)}{\text{Ln} \frac{(1 - C_E^e)}{(1 - C_E)}}$$

o

$$(1 - C_R)^{\theta_{\text{LM}}} = \frac{(1 - C_R^e) - (1 - C_R)}{\text{Ln} \frac{(1 - C_R^e)}{(1 - C_R)}}$$

Estas equações são usadas normalmente em projetos. a equação (4.26) é usada nos casos onde a principal resistência à difusão

se encontra na fase R (m grande), e a equação (4.28), nos casos onde a principal resistência a difusão se encontra na fase E (m pequeno).

4.1.3 - MODELO DA GOTA RÍGIDA

Os coeficientes de transferência de massa, que foram definidos nos itens anteriores, também podem ser estimados, através da análise do comportamento de gotas isoladas em um meio contínuo.

A modelagem teórica e a coletânea de dados experimentais, tem abrangido a transferência de massa em gotas únicas durante três fases distintas da sua existência:

- Formação e liberação,
- Ascensão ou queda livre da gota e
- Coalescência na interfase

A figura (4.2) nos mostra um modelo do fluxo da fase contínua ao redor de uma gota isolada ascendente da fase dispersa.

4.1.3.1 - FORMAÇÃO E COALESCÊNCIA NA INTERFACE

Vários modelos tem sido propostos para

descrever a transferência de massa durante a formação da gota, e vem se acumulando uma grande quantidade de estudos a este respeito.

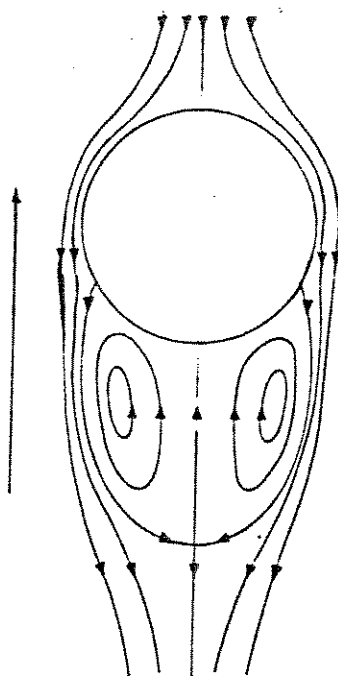


Figura (4.2) - Escoamento ao redor da gota ascendente.

Uma parte da transferência de massa ocorrerá na formação da gota, mas isto será uma pequena parte do total e não é suficientemente grande para preocupar, pois não se pode ainda prever as taxas de transferência dentro de uma precisão de, aproximadamente, 10%.

Não foram propostos modelos de transferência de massa durante a coalescência tendo, no entanto, sido propostos trabalhos teóricos e experimentais sobre os mecanismos de coalescência gota - gota e gota - interface.

4.1.3.2 - ASCENSÃO OU QUEDA LIVRE DE GOTAS FORMADAS

A transferência de massa neste caso depende do:

- 1 - Tamanho da gota,
- 2 - Tempo de residência ou velocidade da gota,
- 3 - Comportamento da gota.

As gotas são geralmente classificadas nas seguintes categorias:

- 1 - Rígida,
- 2 - Circulante laminar,
- 3 - Circulante turbulenta e
- 4 - Oscilante.

Foram propostos modelos de transferência de massa para cada uma destas classificações de gotas, e as equações resultantes dos modelos tem sido resolvidas por vários graus de precisão na obtenção de previsões das taxas de transferência para (ou de) gotas únicas. Adicionalmente ao modelo de comportamento interno da gota, algumas considerações referentes a resistência externa, ou da fase contínua, à transferência de massa devem ser feitas.

A previsão final das taxas de transferência de massa é realizada a partir de gotas únicas, deste modo, envolvendo combinações das resistências das fases contínua e dispersa. O procedimento para a obtenção destas previsões para o

modelo da gota rígida é descrito a seguir.

Gotas líquidas muito pequenas ($Re_D < 1$) se comportam como esferas sólidas com transferência de massa dentro da gota ocorrendo principalmente por difusão molecular. Diferentes soluções da equação da difusão tem sido propostas, diferindo nas condições de contorno assumidas. A solução proposta por NEWMAN⁽¹⁾(1931) é resumida a seguir.

A equação básica para a difusão em coordenadas polares, é

$$\frac{\partial y}{\partial t} = D_{AD} \left[\frac{\partial^2 y}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial y}{\partial r} \right] \text{ ou } \frac{\partial U}{\partial \theta} = \frac{\partial^2 U}{\partial \psi^2} \quad (4.30)$$

onde t é o tempo, r a coordenada radial, y a fração mássica do componente que difunde, D_{AD} o coeficiente de difusão molecular da fase dispersa,

$$U = \frac{2 \cdot r}{dg} \cdot \left(\frac{y - y_o}{y_o - y_i} \right) ;$$

$$\psi = \frac{2 \cdot r}{dg} \text{ e}$$

$$\theta = \frac{4 \cdot D_{AD} \cdot t}{2 dg}$$

NEWMAN⁽¹⁾(1931) solucionou a equação básica da difusão em coordenadas polares utilizando as seguintes

condições de contorno.

- i - Concentração da fase contínua é constante, C ;
- Coeficiente de transferência de massa da fase contínua é infinito;
- Consequentemente para $t > 0$

$$r = dg/2 \quad ; \quad y = y_o = y^e(C) \quad \text{ou} \quad U = 0$$

ii - Para $t > 0$; $r = 0$; $U = 0$ com a condição inicial $t = \theta = 0$; $y = y_1$ e $U = -\psi$.

A solução para a variação da concentração dentro da gota será fornecida por:

$$\frac{y(r) - y_1}{y_o - y_1} = 1 + \frac{dg}{\pi \cdot r} \cdot \sum_n \frac{(C - 1)^n}{n} \cdot \text{EXP} \left[\frac{-4 \cdot n^2 \cdot \pi^2 \cdot D_{AD} \cdot t}{dg^2} \right] \cdot \text{sen} \left[\frac{2 \cdot n \cdot \pi \cdot r}{dg} \right] \quad (4.31)$$

e a concentração no seio da gota por:

$$e_b = \frac{y_b - y_1}{y_o - y_1} = - \frac{6}{n^2} \cdot \sum_n \frac{1}{n^2} \cdot \text{EXP} \left[\frac{-4 \cdot n^2 \cdot \pi^2 \cdot D_{AD} \cdot t}{d^2} \right] \quad (4.32)$$

Uma aproximação desta série é a seguinte

$$\varepsilon_b = \frac{y_b - y_1}{y_o - y_1} = 1 - \text{EXP} \left[\frac{-4 \cdot \pi^2 \cdot \mathcal{D}_{AD} \cdot t}{dg^2} \right]^{1/2} \quad (4.33)$$

o coeficiente de transferência de massa K_D é definido, então, por

$$K_D = - \frac{dg}{6 \cdot t} \cdot \ln \frac{6}{n^2} \cdot \sum_n \frac{1}{n^2} \cdot \text{EXP} \left[\frac{-4 \cdot n^2 \cdot \pi^2 \cdot \mathcal{D}_{AD} \cdot t}{dg^2} \right] \quad (4.34)$$

e para valores elevados e t, tem - se

$$K_D = \frac{2 \cdot \pi^2 \cdot \mathcal{D}_{AD}}{3 \cdot dg} \quad \text{ou} \quad K_D = 6,58 \cdot \frac{\mathcal{D}_{AD}}{dg} \quad (4.35)$$

4.1.4 - ANÁLISE DOS MODELOS MATEMÁTICOS

Nos itens anteriores, (4.1.1) a (4.1.3), discutimos três diferentes modelos matemáticos para a análise da transferência de massa em extratores verticais contracorrentes. No entanto para a interpretação matemática dos resultados experimentais obtidos neste trabalho optou - se pelo uso de uma correlação experimental que descreva a eficiência de separação (λ) do extrator estudado, definida da seguinte forma:

$$\lambda = \frac{C_D - C_R}{C_D - C_R^e} \quad (4.35)$$

Esta modelagem foi realizada utilizando-se conhecimentos da análise dimensional e de análise linear multivariável. A adoção deste procedimento é justificada por:

1) Para a adoção dos modelos da renovação superficial e o modelo da gota rígida seria necessário a realização de estudos para a determinação do diâmetro médio das gotas ascendentes da fase dispersa. A realização deste estudo será proposta para um trabalho a ser realizado futuramente.

2) O modelo matemático de transferência de massa que utiliza a teoria diferencial considera o escoamento como sendo contínuo, dentre outras simplificações, não levando em conta os efeitos de mistura axial, retorno axial da fase dispersa e retorno de fluxo da fase contínua, o quais, ocorreram no interior do extrator utilizado neste trabalho. Portanto o modelo diferencial de transferência de massa, também, não pode ser utilizado.

4.2 - RETIRADA E ANÁLISE DOS RESULTADOS

Neste item iremos descrever a metodologia utilizada para a retirada de amostras do extrator P.R.D.C. e os métodos utilizados para a obtenção dos resultados experimentais e para a análise destes resultados.

4.2.1 - RETIRADA DAS AMOSTRAS

O equipamento utilizado foi montado, como mostrado na figura (2.4). Após testarmos todos os equipamentos elétricos e mecânicos, adotamos os seguintes procedimentos:

4.2.1.1. - INUNDAÇÃO

Para a obtenção das velocidades superficiais de inundação, V_{c_i} e V_{d_i} , para as diversas configurações geométricas e operacionais utilizadas neste estudo, seguimos o procedimento descrito a seguir.

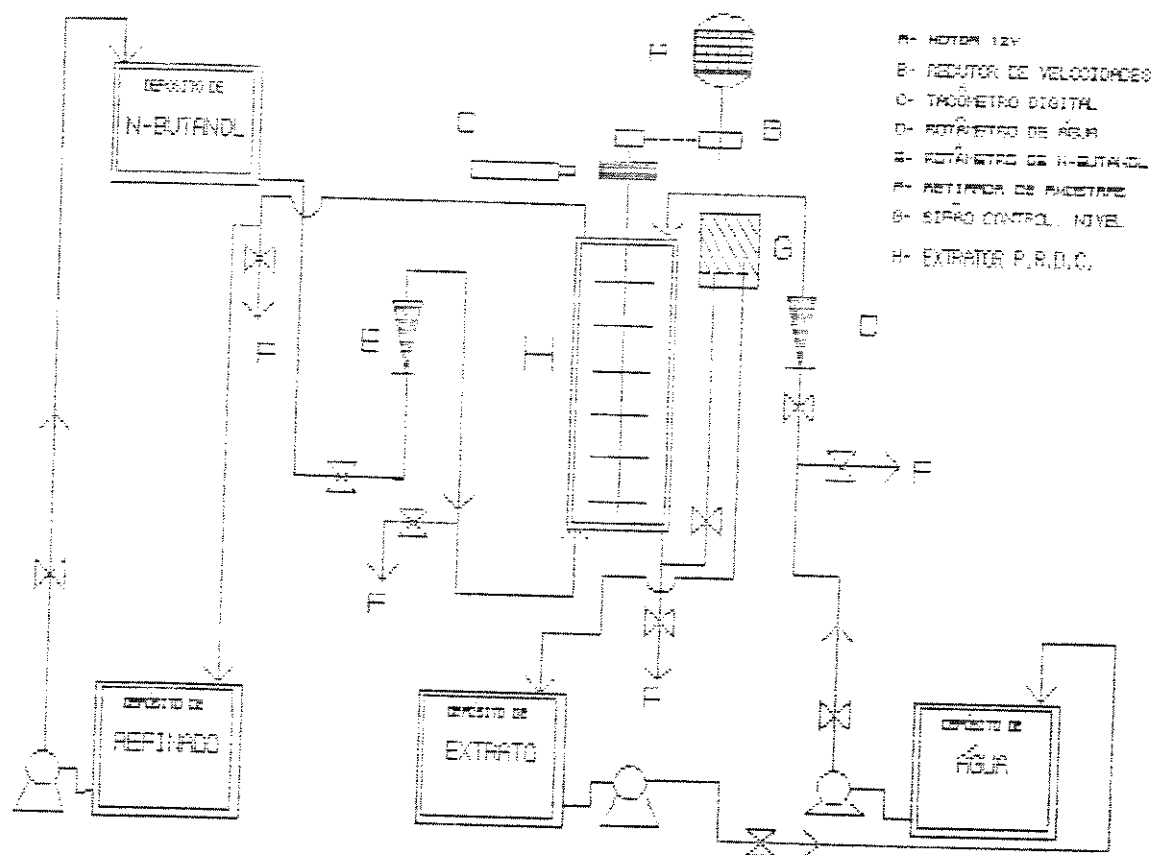


Figura (2.4) - Montagem experimental.

1) Completamos o extrator com água com concentração de ácido acético conhecida, aproximadamente $0,2690\text{mol/l}$. Portanto no estudo das condições de inundação do extrator a direção de transferência de massa foi da fase contínua para a fase dispersa.

2) abrimos a válvula da linha de n-butanol puro até a formação de um selo de n-butanol de aproximadamente 5 cm de altura no topo da coluna.

3) Ligamos o motor , o tacômetro digital e controlamos a velocidade de rotação, através do "dimmer" controlador de corrente elétrica, até a velocidade de rotação desejada seja alcançada.

4) Quando a velocidade de rotação se estabilizou, $\pm 5\%$ da velocidade de rotação desejada, abrimos a válvula da linha da fase contínua até atingirmos a vazão equivalente a V_{c_f} , controlando esta vazão através do rotâmetro da fase contínua e controlando, também, a velocidade de rotação.

5) Após a vazão da fase contínua e a velocidade de rotação dos discos se estabilizarem, abrimos novamente a válvula da fase dispersa, controlando continuamente a altura da interface formada no topo do extrator, altura do selo, variando a posição do sifão ligado à saída da fase contínua.

6) A vazão da fase dispersa deve ser aumentada lentamente até o ponto onde ocorre a inundação. Este ponto é caracterizado pela rejeição da fase dispersa com a formação de uma interface na base do extrator.

7) Quando ficou caracterizada a inundação, anotamos as velocidades superficiais de inundação das fase contínua e dispersa, V_{c_i} e V_{d_i} respectivamente, e a velocidade de rotação dos discos rotativos.

4.2.1.2 - TRANSFERÊNCIA DE MASSA

Para a obtenção das amostras necessárias para o estudo da transferência de massa no interior do extrator P.R.D.C., para as diversas configurações geométricas e operacionais descritas no capítulo 2, adotamos o seguinte procedimento:

1) Completamos a coluna com água pura, fase contínua, após o extrator estar completamente preenchido,

2) Abrimos a válvula da linha de n-butanol, fase dispersa, com concentração de aproximadamente $0,2300\text{mol/l}$ de ácido acético. Portanto no estudo da transferência de massa a direção da transferência foi da fase dispersa para a fase contínua. Mantemos a válvula aberta até a formação de um selo de 5 cm de altura no topo do extrator.

3) Ligamos o motor. o tacômetro digital e controlamos a velocidade de rotação através do "dimmer" controlador de corrente elétrica. até que a velocidade de rotação

desejada seja alcançada.

4) Quando a velocidade de rotação se estabilizar em torno $\pm 5\%$ da velocidade desejada, abrimos a válvula da linha da fase contínua e controlamos a vazão com auxílio do rotâmetro de água, até que a vazão equivalente a velocidade superficial desejada seja atingida.

5) Após a velocidade de rotação e a vazão da fase contínua estabilizarem, abrimos a válvula da linha da fase dispersa até que a vazão seja equivalente a velocidade superficial da fase dispersa desejada. Ao mesmo tempo devemos controlar a altura da interface, formada no topo da coluna, variando a altura do sifão ligado à saída da fase contínua, agora denominada extrato.

6) Após decorridos aproximadamente 10 minutos o sistema de escoamento já estará em equilíbrio, e então, devemos retirar as amostras do extrato e da saída da fase dispersa, agora denominada de refinado.

O dispositivo de retirada de amostras de ambas as fase é mostrado na figura (4.3).

4.2.2 - ANÁLISE DOS RESULTADOS

Este item nos mostra o tratamento químico - analítico e matemático necessário para a interpretação e análise

dos resultados obtidos neste trabalho experimental, em relação às condições de inundação e transferência de massa do extrator P.R.D.C..

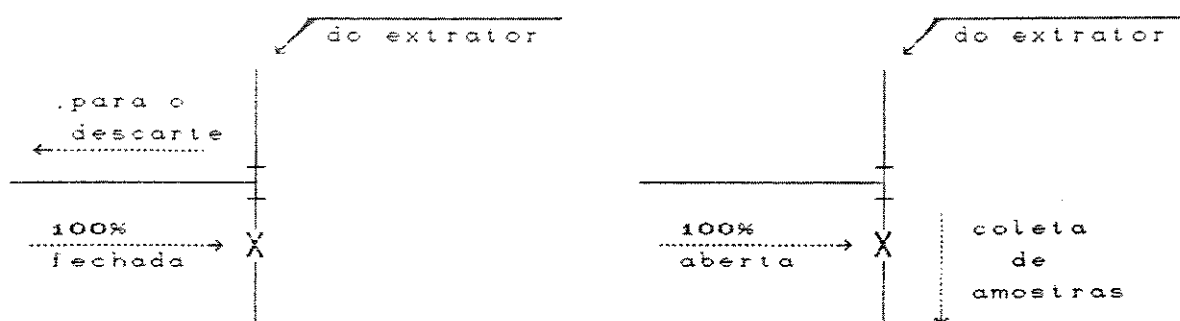


Figura (4.3) - Dispositivo para a retirada de amostras.

4.2.2.1 - INUNDAÇÃO

Para a obtenção da velocidade característica do extrator P.R.D.C., para cada configuração geométrica e operacional utilizada, com V_{c_f} , V_{d_f} e a velocidade de rotação dos discos, N , conhecidos, adotamos o procedimento descrito no capítulo 3, itens (3.2.3) e (3.2.4).

O procedimento descrito no item (3.2.4) permite, também, a verificação da região de operação do extrator, ao plotarmos a velocidade característica obtida contra a velocidade de rotação para cada geometria estudada.

4.2.2.2 - TRANSFERÊNCIA DE MASSA

Para a obtenção dos resultados experimentais através das amostras retiradas do extrator P.R.D.C. e para a análise destes resultados, foi necessário a adoção do procedimento descrito a seguir.

Através de titulação simples, técnica descrita em detalhes no anexo (A - III), obtemos as concentrações do ácido acético em moles/litro de solução das fases

- contínua	}	alimentação
- dispersa		
- extrato	}	saída
- refinado		

O objetivo da obtenção das concentrações das entradas e saídas é a determinação da número adimensional denominado de eficiência de separação, representado por (λ) e definido por,

$$\lambda = \frac{C_D - C_R}{C_D - C_R^e} \quad (4.35)$$

onde C_R^e é a concentração da fase refinado no equilíbrio.

Esta concentração deve ser determinada experimentalmente e/ou através da teoria termodinâmica do equilíbrio de fases. Neste trabalho obteve-se pelo estudo teórico do equilíbrio de fases devido à confiabilidade dos resultados teóricos obtidos via computador e a disponibilidade das propriedades químicas, físicas e termodinâmicas dos componentes envolvidos.

Um estudo detalhado do equilíbrio de fases e a montagem do programa computacional necessário para a obtenção dos C_R^e é mostrado no item (4.2.3).

Para a verificação da influência das variáveis geométricas e operacionais na eficiência de separação do extrator P.R.D.C. foram construídos diversos gráficos da velocidade de rotação corrigida ($\phi = N \cdot V_R / V_D$), contra a eficiência de separação (λ), utilizando como parâmetros as diversas configurações geométricas utilizadas.

4.2.3- DETERMINAÇÃO DAS COMPOSIÇÕES NO EQUILÍBRIO DE FASES.

O presente item apresenta o procedimento adotado para o cálculo das composições de equilíbrio líquido - líquido para sistemas ternários, podendo também ser estendido para os sistemas multicomponentes mais comuns encontrados nos

processos químicos industriais. O procedimento a seguir descrito baseia-se nos estudos de J.M. PRAUZNITS e outros⁽²⁰⁾ (1980).

4.2.3.1- EQUAÇÕES SIMULTÂNEAS:

No equilíbrio líquido - líquido, a composição total e a temperatura são conhecidas, a pressão normalmente não é importante, ou não afeta sensivelmente o cálculo. Este problema é similar ao cálculo do " flash " de uma solução líquido-líquido, e requer uma solução simultânea das equações de balanço material e das relações de equilíbrio de fase.

O balanço de massa no equilíbrio líquido - líquido será dado por:

- balanço total.

$$F = E + R \quad (4.36)$$

- balanço para cada componente i.

$$F \cdot x_i^E = E \cdot x_i^E + R \cdot x_i^R \quad (4.37)$$

onde F é quantidade total alimentada, E é fase extrato, R é fase refinada e x_i^j é fração molar do componente i na fase j.

As outras equações a serem satisfeitas provêm

das relações de equilíbrio e são:

$$f_i^E = f_i^R \quad (4.38)$$

onde o poscrito E refere-se ao extrato e R ao refinado, f_i^j é a fugacidade do componente i na fase j, sendo uma função de T, P, $x_1^j, x_2^j, \dots, x_n^j$.

No balanço de massa devem ser impostas também as seguintes relações entre as frações molares de cada fase.

$$\sum_i^n x_i^R = 1 \quad (4.39)$$

$$\sum_i^n x_i^E = 1 \quad (4.40)$$

Isto nos leva a um sistema de equações à pressão e temperatura especificadas com $2 \cdot m + 2$ variáveis (x_i^E, x_i^R, E, R) e $2 \cdot m + 2$ equações, (4.38) a (4.40).

A fugacidade de cada fase é definida por:

$$f_i^E = \gamma_i^E \cdot x_i^E \cdot f_i^{OLE} \quad i = 1, 2, \dots \quad (4.41)$$

$$f_i^R = \gamma_i^R \cdot x_i^R \cdot f_i^{OLR} \quad i = 1, 2, \dots \quad (4.42)$$

onde f_i^{OLj} é a fugacidade padrão do componente i na fase j no estado líquido e γ_i^j é o coeficiente de atividade do componente i na fase j.

Como no equilíbrio ocorre a igualdade das fugacidades padrões, teremos:

$$f_i^{OLE} = f_i^{OLR} \quad (4.43)$$

substituindo (4.41) e (4.42) em (4.43) obtemos a seguinte relação:

$$\gamma_i^R \cdot x_i^R = x_i^E \cdot \gamma_i^E \quad (4.44)$$

Para os cálculos de separação líquido-líquido, o equilíbrio das fases é mais convenientemente representado em termos de taxas de equilíbrio K_i , definidas por:

$$K_i = \frac{x_i^E}{x_i^R} \quad (4.45)$$

Desta forma teremos que:

$$K_i = \frac{\gamma_i^R}{\gamma_i^E} \quad (4.46)$$

Várias manipulações das equações anteriores tem sido utilizadas na obtenção de solução. C.J.KING⁽³³⁾ (1971) sugeriu a seguinte aproximação:

$$W_i = \frac{E}{F} \cdot K_i \cdot x_i^R + \left[1 - \frac{E}{F} \right] \cdot x_i^R \quad (4.47)$$

e explicitando em x_i^R obtemos a seguinte relação:

$$x_i^R = \frac{W_i}{(K_i - 1) \cdot \alpha + 1} \quad (4.48)$$

onde:

$$\alpha = E / F$$

Da equação (4.45) temos que:

$$x_i^E = x_i^R \cdot K_i \quad (4.49)$$

e substituindo - se x_i^R e na equação (4.49) obtemos:

$$x_i^E = \frac{K_i \cdot W_i}{(K_i - 1) \cdot \alpha + 1} \quad (4.50)$$

Utilizando a relação proposta primeiramente por H.H.RACHFOR Jr. e J.D.RICE⁽³⁴⁾ (1952), mostrada abaixo, temos:

$$\sum_1^n x_i^E - \sum_1^n x_i^R = 0 \quad (4.51)$$

e substituindo as equações (4.47) a (4.50) na relação (4.51) obtemos:

$$\sum_1^n \left[\frac{(K_i - 1) \cdot W_i}{(K_i - 1) \cdot \alpha + 1} \right] = 0 \quad (4.52)$$

Para um dado coeficiente de equilíbrio K_i , esta expressão é facilmente solucionada para α por uma técnica iterativa, como por exemplo, podemos utilizar o processo de aceleração de cálculo iterativo de Newton - Rapson.

A relação K_i no equilíbrio é uma função fortemente influenciada por ambas composições das fases extrato e refinado e o valor de α deve se situar entre os valores 0,0 e 1,0.

Para o processo iterativo de cálculo do valor de α , foi utilizada a seguinte função objetivo :

$$GC(x^R, x^E, \alpha) = \sum \left[\frac{(K_i - 1) \cdot W_i}{K_i - 1 \cdot \alpha + 1} \right] = 0 \quad (4.53)$$

A solução para α será alcançada quando:

$$GC(x^R, x^E, \alpha) \leq \text{Err} \quad (4.54)$$

onde o erro Err, normalmente, é menor que $1 \cdot 10^{-5}$.

4.2.3.2- PROCEDIMENTO ITERATIVO DE CALCULO

O sistema será resolvido pelo método iterativo de Newton - Rapson de passo limitado com convergência característica de segunda ordem, descrito a seguir.

$$\underline{x}_i^{(r+1)} = \underline{x}_i^{(r)} - t \cdot \underline{J}^{-1} \cdot G(\underline{x}_i^{(r)}) \quad (4.55)$$

$$\underline{J} = \left| \frac{\partial G_i}{\partial x_j} \right|_{i \neq j} \quad (4.56)$$

O escalar t está na faixa de 0,0 e 1,0 e prevê o passo limitante, ou o pulo requerido para obter uma iteração convergente. Na maioria das aplicações, normalmente $t=1$, valores abaixo de 1,0 diminuem a norma ou magnitude de $\underline{J}^{-1} \cdot \underline{G}_i$ ou seja, diminui a magnitude do termo de correção para $\underline{x}^{(r+1)}$, no limite quando $t = 0,0$; teremos que:

$$\underline{x}^{(r+1)} = \underline{x}^{(r)} \quad (4.57)$$

No programa computacional EQUIL3, escrito em linguagem FORTRAN 77, mostrado no anêxo (A - V), foi utilizado $t = 1$.

O cálculo das composições das fases R e E ($\underline{x}^R$ e $\underline{x}^E$) também são determinadas iterativamente , a função objetivo para este caso será dada por:

$$H(x^R, x^E) = \sum_1^n \left| \gamma_i^E \cdot x_i^E - \gamma_i^R \cdot x_i^R \right| \quad (4.58)$$

A solução para as concentrações do extrato e refinado no equilíbrio serão conhecidas quando:

$$H(x_i^R, x_i^E) \leq SS \quad (4.59)$$

onde o erro SS, normalmente, é $1 \cdot 10^{-3}$

Quando o número de iterações for maior que 3 (três), deve ser utilizado um método de aceleração linear para acelerar a convergência das composições das fases extrato e refinado. (Método de J.H. WEGSTEIN⁽³⁵⁾ (1955)).

Este processo iterativo de cálculo das composições das fases no equilíbrio converge, normalmente, para um numero de iterações entre 5 e 10, a não ser nas proximidades do "plait point" onde o número de iterações tende a tornar-se maior que 50 e desta forma perde-se a precisão do cálculo.

Quando a alimentação estiver fora da região de formação de duas fases o valor de α (E / F) será maior ou igual a 1,0.

O valor da taxa de equilíbrio K_i é dado pela relação (4.46). O cálculo de γ_i^R e γ_i^E de acordo com J. M. PRAUZNITS e outros⁽²⁰⁾ (1980) é realizado através das seguintes equações:

$$\begin{aligned} \ln \gamma_i^* = \ln \frac{\Phi_i}{x_i^*} + \left(\frac{Z}{2} \right) \cdot q_i \cdot \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} + 1_i - \frac{\Phi_i}{x_i^*} \cdot \sum_j^n \left(x_j \cdot 1_j \right) - \\ + q_i^* \cdot \ln \left[\sum_j^n \left(\theta_j^* \cdot \tau_{ij} \right) \right] + q_i^* - q_i^* \cdot \sum_j^n \left[\frac{\theta_j^* \cdot \tau_{ij}}{\sum_k^n \left(\theta_k^* \cdot \tau_{kj} \right)} \right] \quad (4.60) \end{aligned}$$

onde:

$$1_j = \frac{Z}{2} \cdot \left(r_j - q_j \right) - \left(r_j - 1 \right) ;$$

$$\Phi_i = \frac{r_i \cdot x_i^*}{\sum_j^n \left(r_j \cdot x_j^* \right)} ;$$

$$\theta_i = \frac{q_i \cdot x_i^*}{\sum_j^n \left(q_j \cdot x_j^* \right)} ;$$

$$\theta_i^* = \frac{q_i^* \cdot x_i^*}{\sum_j^n \left(q_j^* \cdot x_j^* \right)} ;$$

; x_i^* fração molar do componente i na fase *; Z fator de

compressibilidade e r_j , q_j , q_j^* são constantes relativas a estrutura molecular do componente j puro, dependentes do tamanho molecular e da área da superfície externa da molécula.

O índice * indica as fases Extrato e Refinado, (E) ou (R). O valor τ_{ij} também é dado por J.M. FRAUSNITS e outros⁽²⁰⁾ (1980), na forma mostrada a seguir:

$$\tau_{ij} = \exp \left[\frac{- \Delta u_{ij}}{Rg \cdot T} \right] = \exp \left[\frac{- a_{12}}{T} \right] \quad (4.61)$$

onde Rg é a constante do gases ideais, a_{12} parâmetro UNIQUAC de interação binário e Δ_{12} variação de energia característica da mistura binária.

Os valores de k_i , γ_i^R , γ_i^E , e τ_{ij} são calculados em programa computacional denominado EQUIL3 e nas seguintes sub - rotinas : LILIK, GAMMA e TAUS respectivamente, todos elaborados em linguagem FORTRAN 77 e apresentados no Anexo (A - V). O fluxograma simplificado deste programa é apresentado na figura (4.4).

A sub - rotina PARIN é um programa criado para a entrada dos parâmetros do sistema líquido-líquido a ser estudado.

4.2.3.3- DESCRIÇÃO DO MÉTODO DE WEGSTEIN

O método de J.H.WEGSTEIN⁽³⁵⁾ (1955) é uma ferramenta utilizada para a aceleração linear da convergência de uma variável qualquer em um problema com resolução iterativa. O método consiste das etapas mostradas a seguir:

1- Cálculo dos desvios em cada iteração. O método sómente se aplica quando ocorrer convergência da variável iterativa, isto é:

$$\text{Desvio}^{(k+1)} < \text{Desvio}^{(k)} \quad (4.62)$$

$$(DD) = (\text{Desvio}^{(k)} - \text{Desvio}^{(k+1)}) \quad (4.63)$$

No caso de divergência $(DD < 0)$ o método não se aplica e deve ocorrer um salto para fora da sequência de cálculo.

2- Cálculo da variação percentual dos desvios a cada iteração,

$$\Delta\% = (\text{Desvio}^{(k)} - \text{Desvio}^{(k+1)}) / \text{Desvio}^{(k+1)} \quad (4.64)$$

e tomado do inverso da variação percentual

$$\omega = 1 / \Delta\% \quad (4.65)$$

ω é denominado de fator de correção. Agora fazendo

$$k = 1 + \omega \quad (4.66)$$

onde k é denominado de fator de aceleração.

3- O método de aceleração linear de J. H. WEGSTEIN⁽³⁵⁾ (1955) é dado então por:

$$x^{(k+1)} = k \cdot x^{(k+1)} - \omega \cdot x^{(k)} \quad (4.67)$$

onde x^i é variável iterativa na iteração i.

Um exemplo dos resultados obtidos pelo programa EQUIL3 é mostrado, também, no anexo (A - V), arquivo OUTPUT.DAT. Neste anexo ainda contém as listagens do programa computacional EQUIL3 elaborado em linguagem FORTRAN 77 e a listagem do arquivo de entrada INPUT.DAT.

4.3 ESTUDO DA INFLUÊNCIA DAS VARIÁVEIS
GEOMÉTRICAS E OPERACIONAIS NA EFICIÊNCIA
DE SEPARAÇÃO DO EXTRATOR P. R. D. C.

Na determinação da eficiência de separação (λ) da coluna de discos rotativos perfurados empregamos diferentes condições geométricas e operacionais no decorrer dos testes experimentais realizados.

No que tange as condições operacionais da coluna variamos a vazão da fase dispersa de 5.734 cm³/s até 6.483 cm³/s e variamos a vazão da fase contínua de 3.469 cm³/s até 7.744 cm³/s, com o intuito de obtermos três relações entre as vazões da fase dispersa e contínua,

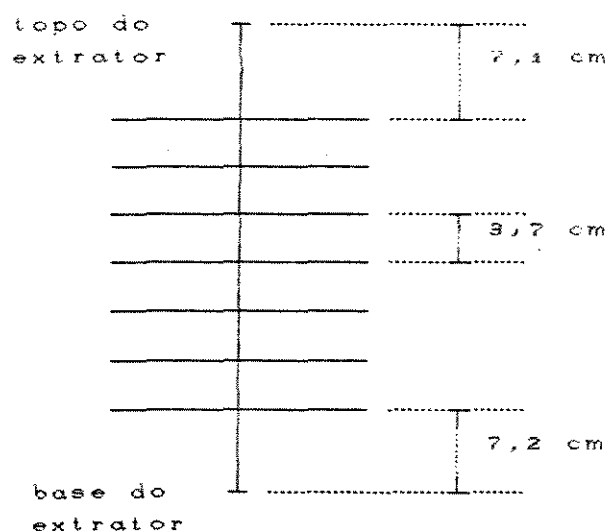
- 1) $Q_D < Q_C$;
- 2) $Q_D \cong Q_C$ e (4.68)
- 3) $Q_D > Q_C$.

A velocidade de rotação dos discos rotativos variou na faixa de 80 rpm a 170 rpm.

No que tange as variáveis geométricas, utilizamos um extrator formado por uma coluna de 40 cm de altura, sendo instalado coaxialmente no seu interior 5 ou 7 discos rotativos espaçados igualmente entre si de 5.6cm e 3.7cm.

respectivamente. Na figura (4.5) são mostrados em detalhes estas configurações empregadas. No extrator, a área livre de escoamento dos discos rotativos teve os valores de 20% e 40%, sendo as perfurações, nos discos com 20% de área livre de escoamento, localizadas no centro ou na periferia dos discos, conforme mostrado no Capítulo 2. Para a obtenção da área livre de escoamento trabalhamos com os seguintes tipos de perfurações, para a configuração com 20% de área livre de escoamento central, utilizamos discos com 6 furos localizados na parte central do disco, para a configuração com 20% de área livre de escoamento

7 discos



5 discos

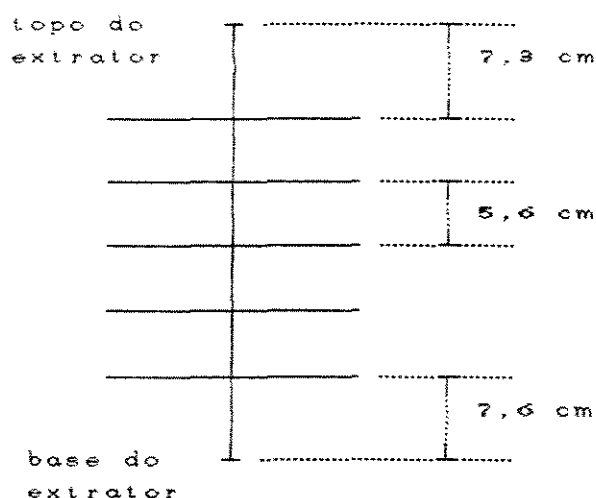


Figura (4.5) - Montagem dos discos rotativos na haste central do extrator P.R.D.C..

periferia utilizamos discos com 6 furos localizados na parte periférica do disco, para a configuração com 20% de área livre de

escoamento centro, periferia, utilizamos discos alternados de 6 furos na parte central com discos de 6 furos na parte periférica para a configuração com 40% de área livre de escoamento utilizamos discos com 12 furos, sendo 6 furos localizados na parte central dos discos e 6 furos localizados na parte na parte periférica dos discos.

4.3.1 - ESTUDO DA INFLUÊNCIA DA VELOCIDADE DE ROTAÇÃO DOS DISCOS

Com a finalidade de estudarmos a influência da velocidade de rotação sobre a eficiência de separação do soluto no extrator P.R.D.C., utilizamos geometrias com 5 e 7 discos rotativos, figura (4.5). Variamos a relação entre as velocidades superficiais das fases contínua e dispersa, conforme mostrado nas figuras (4.7) e (4.8), e variamos a área livre de escoamento, conforme mostrados nas figuras (4.9) e (4.10).

O estudo da influência da velocidade de rotação na eficiência de separação foi realizado através de interpretações dos resultados experimentais obtidos, e para tanto, foram construídos diversos gráficos de velocidade de rotação em função da eficiência de separação, tendo como parâmetros as diversas configurações geométricas e operacionais empregadas.

E.B. TAMBOURGI⁽³⁰⁾ (1989), afirma que a dispersão no interior da coluna, ou em cada estágio do extrator, é uma função da velocidade de rotação, da relação entre as velocidades superficiais de cada fase, do número de discos rotativos ou do número de estágios, do posicionamento e quantidade dos furos no disco rotativo.

Nos estudos experimentais realizados no extrator P.R.D.C. obteve-se altas eficiências de separação, mesmo a baixas velocidades de rotação, e um aumento da eficiência de separação (λ) com o aumento da velocidade de rotação. As figuras (4.6) a (4.10) mostram estas observações. Este comportamento pode ser explicado, pois, com o aumento da velocidade de rotação ocorre uma diminuição do tamanho das gotas ascendentes da fase dispersa e em consequência ocorre um aumento da taxa de dispersão no interior do extrator. E.B. TAMBOURGI⁽³⁰⁾ (1989). O aumento da dispersão provoca, por sua vez, o aumento da transferência de massa entre as fases no interior do extrator.

Para velocidades superficiais acima de 200rpm foi observado, experimentalmente, a ocorrência de retorno axial da fase dispersa, back mixing, e retorno axial da fase contínua, back flow, na base e no topo da coluna respectivamente. Este fato se deve a resistência imposta ao escoamento pelos discos rotativos, que aumenta com o aumento da velocidade de rotação.

Nas figuras (4.7) e (4.8) notamos uma redução na taxa de aumento da eficiência de separação com a velocidade de rotação corrigida, para $V_c/V_D > 1,0$.

$$\left(\frac{\partial \lambda}{\partial \phi} \right) \bigg|_{\substack{V_C/V_D > 1.0 \\ Nd = 5 \text{ e } 7}} < \left(\frac{\partial \lambda}{\partial \phi} \right) \bigg|_{\substack{V_C/V_D \cong 1.0 \\ V_C/V_D < 1.0 \\ Nd = 5 \text{ e } 7}} \quad (4.69)$$

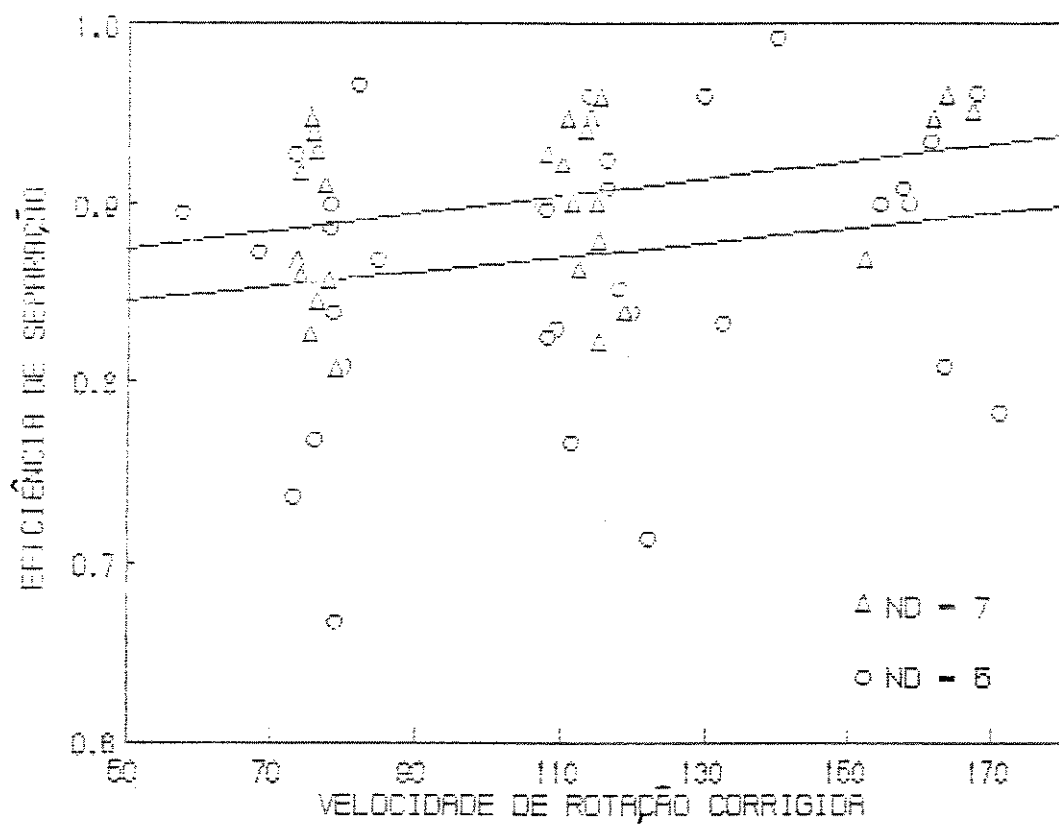


Figura (4.6) - Influência do número de discos rotativos.

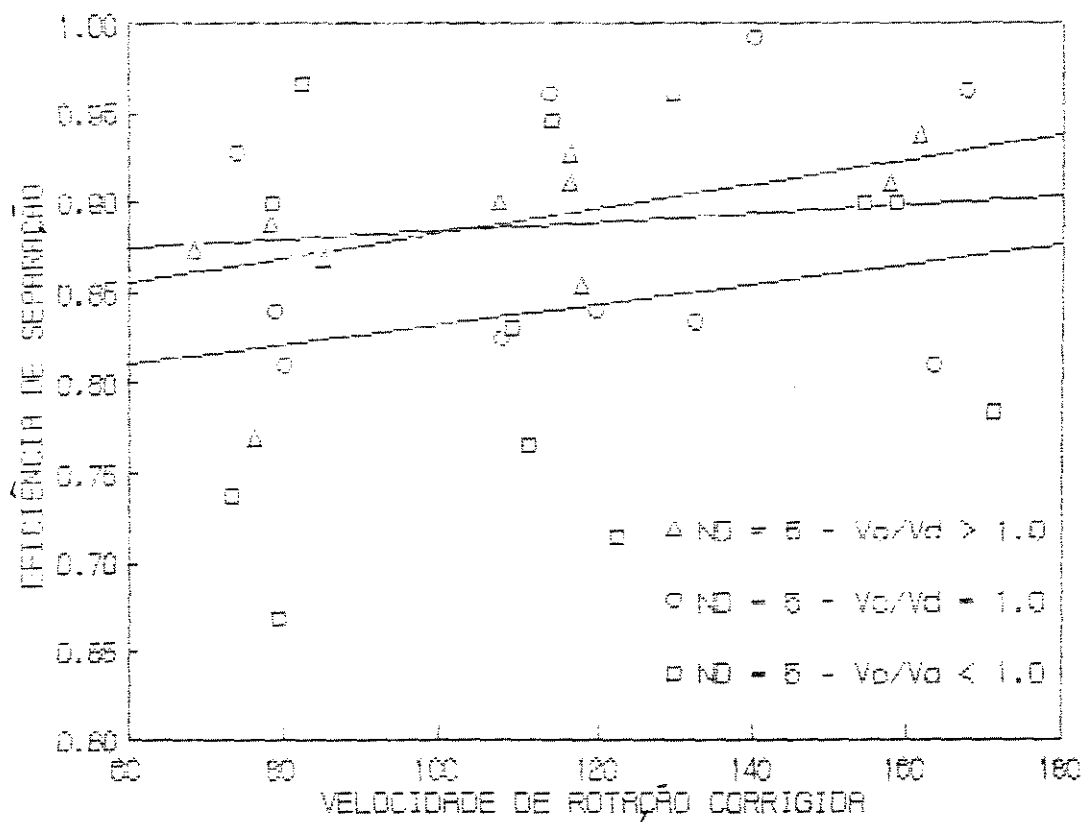


Figura (4.7) - Influência da relação V_c/V_d ($N_d = 5$).

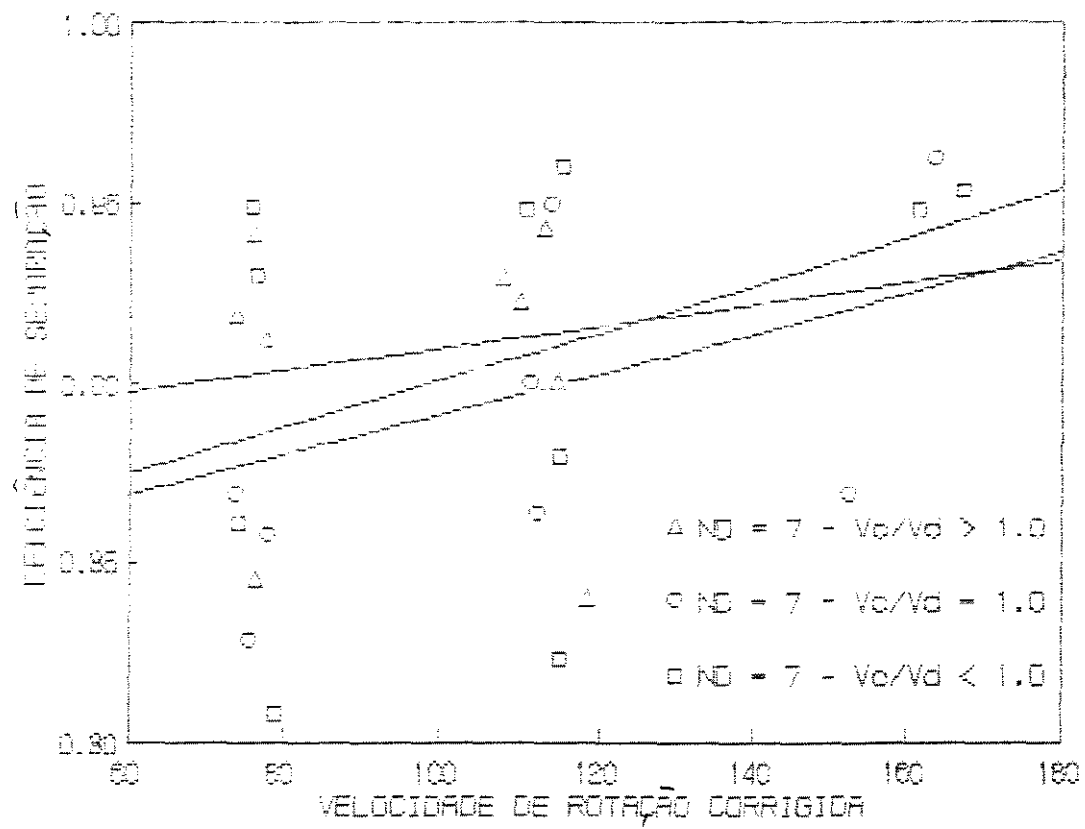


Figura (C 4.8) - Influência da relação V_c/V_d ($N_d = 7$).

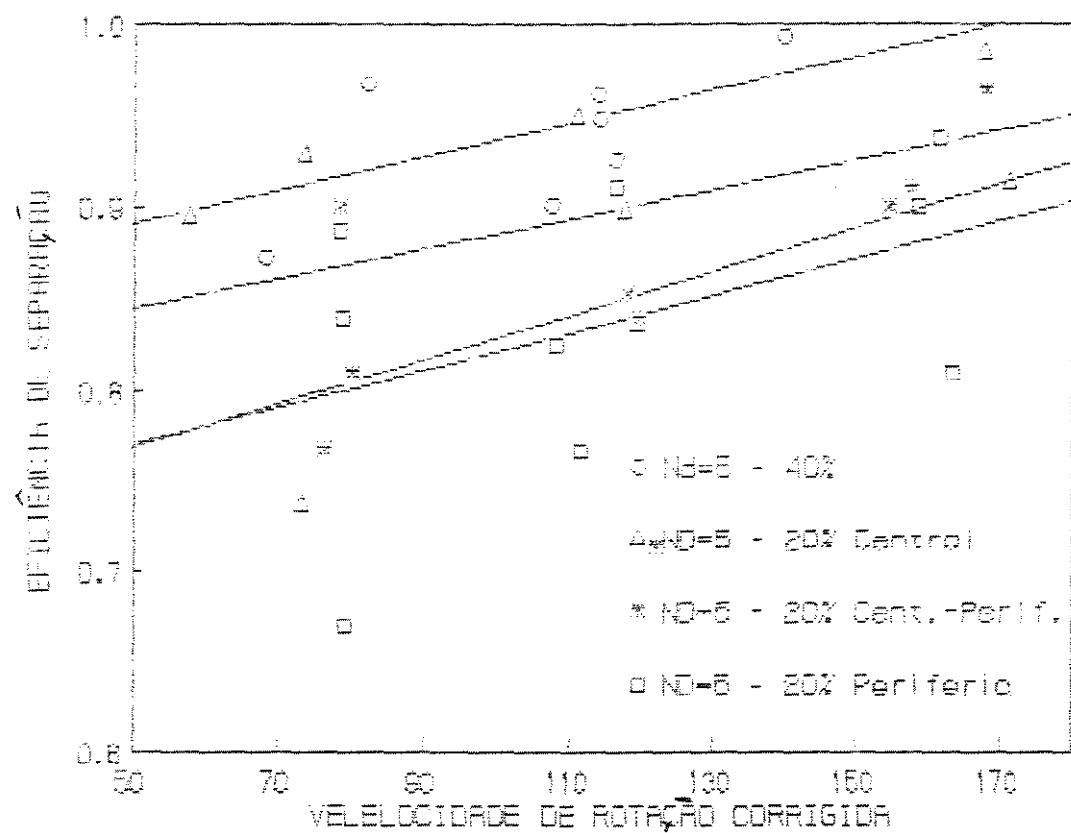


Figura (4.9)-Influência da área livre de escoamento (Nd = 5).

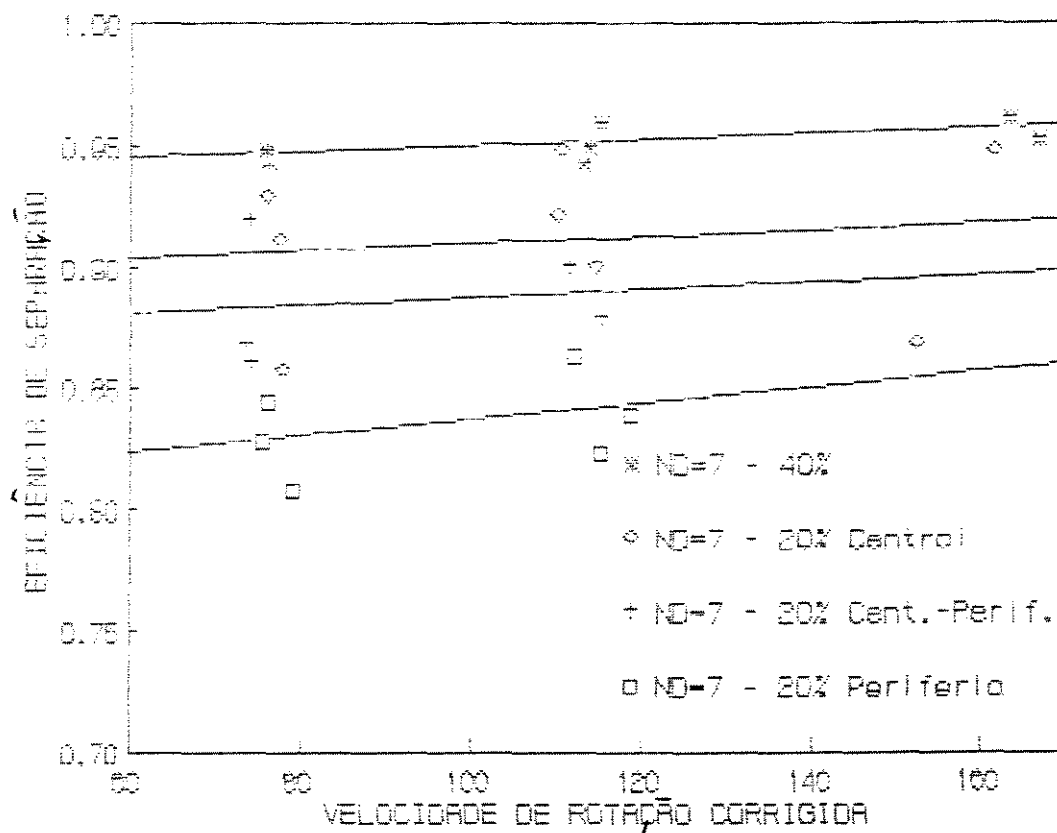


Figura (4.10) -Influência da área livre de escoamento (Nd = 7).

Este fato comprova a ocorrência de retorno axial da fase contínua, back flow, no extrator P.R.D.C. e este retorno oferece influência negativa na eficiência de separação no extrator. Para a relação entre as velocidades superficiais (V_c/V_d) > 1.0 para 5 e 7 discos rotativos, esta influência se torna óbvia, através das observações das figuras (4.7) e (4.8) onde nota - se a diminuição da taxa de aumento da eficiência de separação com o aumento da velocidade de rotação corrigida, ϕ .

4.3.2 - ESTUDO DA INFLUÊNCIA DO NÚMERO DE DISCOS ROTATIVOS

Para a realização dos estudos da influência do número de discos rotativos, utilizamos 5 e 7 discos rotativos dispostos coaxialmente com o corpo do extrator, conforme mostrado na figura (4.5).

Os resultados experimentais obtidos destes estudos encontram - se ilustrados gráficamente na figura (4.6). Análísando esta figura notamos que, para um maior número de discos rotativos obtemos valores mais elevados para a eficiência de separação, o que é o resultado de uma melhor agitação provocada pelos discos, isto é, ocorre um aumento da taxa de dispersão das gotas da fase dispersa no interior do extrator. Devido a esta dispersão, provocada pelos discos rotativos,

obtemos um melhor contato entre as fases que percorrem o extrator em contracorrente e portanto uma maior eficiência de separação. Isto foi verificado para todas as configurações geométricas e operacionais testadas.

E.B.TAMBOURGI⁽³⁰⁾ (1989), observou que os discos rotativos fornecem energia ao escoamento no interior do extrator, este fato explica o aumento da taxa de dispersão e consequente melhora na eficiência de separação com o aumento do número de discos rotativos.

4.3.3 - ESTUDO DA INFLUÊNCIA DA ÁREA LIVRE DE ESCOAMENTO

Com a finalidade de analisarmos a influência da área livre de escoamento sobre a eficiência de separação, utilizamos o extrator com 5 e 7 discos rotativos, dispostos como descrito anteriormente. Foram adotadas quatro configurações geométricas para a variação da área livre de escoamento, 40%, 20% central, 20% centro - periferia e 20% periferia.

O estudo da influência da área livre de escoamento foi realizado através da observação dos resultados mostrados graficamente nas figuras (4.9) e (4.10), respectivamente para 5 e 7 discos rotativos.

E.B.TAMBOURGI⁽³⁰⁾ (1989), observou em seus

estudos, que a percentagem de área livre de escoamento e a posição das perfurações no disco, influenciam na dispersão das gotas da fase dispersa. Esta dispersão exerce influência direta na eficiência de separação, pois a dispersão representa o grau de contato entre as duas fases escoando em contracorrente.

Os resultados experimentais apresentados na figura (4.9) mostram que a eficiência de separação é maior para a configuração com discos de 40% de área livre de escoamento, decrescendo, este valor, para as configurações com discos de 20% de área livre de escoamento, na seguinte ordem: 20% central, 20% centro - periferia e 20% periferia.

Através da análise da figura (4.9), para a configuração com 5 discos rotativos e 20% de área livre de escoamento, podemos observar que o posicionamento das perfurações, para a configuração de discos com 6 furos localizados na parte periférica e para a configuração de discos com 6 furos na parte central alternados com discos com 6 furos na parte periférica, não exerceu influência na eficiência de separação. No entanto para a configuração com 7 discos rotativos e 20% de área livre de escoamento, o posicionamento das perfurações exerceu influência na eficiência de separação, conforme mostrado na figura (4.10).

E. B. TAMBOURGI⁽⁹⁰⁾ (1989) fez estudos referentes a dispersão no interior do extrator P.R.D.C. utilizando sistema formado por uma única fase (água pura) ascendente e pulsos de um corante traçador. Este autor verificou

que o escoamento do fluxo ascendente ocorria, principalmente a baixas velocidades de rotação, pela zona central do disco perfurado, ver figura (4.11). Este fato explica a influência da área livre de escoamento sobre a eficiência de separação para as configurações com 5 discos rotativos com 20% centro - periferia e 20% periferia de

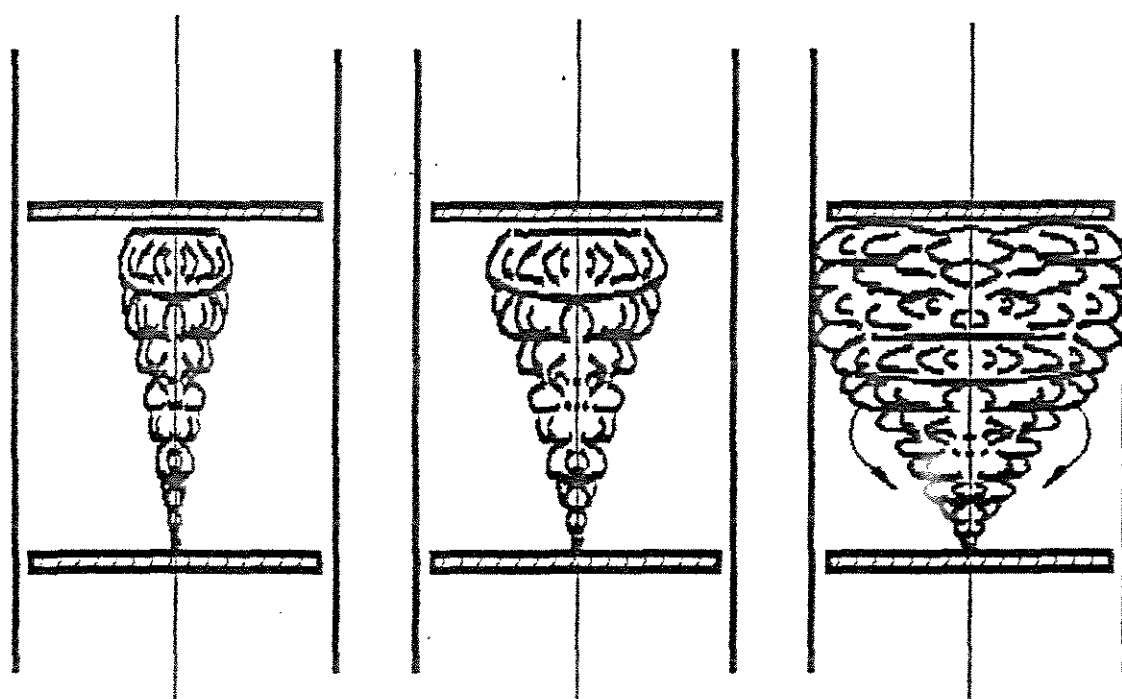


Figura (4.11) - Comportamento do corante num compartimento do extrator em função do aumento da velocidade de rotação dos discos, E.B. TAMBOURGI⁽³⁰⁾ (1989)

área livre de escoamento. A influência sobre a eficiência de separação entre uma configuração e outra foi praticamente nula, provavelmente, devido ao pequeno número de discos rotativos.

Através da análise da figura (4.10) observamos que para a configuração de 7 discos rotativos a eficiência de separação de separação foi maior para a configuração de 40% de área livre de escoamento e diminuiu para as outras configurações na seguinte sequência, 20% de área livre de escoamento com 6 furos localizados na parte central dos discos, 20% de área livre de escoamento com 6 furos localizados na parte central dos discos alternados com discos com 6 furos localizados na parte periférica dos e 20% de área livre de escoamento com 6 furos localizados na parte periférica dos discos.

4.3.4 - ESTUDO DA INFLUÊNCIA DA RELAÇÃO ENTRE AS VELOCIDADES SUPERFICIAIS DA FASE CONTÍNUA E DISPERSA

Com o intuito de analisarmos a influência da relação entre as velocidades superficiais das fases, V_c/V_d , na eficiência de separação, utilizamos três relações distintas de velocidades superficiais; $(V_c/V_d) > 1$, $(V_c/V_d) \cong 1$ e $(V_c/V_d) < 1$; para todas as configurações propostas neste estudo. As

figuras (4.7) e (4.8) mostram graficamente os resultados experimentais obtidos, respectivamente para 5 e 7 discos rotativos.

A direção de extração de soluto foi da fase dispersa pra a fase contínua e, portanto, verifica - se que a eficiência de separação é diretamente proporcional a vazão da fase contínua e inversamente proporcional a vazão da fase dispersa. Desta forma seria esperado que a eficiência de separação aumenta - se com a vazão da fase contínua para todos os experimentos. Da análise das figuras (4.7) e (4.8), podemos observar que, para a relação $V_c/V_d > 1$, ocorreu uma diminuição da taxa de aumento da eficiência de separação com o aumento da velocidade de rotação, até certo limite onde a eficiência de separação tornou - se menor que a eficiência de separação para as outras relações. Este fato é explicado pelo aumento da resistência imposta pelos discos rotativos ao escoamento. Com o aumento da velocidade de rotação a resistência ao escoamento manifesta - se na forma de retorno axial da fase contínua, back flow, este retorno axial, diminui o contato entre as fase contínua e dispersa tendo portanto influência negativa na eficiência de separação.

4.4 - MODELAGEM MATEMÁTICA

Na revisão bibliográfica e análise da literatura realizada no Capítulo 1, verificamos a quase inexistência de estudos detalhados sobre as condições de transferência de massa em extratores verticais contínuos de discos rotativos. No presente capítulo verificamos a importância do estabelecimento destes parâmetros no projeto e desempenho do extrator.

E.B. TAMBOURGI⁽⁸⁰⁾ (1989), verificou a direta proporção entre a dispersão e a eficiência de separação no extrator P.R.D.C., apesar de não ter realizados estudos com transferência de massa em sistemas bifásicos. Este autor propôs a seguinte correlação experimental para a previsão da dispersão no extrator P.R.D.C., na forma do número de dispersão $D/V \cdot L$, para o escoamento monofásico

$$\frac{D}{V \cdot L} = 1,004 \cdot \left[\frac{\mu}{dp^2 \cdot N \cdot \rho} \right]^{0,2704} \cdot \left[\frac{N^3 \cdot dp^5 \cdot \rho}{P_o \cdot g} \right]^{0,0127} \cdot \left[\frac{dp \cdot N}{V} \right]^{0,231} \cdot \left[\frac{h \cdot Nd}{dp} \right]^{0,037}$$

(4.70)

e para a velocidade característica em escoamento bifásico

$$\frac{V_n}{L \cdot N} = 15,1 \cdot \left[\frac{\mu_c}{dp^2 \cdot N \cdot \rho_c} \right]^{0,856} \cdot \left[Al \right]^{-0,018} \cdot \left[\frac{nd}{nd + 1} \right]^{-1,319} \cdot \left[\frac{h}{dp} \right]^{-2,63} \cdot \left[\frac{g}{Nd^2 \cdot dp} \right]^{0,142}$$

(4.17)

A partir destas correlações, dos estudos

realizados por D.H.LOGSDAIL e outros⁽⁶⁾(1957) e por B.J.POPE e N.R.SHAH⁽¹⁵⁾(1971) e pela análise sistemática dos experimentos e resultados obtidos concluímos que, para a obtenção de uma correlação generalizada para descrição matemática da eficiência de separação no extrator estudado neste trabalho, deveríamos utilizar uma relação funcional do tipo

$$\lambda = f(C_D, C_R, C_R^e, N, dp, l, Al, Q_R, Q_D, \rho_c, \mu_c, g) \quad (4.71)$$

Aplicando - se os conceitos de análise adimensional, teorema II, e baseados nos estudos supra referidos, pudémos obtermos 6 grupos adimensionais, a saber:

$$A_1 = \frac{C_D - C_R}{C_D - C_R^e} = \text{eficiência de separação, ou desvio na quantidade de soluto transferido em relação ao equilíbrio.}$$

$$A_2 = \frac{dp_2 \cdot N \cdot \rho_c}{\mu_c} = \text{número de Reynolds de agitação.}$$

$$A_3 = \frac{Nd}{Nd + 1} = \text{relação entre o número de discos rotativos e o número de compartimentos do extrator.}$$

$$A_4 = \frac{Q_D}{Q_R} = \text{razão entre a taxa de alimentação da fase dispersa e a saída da fase refinado.}$$

$A_5 = A_l$ = área livre de escoamento dos discos rotativos.

$A_6 = \frac{\mu_c^2}{g \cdot \rho_c^2 \cdot l^3}$ = número de escoamento, relação entre as forças viscosas e gravitacionais no escoamento.

Os quais foram correlacionados através da seguinte equação empírica,

$$\lambda = A_1 = C_1 \cdot A_2^{C_2} \cdot A_3^{C_3} \cdot A_4^{C_4} \cdot A_5^{C_5} \cdot A_6^{C_6} \quad (4.72)$$

ou

$$\lambda = \frac{C_D - C_R}{C_D - C_R^e} = C_1 \cdot \left(\frac{dp_2 \cdot N \cdot \rho_c}{\mu_c} \right)^{C_2} \cdot \left(\frac{Nd}{Nd + 1} \right)^{C_3} \cdot \left(\frac{O_D}{O_R} \right)^{C_4} \cdot \left(A_l \right)^{C_5} \cdot \left(\frac{\mu_c^2}{g \cdot \rho_c^2 \cdot l^3} \right)^{C_6} \quad (4.73)$$

onde $C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6$ são constantes a serem ajustadas.

Para o ajuste das constantes C_i utilizamos o método da regressão linear multivariável. Uma listagem completa do programa computacional, elaborado em linguagem FORTRAN 77, utilizado para a obtenção das constantes C_i , é mostrado no anexo (A - VI), juntamente com os arquivos de entrada e saída do mesmo. Os valores obtidos para as constantes C_i foram,

$$C_1 = 0.6577$$

$$C_2 = 0.08315$$

$$C_3 = 0,6885$$

$$C_4 = -0,06649$$

$$C_5 = 0,1087$$

$$C_6 = 0,01078$$

Desta forma a correlação (4.73) torna - se

$$\frac{C_D - C_R}{C_D - C_R^*} = 0,6577 \cdot \left[\frac{0,08315}{\left(\frac{dp_2 \cdot N \cdot \rho_c}{\mu_c} \right)} \right] \cdot \left[\frac{0,6885}{\left(\frac{Nd}{Nd + 1} \right)} \right] \cdot \left[\frac{-0,06649}{\left(\frac{Q_R}{Q_D} \right)} \right] \cdot \left[\frac{0,1087}{Al} \right] \cdot \left[\frac{0,01078}{\left(\frac{\mu_c^2}{g \cdot \rho_c^2 \cdot 1^9} \right)} \right] \quad (4.74)$$

Na figura (4.12) e no anexo (A - VI), temos ilustrado uma comparação entre os resultados experimentais e os resultados obtidos pela correlação (4.74). Obtivemos um erro máximo de 24,32% e um erro médio de 4,78%. O que nos permite afirmar que a correlação (4.74) descreve satisfatoriamente os resultados obtidos nos experimentos com relação a transferência de massa na direção da fase dispersa para a fase contínua no extrator P.D.R.C. descrito nos capítulos anteriores.

Infelizmente, devido à inexistência de outros estudos sobre transferência de massa em extratores similares ao estudado neste trabalho, não foi possível a realização de uma comparação entre os resultados obtidos neste trabalho com os resultados obtidos por outros pesquisadores.

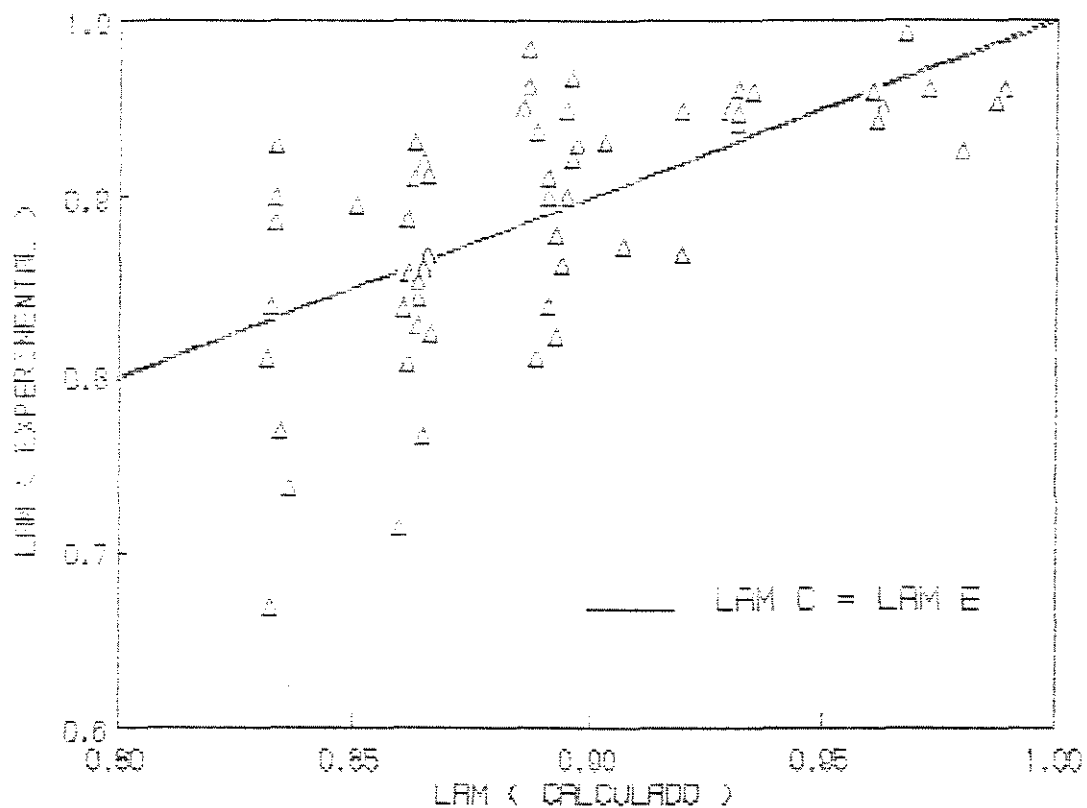


Figura (4.12) - Comparação entre os resultados experimentais obtidos e os resultados obtidos pela correlação (4.74), para a eficiência de separação (λ).

4.5 - CONCLUSÃO

No presente capítulo estudamos e determinamos as condições de transferência de massa em um extrator de discos rotativos perfurados para diversas condições operacionais e configurações geométricas do extrator. Para cada experimento determinamos as vazões das fases, contínua e dispersa, extrato e refinado, e as concentrações de ácido acético em cada uma destas fases. Determinamos também as concentrações no equilíbrio das fases, por processo computacional, e as condições de transferência de massa, isto é, encontramos as vazões e as concentrações de ácido acético nas entradas e saídas do extrator. Com as condições de transferência de massa estabelecidas encontramos um modelo teórico para a descrição matemática destas condições. Neste estudo adotamos o estabelecimento de uma correlação empírica, para a eficiência de separação.

Neste capítulo também realizamos estudos da influência das variáveis geométricas e operacionais na eficiência de separação do extrator. Observamos que para o extrator utilizado houve, a ocorrência de retornos axiais das fases contínua e dispersa, back flow e back mixing respectivamente. Para a obtenção de tais conclusões relacionamos a eficiência de separação com a velocidade de rotação corrigida, tendo as diversas configurações mencionadas como parâmetros.

E por último, após a término das análises da

transferência de massa no extrator P.R.D.C., construímos uma correlação empírica, utilizando os conhecimentos de análise dimensional e regressão linear multivariável, para descrever matematicamente a eficiência de separação ou a transferência de massa no extrator estudado.

CONCLUSÕES FINAIS E RECOMENDAÇÕES

O presente trabalho teve como principal objetivo o estabelecimento das condições de transferência de massa e de operação de um extrator de discos rotativos perfurados, em complementação do trabalho realizado por E. B. TAMBOURGI⁽³⁰⁾ (1989). Bem como adicionar mais um item para o projeto e desenvolvimento deste extrator de fácil construção, operação e manutenção, para as mais diversas aplicações nos setores industriais onde a extração líquido - líquido esteja presente.

No estabelecimento das condições de transferência de massa e de operação do extrator foram realizados uma série de experimentos visando a obtenção de dados referentes à velocidade característica, definida como sendo a velocidade de ascensão de uma gota da fase dispersa na fase contínua, para posterior comparação com os trabalhos de outros pesquisadores e a verificação da região de escoamento em função da velocidade de rotação dos discos. As condições de transferência de massa foram estabelecidas através da determinação da eficiência de separação do extrator (λ), para cada configuração geométrica e operacional estabelecida e foi construída uma correlação experimental capaz de descrever os resultados obtidos, equação (4.74).

Diversas configurações geométricas do

extrator foram testadas, variando - se o número de discos rotativos, 5 ou 7 discos e a área livre de escoamento de fluxo, 40%, 20% central, 20% periferia e 20% centro-periferia. As variações operacionais foram realizadas através da variação das vazões das fases contínua e dispersa, nas faixas de $3.5 \text{ cm}^3/\text{s}$ até $7.8 \text{ cm}^3/\text{s}$ e $5.5 \text{ cm}^3/\text{s}$ até $6.9 \text{ cm}^3/\text{s}$, respectivamente, de tal forma a obtermos três realções entre as vazões das fases, maior, igual e menor que um (1.0), e a velocidade de rotação teve seu valor variado na faixa de 80 rpm até 170 rpm.

No Capítulo 3 do presente trabalho foram verificadas as condições de inundação do extrator pela determinação experimental das velocidades superficiais de inundação de cada fase. Com as velocidades superficiais de inundação determinadas, foram calculadas graficamente as velocidades superficiais para cada configuração adotada. A partir dos resultados obtidos para as velocidades superficiais, foi realizado um estudo comparativo entre os resultados experimentais com os resultados obtidos por correlações propostas por diversos outros pesquisadores.

A correlação proposta por D.H. LOGSDAIL e outros⁽⁶⁾ (1961) não foi capaz de descrever adequadamente os resultados experimentais obtidos neste trabalho, pois não incluiu na sua elaboração os retornos axiais, estes autores também realizaram seus estudos em um extrator do tipo R.D.C..

Os resultados obtidos pela correlação proposta por E.B. TAMBOURGI⁽³⁰⁾ (1989), também não descreveram adequadamente

os resultados experimentais. Podemos justificar este fato, pois o pesquisador utilizou sistema bifásico sem transferência de soluto entre as fases, mesmo utilizando extratores do tipo P.R.D.C..

Apesar dos extratores estudados por G.S.LADDHA e outros⁽¹⁶⁾ (1978) serem do tipo R.D.C., os resultados obtidos pela correlação proposta por eles, foram os que mais se aproximaram dos resultados experimentais, isto porque, esta correlação prevê a ocorrência de retornos axiais das fases em escoamento bifásico com transferência de soluto.

Foi verificado, também no Capítulo 3, que o escoamento está na região II de escoamento e esta região é atingida a baixas velocidades de rotação dos discos. Nesta região a velocidade característica é inversamente proporcional à velocidade de rotação, e na região I a velocidade característica independe da velocidade de rotação.

Ficou demonstrado neste trabalho a necessidade da realização de um estudo mais detalhado para a determinação das condições de inundação do extrator para escoamento com transferência de soluto em ambas as direções de transferência, assim como a determinação da fração mássica retida da fase dispersa, hold up.

No Capítulo 4 do presente trabalho foram estabelecidas as condições de transferência de massa no extrator utilizando o sistema líquido água - n-butanol - ácido acético, com o soluto, ácido acético, diluído na fase dispersa, n-butanol. A partir da determinação das vazões nas entradas e saídas do

extrator e suas respectivas concentrações de ácido acético, bem como, a determinação das concentrações no equilíbrio das fases, foi possível a construção de uma correlação experimental para a eficiência de separação (λ), que descreve os resultados experimentais obtidos com um erro médio de aproximadamente $\pm 5\%$. A análise dos resultados experimentais obtidos nos permite concluir que a área livre de escoamento é a variável geométrica que mais influência na eficiência de separação, visto que as maiores eficiências de separação e a maior facilidade de operação do extrator foram obtidas quando se utilizou a configuração de 40% de área livre de escoamento, ocorrendo uma grande variação quando a área livre foi reduzida. Observamos que a eficiência de separação aumenta com o aumento da velocidade de rotação dos discos até um ponto onde a resistência imposta ao escoamento pelos discos rotativos é tal que, a ocorrência de retorno axial da fase contínua, back flow, e a ocorrência de inundação impedem a operação do extrator. O valor máximo da velocidade de rotação dos discos situou - se na faixa de 200 rpm. A análise dos resultados experimentais sobre o ponto de vista da razão entre as vazões das fases contínua e dispersa, com transferência de soluto ocorrendo no sentido da fase dispersa para a contínua, nos permite afirmar que a eficiência de separação aumenta com o aumento da razão Q_c/Q_d ou (V_c/V_d) , até um ponto ótimo em $V_c/V_d \cong 1,0$, acima deste ponto obtivemos altas eficiências de separação somente para baixas velocidades de rotação dos discos. Com o aumento destas velocidades houve a ocorrência de retorno axial da fase contínua.

reduzindo assim a eficiência de separação. Podemos observar que este tipo de extrator nos fornece altas eficiências de separação, mesmo a baixas velocidades de rotação, que é uma grande vantagem em relação aos equipamentos convencionais que necessitam operar a altas velocidades de rotação para a obtenção de vantajosas eficiências de separação. A correlação proposta no final do Capítulo 4 pode ser utilizada para a previsão da transferência de massa e para projetos de equipamentos similares ao extrator estudado.

No presente trabalho não foi elaborado uma correlação para a determinação dos coeficientes de transferência de massa, devido a falta de estudos em relação ao diâmetro da gota ascendente da fase dispersa e com relação a fração retida da fase dispersa. Este fato se deve principalmente a inexistência de métodos experimentais precisos para determinação destes parâmetros, ficando este trabalho como sugestão para estudos posteriores.

Mesmo sendo as condições de transferência de massa uma função da tensão superficial do sistema ternário estudado, esta não foi obtida devido a dificuldades experimentais e também porque trabalhamos apenas com um sistema ternário.

Certamente que estudos devem ser realizados no futuro visando a obtenção dos coeficientes de transferência de massa, individuais ou globais, para o pleno conhecimento dos fenômenos que regem a transferência de massa no interior do extrator de discos rotativos perfurado.

Como sugestão podemos citar a realização de testes com transferência de soluto em ambas as direções possíveis e a utilização de vários sistemas líquidos, utilizando as variáveis geométricas e operacionais mencionadas, e mais a variação da altura do compartimento de extração e a espessura dos discos rotativos que certamente influênciam no escoamento e consequentemente na transferência de massa no interior da coluna.

ANEXO (A-I)

RESULTADOS EXPERIMENTAIS OBTIDOS RELATIVOS A

VELOCIDADE CARACTERÍSTICA

Nas tabelas (A - I.1) apresentamos os resultados experimentais obtidos relativos a velocidade característica no extrator P.R.D.C., para as diversas variações operacionais e geométricas utilizadas .

Na tabela (A - I.2) apresentamos uma comparação entre os resultados obtidos neste trabalho e os resultados obtidos pelas correlações experimentais propostas por D.H. LOGSDAIL e outros⁽⁶⁾(1957), G.S.LADDHA e outros⁽¹⁶⁾(1978), S.H. ZHANG e outros⁽²²⁾(1981) e E.B.TAMBOURGI⁽³⁰⁾(1989).

Nd	Al	h	N	Q_{11}	Q_{12}	Q_{13}
7	40%	5,6	60	0,384	0,442	2,075
				0,500	0,382	
				0,706	0,356	
7	40%	3,6	100	0,319	0,356	2,146
				0,384	0,291	
				0,529	0,277	
7	40%	3,6	125	0,101	0,332	1,926
				0,238	0,310	
				0,351	0,291	
7	40%	3,6	150	0,106	0,310	1,885
				0,209	0,291	
5	20%P	5,6	175	0,577	0,392	3,006
				0,722	0,310	
				0,885	0,298	
5	20%P	5,6	200	0,635	0,310	2,862
				0,731	0,290	
				0,824	0,297	
5	20%P	5,6	220	0,277	0,287	2,829
				0,364	0,281	
				0,476	0,277	

Tabela (A - I.1) - Resultados experimentais relativos a inundação. l = 40cm. dp = 5.3cm e dp = 5.1cm

Nd	A1	h	N	Vm1	Vm2	Vm3	Vm4	Vm5
7	40%	3,6	60	0,2828	7,698	7,698	0,4610	2,075
			100	0,6835	2,767	2,767	0,4292	2,146
			125	0,6835	1,772	1,772	6,4168	1,926
			150	0,6871	1,238	1,238	0,4835	1,855
5	20%	5,6	175	0,8487	1,345	1,345	0,1332	3,087
			200	0,8311	1,838	1,838	0,1315	2,286
			228	0,8257	0,851	0,851	0,1297	2,829

Tabela (A - I.2) - Comparação entre os resultados obtidos em diversos estudos para a velocidade característica.

N	U ₁	U ₂	C _D	C _E	C _F	C _G	C _H	C _I	C _J	Δ	λ	ξ
88	0,268	0,268	0,2817	0,1227	0,1448	0,1488	0,1558	-0,9	0,958	75,7		
	0,319	0,268	0,2817	0,1272	0,1298	0,1314	0,1285	-6,4	0,942	76,2		
	0,157	0,318	0,2817	0,1997	0,1874	0,2841	0,1824	11,7	0,958	76,8		
128	0,268	0,268	0,2817	0,1431	0,1489	0,1488	0,1336	-3,3	0,951	114,1		
	0,319	0,268	0,2817	0,1383	0,1296	0,1314	0,1285	-9,7	0,944	113,2		
	0,157	0,318	0,2817	0,2835	0,1863	0,2841	0,1824	+3,3	0,961	115,3		
178	0,268	0,268	0,2817	0,1448	0,1391	0,1488	0,1336	+6,5	0,963	163,7		
	0,319	0,268	0,2817	inund.	inund.	0,1314	0,1285	inund.	inund.	inund.		
	0,157	0,318	0,2817	0,1636	0,1878	0,2841	0,1824	-3,3	0,954	167,3		

Tabela (A - 11.1): Nd = 7

A1 = 48%

N	U ₁	U ₂	C _D	C _E	C _F	C _G	C _H ²	C _I ²	C _J ²	Δ	λ	ξ
88	0,268	0,268	0,2817	0,1363	0,1598	0,1488	0,1336	+4,1	0,829	75,7		
	0,319	0,268	0,2817	0,1287	0,1454	0,1814	0,1285	+2,6	0,846	76,5		
	0,157	0,318	0,2817	0,1849	0,2814	0,2841	0,1824	+4,5	0,889	79,1		
128	0,268	0,268	0,2817	0,1318	0,1537	0,1488	0,1336	-2,8	0,864	112,4		
	0,319	0,268	0,2817	0,1128	0,1462	0,1314	0,1285	+8,7	0,848	118,7		
	0,157	0,318	0,2817	0,1454	0,1999	0,2841	0,1824	-2,6	0,824	115,2		
178	0,268	0,268	0,2817	inund.	inund.	0,1488	0,1336	inund.	inund.	inund.		
	0,319	0,268	0,2817	inund.	inund.	0,1314	0,1285	inund.	inund.	inund.		
	0,157	0,318	0,2817	inund.	inund.	0,2841	0,1824	inund.	inund.	inund.		

Tabela (A - 11.2): Nd = 7

A1 = 28% - Periferia

N	U ₁	U ₂	C _D	C _E	C _F	C _G ²	C _H ²	Δ	λ	ξ
88	0,268	0,268	0,2311	0,1844	0,1281	0,1218	0,1111	+2,4	0,858	78,1
	0,319	0,268	0,2311	0,1885	0,1897	0,1185	0,8981	+1,6	0,913	77,7
	0,157	0,318	0,2311	0,1561	0,1543	0,1626	0,1886	-5,2	0,931	76,5
128	0,268	0,268	0,2311	0,1137	0,1238	0,1218	0,1111	+3,5	0,981	114,8
	0,319	0,268	0,2311	0,1877	0,1884	0,1185	0,8981	+4,5	0,923	118,3
	0,157	0,318	0,2311	0,1581	0,1528	0,1626	0,1886	-2,9	0,949	118,8
178	0,268	0,268	0,2311	0,1883	0,1288	0,1218	0,1111	-5,9	0,869	152,5
	0,319	0,268	0,2311	inund.	inund.	0,1185	0,8981	inund.	inund.	inund.
	0,157	0,318	0,2311	0,1687	0,1528	0,1626	0,1886	-2,2	0,949	161,8

Tabela (A - 11.3): Nd = 7

A1 = 28% - Central

N	W _c	W _p	C _D	C _E	C _S	C _T	C _T ^E	C _T ^E	L	λ	β
88	0,268	0,268	0,2311	0,1198	0,1268	0,1218	0,1111	0,1111	16,6	0,009	73,8
	0,319	0,268	0,2311	0,0997	0,1607	0,1185	0,0901	0,0928	16,6	0,928	74,2
	0,157	0,318	0,2311	0,1618	0,1681	0,1626	0,1486	0,1486	18,4	0,861	74,3
128	0,268	0,268	0,2311	0,1285	0,1288	0,1218	0,1111	0,1111	12,8	0,981	111,6
	0,319	0,308	0,2311	0,1609	0,1604	0,1185	0,0901	0,0938	-0,1	0,938	188,2
	0,157	0,318	0,2311	0,1520	0,1585	0,1626	0,1486	0,1486	-1,8	0,888	115,2
178	0,268	0,268	0,2311	inund.	inund.	0,1218	0,1111	inund.	inund.	inund.	inund.
	0,319	0,268	0,2311	inund.	inund.	inund.	0,1185	0,0901	inund.	inund.	inund.
	0,157	0,318	0,2311	inund.	inund.	inund.	0,1626	0,1486	inund.	inund.	inund.

Tabela (A - 11,4) : N_D = 7

A1 = 28% - Centro - Periferia

N	W _c	W _p	C _D	C _E	C _S	C _T	C _T ^E	C _T ^E	L	λ	β
88	0,268	0,268	0,2293	0,1844	0,1885	0,1289	0,1874	0,1874	15,8	0,011	80,2
	0,319	0,268	0,2293	0,1639	0,1688	0,1852	0,0962	0,0962	-1,9	0,778	76,4
	0,157	0,318	0,2293	0,1398	0,1566	0,1626	0,1486	0,1486	-7,8	0,981	78,4
128	0,268	0,268	0,2293	0,1118	0,1268	0,1289	0,1874	0,1874	14,7	0,841	119,7
	0,319	0,268	0,2293	0,0895	0,1156	0,1852	0,0962	0,0962	-3,8	0,854	117,9
	0,157	0,318	0,2293	0,1342	0,1715	0,1626	0,1486	0,1486	17,3	0,716	122,3
178	0,268	0,268	0,2293	0,1156	0,1118	0,1289	0,1874	0,1874	11,8	0,964	167,8
	0,319	0,268	0,2293	0,0932	0,1681	0,1852	0,0962	0,0962	-3,1	0,911	157,5
	0,157	0,318	0,2293	0,1538	0,1566	0,1626	0,1486	0,1486	11,8	0,981	154,4

Tabela (A - 11,5) : N_D = 5

A1 = 28% - Centro - Periferia

N	W _c	W _p	C _D	C _E	C _S	C _T	C _T ^E	C _T ^E	L	λ	β
88	0,268	0,268	0,2293	0,0932	0,1268	0,1289	0,1874	0,1874	-4,4	0,841	78,8
	0,319	0,268	0,2293	0,0788	0,1111	0,1852	0,0962	0,0962	-12,6	0,888	78,3
	0,157	0,318	0,2293	0,1398	0,1752	0,1626	0,1486	0,1486	18,3	0,678	79,5
128	0,268	0,268	0,2293	0,1838	0,1286	0,1289	0,1874	0,1874	-2,5	0,828	180,1
	0,319	0,268	0,2293	0,0932	0,1681	0,1852	0,0962	0,0962	-3,3	0,911	116,4
	0,157	0,318	0,2293	0,1379	0,1673	0,1626	0,1486	0,1486	-2,6	0,788	111,4
178	0,268	0,268	0,2293	0,1838	0,1385	0,1289	0,1874	0,1874	12,9	0,811	163,4
	0,319	0,268	0,2293	0,0932	0,1644	0,1852	0,0962	0,0962	-6,4	0,938	161,5
	0,157	0,318	0,2293	0,1417	0,1566	0,1626	0,1486	0,1486	-1,9	0,981	158,5

Tabela (A - 11,6) : N_D = 5

A1 = 28% - Periferia

80	0,260	0,260	0,2280	0,1110	0,1110	0,1157	0,1037	-3,5	0,901	70,7
	0,351	0,260	0,2200	0,0823	0,1037	0,0940	0,0809	0,0	0,896	59,0
	0,157	0,310	0,2280	0,1165	0,1003	0,1574	0,1092	-5,2	0,739	73,4
120	0,260	0,260	0,2293	0,1144	0,1179	0,1209	0,1074	-2,5	0,914	110,0
	0,351	0,260	0,2293	0,0930	0,1096	0,1052	0,0962	-3,0	0,899	117,5
	0,157	0,310	0,2293	0,1502	0,1617	0,1626	0,1406	+4,5	0,930	119,2
170	0,260	0,260	0,2293	0,1189	0,1092	0,1209	0,1074	0,0	0,895	167,5
	0,351	0,260	0,2293	inund.	inund.	0,1052	0,0962	inund.	inund.	inund.
	0,157	0,310	0,2293	0,1555	0,1526	0,1626	0,1406	+4,3	0,951	171,3

Tabela (A - II.7): Nd = 5

Al = 20% - Central

N	V_i	U_i	C_F	C_E	C_F	C_E^E	C_F^E	Δ	λ	θ
80	0,260	0,260	0,2293	0,1044	0,1158	0,1210	0,1074	-2,0	0,931	73,5
	0,351	0,260	0,2293	0,0857	0,1138	0,1000	0,0962	-5,8	0,874	68,3
	0,157	0,310	0,2293	0,1342	0,1512	0,1626	0,1406	-6,6	0,968	82,2
120	0,260	0,260	0,2293	0,0895	0,1120	0,1210	0,1074	-9,6	0,902	113,0
	0,351	0,260	0,2293	0,0020	0,1094	0,1000	0,0962	-11,2	0,901	107,4
	0,157	0,310	0,2293	0,1110	0,1520	0,1626	0,1406	-12,0	0,940	114,0
170	0,260	0,260	0,2293	0,0895	0,1081	0,1210	0,1074	-7,5	0,994	140,0
	0,351	0,260	0,2293	0,0020	0,1059	0,1000	0,0962	-12,0	0,927	116,4
	0,157	0,310	0,2293	0,1260	0,1517	0,1626	0,1406	-11,4	0,962	129,6

Tabela (A - II.8): Nd = 5

Al = 40%

ANEXO (A - III)

VOLUMETRIA DE NEUTRALIZAÇÃO

Para a determinação das concentrações do soluto ácido acético nas fases dispersa, extrato e refinado, obteve-se pela técnica de volumetria de neutralização ou titulação simples, devido às facilidades que o método apresenta. N. BACCAN e outros⁽¹⁸⁾ (1979) indicam para a titulação do ácido acético o uso de uma solução padronizada 0.1N de NaOH (hidróxido de sódio) como neutralizante e fenolftaleína como indicador mais apropriado para acompanhar o ponto de viragem (ph = 7,0).

N. BACCAN e outros⁽¹⁸⁾ (1979) propuseram a seguinte técnica para a titulação do ácido acético: Dilui-se até a marca 50ml da amostra da solução do ácido em um balão volumétrico de 1000.0ml e procede-se a homogeneização. Transfere-se, então, alíquotas de 50.00ml com a pipeta calibrada para frascos erlenmeyer de 250ml de capacidade. Adiciona-se três gotas da solução de fenolftaleína para cada amostra e titula-se o ácido acético com a solução 0.1N de NaOH padronizada até a viragem, incolor para rosa claro. Após a viragem anotar o volume de NaOH 0.1M gasto na neutralização e calcular a concentração do ácido acético em moles por litro de solução através da seguinte equação:

$$C = 0.4 \cdot V_g \cdot N_p$$

onde: C é a concentração do ácido acético em moles/litro. V_g é o volume gasto de NaOH e N_p é a normalidade da solução padronizada de NaOH.

ANEXO (A - IV)

CALIBRAÇÃO DOS ROTÂMETROS

Para a realização do presente trabalho foi necessário a calibração dos rotâmetros disponíveis, visto que estes não foram produzidos especificamente para os fluidos do estudo. Os rotâmetros em número de dois, um ALLYNOX e outro OMEL, foram utilizados para medir as vazões das fases contínua (solvente ou água pura) e dispersa (n-butanol), respectivamente.

A técnica de calibração consistiu na retirada de amostras, com o auxílio de provetas graduadas e de um cronômetro digital CASIO 470S, anotando - se o volume coletado em um determinado espaço de tempo para a determinação das vazões. O corpo do rotâmetro foi graduado com um espaçamento de 0,5cm entre cada intervalo, foi retirado um ponto experimental para cada intervalo para futura construção das curvas de calibração e para a determinação das correlações experimentais que descreveram matematicamente estas curvas. Os resultados experimentais obtidos são mostrados nas tabelas (A - IV.1) e (A - IV.2) e as curvas de calibração são mostradas nas figuras (A - IV.1) e (A - IV.2) respectivamente para a calibração dos rotâmetros de água e n-butanol. Utilizou - se a técnica de regressão polinomial de segunda ordem para a determinação das correlações experimentais mostradas abaixo:

para o rotâmetro de água

$$Q_{H_2O} = 3,469 + 12,200 \cdot \left[\frac{LR - 3}{15 - 3} \right] + 8,403 \cdot \left[\frac{LR - 3}{15 - 3} \right]^2$$

(A - IV.1)

e para o rotâmetro de n-butanol

$$Q_{n-But.} = 5,734 + 4,073 \cdot \left[\frac{LR - 3}{9 - 3} \right] + 5,144 \cdot \left[\frac{LR - 3}{9 - 3} \right]^2$$

(A - IV.2)

onde: LR é a leitura da altura do flutuador no rotâmetro, Q_{H_2O} é a vazão volumétrica de água pura e Q_{n-But} é a vazão volumétrica do n-butanol, ambos em cm^3/s .

Temperatura da água = 24°C

Densidade da água à 24°C = 0,99733

Sistema de unidades = c.g.s.

Leitura no rotametro	Tempo de coleta	Massa coletada	Vazão massica	Vazão volumétrica
03	40,2	132,10	3,29	3,30
03	34,8	111,30	3,20	3,21
04	45,2	212,30	4,70	4,71
05	42,4	247,90	5,85	5,87
05	33,8	199,90	5,91	5,93
06	39,4	273,80	6,95	6,97
07	35,0	288,90	8,25	8,27
07	30,8	259,00	8,41	8,43
08	36,2	363,90	10,05	10,08
09	32,7	381,80	11,68	11,71
09	32,0	379,4	11,86	11,89
10	31,1	419,10	13,48	13,52
11	27,3	429,30	15,73	15,77
11	31,3	475,80	15,20	15,24
12	23,3	395,60	16,98	17,03
13	22,0	420,10	19,10	19,15
13	26,7	507,10	18,99	19,04
14	20,9	448,90	21,48	21,54
15	17,4	423,20	24,32	24,39
15	21,0	505,80	24,09	24,15

Tabela (A - IV.10) Resultados experimentais obtidos na calibração do rotâmetro de água.

Temperatura do n-butanol = 24.7°C

Densidade do n-butanol à 24.7°C = 0.790

Sistema de unidades = c.g.s.

Letura no rotametro	Tempo de coleta	Massa coletada	Vazão massica	Vazão volumétrica
03	19.3	87.70	4.54	5.75
3.5	31.0	146.10	4.71	5.96
04	28.3	143.30	5.06	6.41
4.5	31.0	164.10	5.29	6.70
05	26.3	155.00	5.89	7.46
5.5	30.1	187.00	6.21	7.86
06	26.8	184.30	6.88	8.71
6.5	30.5	219.70	7.20	9.11
07	27.3	209.70	7.68	9.72
7.5	27.6	229.20	8.30	10.51
08	26.7	233.10	8.73	11.05
8.5	21.8	208.10	9.55	12.09
09	22.1	222.90	10.09	12.71
9.5	18.8	206.80	11.00	13.92
10	19.4	233.60	12.04	15.24

Tabela (A - IV.2) Resultados experimentais obtidos na calibração
do rotâmetro de n-butanol.

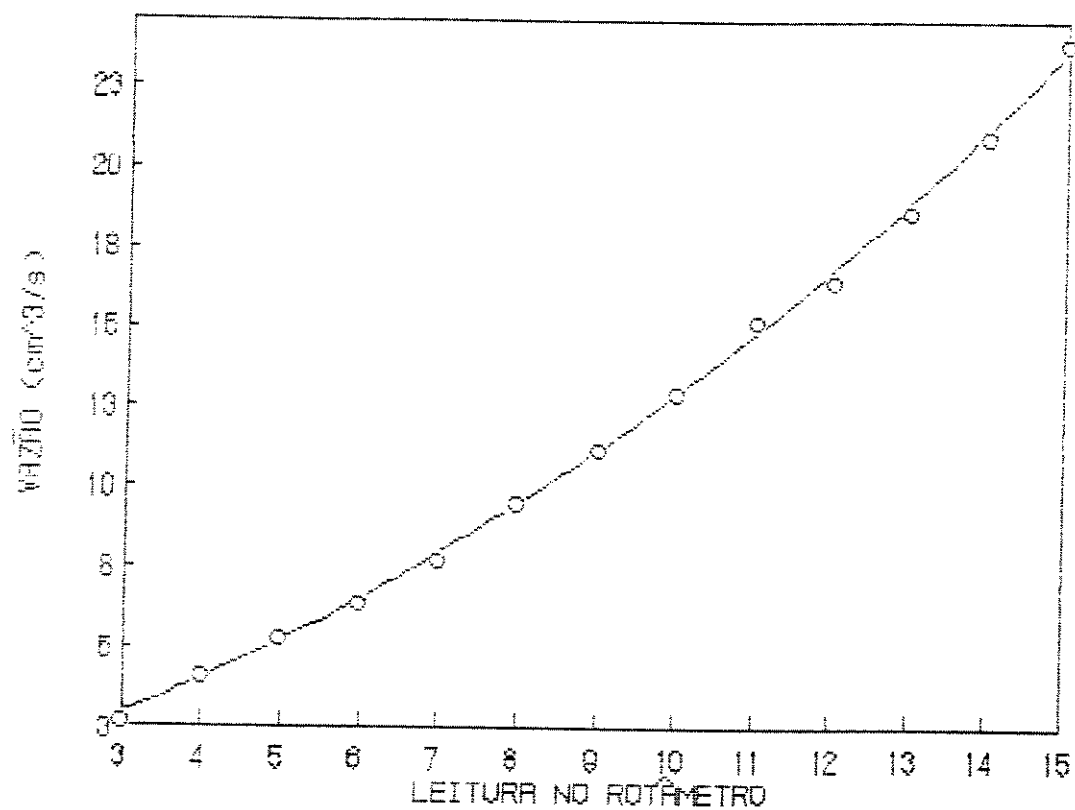


Figura C A - IV. 1 D: Curva de calibração do rotâmetro de água.

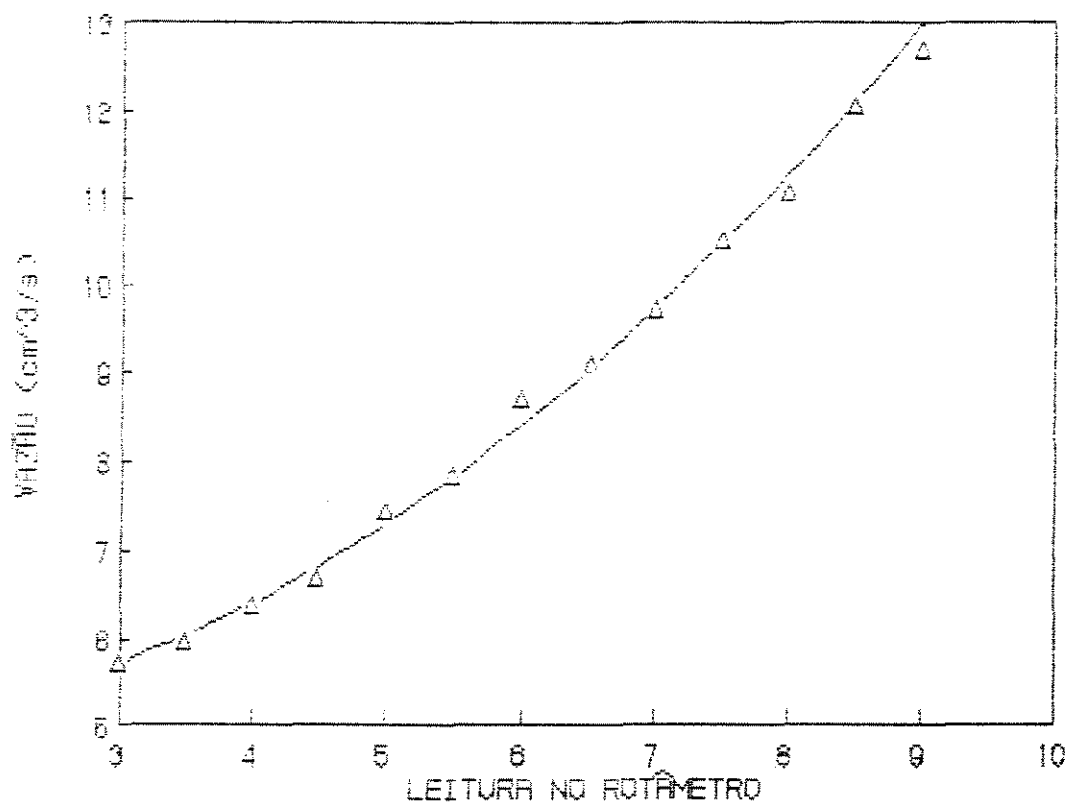


Figura (A - IV.2): Curva de calibração do rotâmetro de n-butanol.

ANEXO (A - V)

LISTAGENS DO PROGRAMA EQUIL3

Neste anexo são apresentados: a listagem completa do programa EQUIL3, elaborado em linguagem FORTRAN 77, o arquivo de entrada de dados para o programa EQUIL3, denominado INPUT e o arquivo de saída do programa EQUIL3, denominado OUTPUT, onde são armazenados os resultados obtidos.

Listagem do programa EQUIL3

PROGRAM EQUIL3

PROGRAMA ELOBOADO POR LEINIS ANTONIO PERAZOLLI EM MARÇO DE 1989

Tape 7 = input, Tape 4 = output, Tape 3 = Data

PROGRAMA PRINCIPAL PARA A SUB-ROUTINA ELIPS, SOHENTE PARA SISTEMAS
TERNARIOS LIQUIDOS

```

      REAL Z(3),X(3),Y(3),K(3)
      INTEGER ER,ID(3),LL,IT
      COMMON/PURE/NR1(3),NR2(3),TC(3),PC(3),RD(3),DR(3),
1    A(3),C1(3),C2(3),C3(3),C4(3),C5(3),KU(3),QU(3),
2    QP(3),D1(3),D2(3),D3(3),D4(3)
      COMMON/BINARY/ETA(6),U(3,3)
      OPEN ( UNIT=3,FILE='DATA.DAT',STATUS='NEW' )
      OPEN ( UNIT=4,FILE='OUTPUT.DAT',STATUS='NEW' )
      OPEN ( UNIT=7,FILE='INPUT.DAT',STATUS='NEW' )
100 CALL PARIN (3,ER)
      IF (ER.EQ.0) GO TO 900
200 WRITE (*,17)
17 FORMAT (/, ' ENTRE COM N,T,( ID(I),I=1,3 )
      //,' FORMAT (I3,F7.2,S13)
      READ (*,02) N,T,( ID(I),I=1,3 )
02 FORMAT (I3,F7.2,S13)
      IF (N.EQ.0) GO TO 900
      KEY=1
210 WRITE (*,27)
27 FORMAT (/, ' ENTRAR COM IR,IE,( Z(I),I=1,3 )
      //,' FORMAT (2I3,3F7.4)
4    //,' FORMAT (2I3,3F7.4)
      READ (*,04) IR,IE,( Z(I),I=1,3 )
04 FORMAT (2I3,3F7.4)
      WRITE (7,02) N,T,( ID(I),I=1,3 )
      WRITE (7,04) IR,IE,( Z(I),I=1,3 )
      SZ=0.
      DO 212 I=1,N
212 SZ=SZ + Z(I)
      IF (SZ.LT.0.999) GO TO 200

```

ARMAZENAGEM DOS DADOS DE SAIDA DA SUB-ROUTINA DRELI

```

      WRITE (4,11) N,T
11  FORMAT (///,'    EQUILIBRIO LIQUIDO-LIQUIDO PARA ',I3,' COMPONENTES.
      3 SISTEMA A T='F7.2,' K' )
      WRITE (4,12)
12  FORMAT (///,3X,'INDICE',2X,'COMPONENTE',4X,'ALIMENTACAO',5X,'R FAS
      6 'E FASE',2X,'K',/)
      CALL ELIPS (N,ID,KEY,IR,IE,Z,T,V,X,Y,K,IER,IT)
      IF (IER.GT.0) WRITE (4,13) IER
13  FORMAT (/,'    *** ERRO',I3,'    *** ',/)
220 DO 229 I=1,I3
      II=ID(I)
      WRITE (4,14) II,NM1(I),NM2(I),Z(I),X(I),Y(I),K(I)
14  FORMAT (3X,I3,4X,2A4,1X,F8.4,3X,F8.4,3X,F8.4,3X,E12.5,/)
229 CONTINUE
      WRITE (4,15) V,IT
15  FORMAT (//,'    * E/F ='E12.5,' NUMERO DE ITERACOES ='I3,/////, )
      GO TO 910
900 WRITE (*,19)
19  FORMAT (//,' ERRO NA ENTRADA DOS PARAMETROS ',/)
910 CLOSE (UNIT=3)
      CLOSE (UNIT=4)
      CLOSE (UNIT=7)
      WRITE (*,23)
23  FORMAT (///,,'    FIM DE PROGRAMACAO ',/)
      END

```

```

C
C      SUBROUTINE PARIN( N,ERIN )
C
C      PARIN LE OS PARAMETROS PARA COMPONENTES PUROS E BINARIOS
C      NO BLOCO DE ARMAZENAMENTO COMMON /PURE/BINARE
C      DA BIBLIOTECA DE SISTEMAS MULTICOMPONENTES.
C      A ENTRADA E FEITA PELA UNIDADE LOGICA: UNIT 3. PARIN RETORNA ERIN = 0
C      AO MENOS QUE ALGUMA DISCREPANCIA SEJA DETECTADA NO ARQUIVO DE ENTRADA,
C      NESTE CASO RETORNA ERIN = 5.
C

```

```

      INTEGER ERIN
      COMMON/PURE/NM1(3),NM2(3),TC(3),PC(3),RD(3),DM(3),
1  A(3),C1(3),C2(3),C3(3),C4(3),C5(3),RU(3),QU(3),
2  QF(3),D1(3),D2(3),D3(3),D4(3)
      COMMON/BINARY/ETA(6),U(3,3)
100 ERIN = 0
      IF(N.GT.3) GO TO 900

```

```

C
C      LEITURA DOS PARAMETROS DOS COMPONENTES PUROS

```

```

C      DO 109 I=1,M
C
C      PRIMEIRA LINHA PARA COMPONENTE PURA
C
C      READ (*,01) J,NK1(J),NK2(J),TC(J),PC(J),A(J),RD(J),DK(J),RU(J),
C      3 GU(J),QP(J)
C      01 FORMAT (13,2A4,2F7.2,F6.4,F7.4,4F3.2)
C
C      VERIFICACAO DA SEQUENCIA DOS CARTOES
C
C      IF (J.NE.1) GO TO 900
C
C      SEGUNDA LINHA PARA COMPONENTES PUROS
C
C      READ (*,02) J,C1(J),C2(J),C3(J),C4(J),C5(J)
C      02 FORMAT (13,5E12.5)
C      IF (J.NE.1) GO TO 900
C
C      TERCEIRA LINHA PARA COMPONENTES PUROS
C
C      READ (*,03) J,D1(J),D2(J),D3(J),D4(J)
C      03 FORMAT (13,4E12.5)
C      IF (J.NE.1) GO TO 900
C
C      ARMAZENAGEM DOS PARAMETROS DOS COMPONENTES PUROS
C
C      WRITE (3,04) J,NK1(J),NK2(J),TC(J),PC(J),A(J),RD(J),DK(J),RU(J),
C      7 GU(J),QP(J)
C      WRITE (3,05) J,C1(J),C2(J),C3(J),C4(J),C5(J)
C      WRITE (3,06) J,D1(J),D2(J),D3(J),D4(J)
C      109 CONTINUE
C
C      VERIFICACAO DA LINHA EM BRANCO REQUERIDA PARA A SEPARACAO
C
C      READ (*,01) J
C      IF (J.NE.0) GO TO 900
C
C      LEITURA DOS PARAMETROS ETA DE ASSOCIACAO BINARIA
C
C      110 DO 117 I=1,M
C      11 = (I-1)*I/2 + 1
C      12 = (I-1)*I/2 + I
C      READ (*,04) (ETA(IJ),IJ=11,12)

```

```

      04 FORMAT (3F5.2)
C
C  ARMAZENAGEM DOS PARAMETROS ETA DE ASSOCIACAO BINARIA
C
      WRITE (3,04) ( ETA(IJ),IJ=11,12 )
119 CONTINUE
C
C  VERIFICACAO DA LINHA EM BRANCO REQUERIDA PARA A SEPARACAO
C
      READ (*,04, E
      IF (ABS(E).GT.1E-19) GO TO 900
C
C  PARAMETRO ZERO INICIAL DE ITERACAO BINARIA UNIGUAC
C
120 DO 121 I=1,N
      DO 121 J=1,M
121 U(I,J) = 0.
C
C  LEITURA DOS PARAMETROS BINARIOS UNIGUAC
C
125 READ (*,05) I,J,U1J,UJI
      05 FORMAT (2I3,2E13.6)
C
C  TERMINAR A LEITURA COM UMA LINHA EM BRANCO
C
      IF (I.EQ.0) GO TO 130
      U(I,J)=U1J
      U(J,I)=UJI
      GO TO 125
130 DO 139 I=1,3
C
C  U(I,I) = 1E+20 PARA COMPONENTES NAO-CONDENSAVEIS
C
      IF (A(I).LT.1.E-19) U(I,I)=1.E+20
139 CONTINUE
C
C  ARMAZENAGEM DOS PARAMETROS DE ITERACAO BINARIA UNIGUAC
C
      DO 140 I=1,3
      DO 140 J=1,3
140 WRITE (3,10) I,J,U(I,J)
      10 FORMAT (2I3,E13.6)
      RETURN
C
C  RETORNO DEVIDO A ERRO DE DISCREPANCIA NO BLOCO DE ENTRADA

```

C

```

900 ERIN = 0
RETURN
END

```

C

```

SUBROUTINE ELIPS(N, ID, KEY, IR, IE, Z, T, A, XR, XE, K, ERR, IT)

```

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

ELIPS CALCULA A COMPOSICAO DAS FASE CONJUGADAS XR E XE PARCIALMENTE
 MICIVEIS DE UM SISTEMA LIQUIDO DE 3 COMPONENTES DE COMPOSICAO GLOBAL
 A UMA DADA TEMPERATURA T(K). OS INDICES DOS VETORES ENVOLVIDOS DEVER
 ESTAR NO VETOR ID. IR E IE SAO O NUMEROS DE R E E FASES DOS COMPONENTES
 (ENTRAR COM 0 SE NAO OUVER SOLVENTE DESIGNADO). A FRACAO DO SISTEMA
 NA FASE SERA RETORNADA EM A, COM A SENDO 0 OU 1 SE XR = XE OU SE F
 ESTIVER NA REGIAO DE UMA UNICA FASE. ELIPS NORMALMENTE RETORNA ERR =
 HAS SE COMBINACOES DE DADOS ENVOLVIDOS ESTAO PERDIDAS ELA RETORNA ERR =
 SE A CONVERGENCIA NAO E ALCANCADA, RETORNA ERR = 2 E SE Z ESTA PROXIMO
 PLAIT POINT NA RESSOLUCAO, RETORNA ERR = 7.

```

REAL Z(N), XR(N), XE(N), K(N), GAR(3), GAE(3), K1(3), KS, KP, K2,  

  RX(3), EX(3), DT, DE, A, AA  

INTEGER ID(N), ERR, ERL, IT

```

```

100 ERR=0

```

```

KEE=KEY

```

```

IF (IR.EQ.0.OR.IE.EQ.0) GO TO 101

```

```

GO TO (101,130,130,130,130,130,130,130,101,130),KEY

```

C

C

C

PARA SISTEMAS NOVOS COM IR, IE NAO ESPECIFICADOS, SAO CALCULADOS IR, IE
 COMO UM PAR SOLUVEL

C

```

101 KS=1.

```

```

KP=1.

```

```

110 DO 115 I=1,N

```

```

XR(I)=0.

```

```

115 XE(I)=0.

```

```

J1=1

```

```

IF (IR.NE.0) GO TO 120

```

```

IF (IE.NE.0) GO TO 121

```

```

116 DO 117 J=2,N

```

```

XR(J1)=0.

```

```

XE(J1)=0.

```

```

J1=J-1

```

```

XR(J)=0.78

```

```

XE(J)=0.02

```

```

XR(J-1)=0.

```

```

XE(J-1)=0.

```

```

      IF (Z(J).LT.0.10) GO TO 119
      DO 116 I=1,J1
      XE(I)=0.98
      XR(I)=0.02
      IF (I.GT.1) XE(I-1)=0.
      IF (I.GT.1) XR(I-1)=0.
      IF (Z(1).LT.0.10) GO TO 118
      CALL LILIK(N,ID,KEE,XR,XE,T,K,GAR,GAE,ERL)
      IF (ERL.GT.1) GO TO 900
      KEE=3
      IF (K(I).LE.KS) GO TO 117
      KS=K(I)
      IS=1
117 IF(1./K(J).LE.KS) GO TO 118
      KS=1./K(J)
      IS=J
118 CONTINUE
119 CONTINUE
      XR(N)=0.
      XE(N)=0.
      XR(J1)=0.
      XE(J1)=0.
      GO TO 123
120 IF(IE.NE.0) GO TO 130
      IS=IR
      GO TO 125
121 IS=IE
125 XE(IS)=0.98
      XR(IS)=0.02
126 DO 129 J=1,N
      IF (J.EQ.IS) GO TO 129
      XR(J)=0.98
      XE(J)=0.02
      IF (J.EQ.(IS+1)) GO TO 128
      IF (J.GT.1) XR(J-1)=0.
      IF (J.GT.1) XE(J-1)=0.
127 IF (Z(J).LT.0.10) GO TO 129
      CALL LILIK(N,ID,KEE,XR,XE,T,K,GAR,GAE,ERL)
      IF(ERL.GT.1) GO TO 900
      KEE=3
      IF (K(J).GE.KP) GO TO 129
      KP=K(J)
      IP=J
      GO TO 129

```

```

128 IF (J.GT.2) XR(J-2)=0.
    IF (J.GT.2) XE(J-2)=0.
    GO TO 127
129 CONTINUE
    IE=IR
    IF (IR.NE.IS) IE=IS
    IF (IR.NE.IS) IR=IF
C
C  INICIALIZACAO DAS R E E COMPOSICOES DAS FASES
C
130 DO 131 I=1,N
    XR(I)=0.
131 XE(I)=0.
    XR(IR)=0.98
    XE(IR)=0.02
    XR(IE)=0.02
    XE(IE)=0.98
C
C  ESTIMATIVA INICIAL PARA O VALOR DE K
C
135 CALL LILIK (R,ID,KEE,XR,XE,T,K,GAR,GAE,ERL)
    IF (ERL.GT.1) GO TO 900
    SZ=0.
136 DO 137 I=1,N
    SZ=SZ + Z(I)
137 K1(I)=K(I)-1.
    IF (ABS(SZ-1.).GT.0.01) GO TO 900
C
C  ESTIMATIVA INICIAL PARA A
C
    A=Z(IE)/(Z(IE) + Z(IR))
    A=-A/K1(IR) + (A-1.)/K1(IE)
    IF (A.LT.0.) A=0.
    IF (A.GT.1.) A=1.
    AO=A
    IT=0
    KAD=0
C
C  CONDUCAO DO PROCESSO ITERATIVO SOBRE A COMPOSICAO DAS FASES
C
200 IT=IT + 1
    IF (IT.GT.50) GO TO 900
    AA=AO
    AD=A

```

```

PROCESSO DE NEWTON-RAPSON PARA O CALCULO DE A, PARA UM VALOR DE K FIC
300 DO 319 N=1,10
    IR=0.
    DF=0.
301 DO 305 I=1,N
    KR=A*K1(I) + 1.
    F=Z(I)*K1(I)/KE
305 DF=DF + C(I)*(K1(I)/KE)**2
    IF (ABS(F).LT.1.E-05) GO TO 210
    DA=F/DF
310 AN=A-DA
    IF (AN.LT.-1./K1(IR)) GO TO 312
    AN=A + (1./K1(IR) + A)/2.
    GO TO 319
312 IF (AN.GT.1./K1(IE)) GO TO 319
    AN=A + (1./K1(IE) + A)/2.
319 A=AN
    GO TO 900
210 A=AN
    SR=0.
    SE=0.
NOVAS CONFIGURACOES DAS FASE R E E
311 DO 215 I=1,N
    XR(I)=Z(I)/(A*K1(I) + 1.)
    XE(I)=K(I)*XR(I)
    SR=SR + XR(I)
215 SE=SE + XE(I)
220 DO 225 I=1,N
    XR(I)=XR(I)/SR
225 XE(I)=XE(I)/SE
SE O NUMERO DE ITERACOES ULTRAPASSAR 3, A SUB-ROUTINA UTILIZA O METODO
DE WEGSTEIN BASEADO NA SOMA DOS DESVIOS DA FUGACIDADE DOS COMPONENTES.
PARA A ACELERAÇÃO DA CONVERGÊNCIA
230 IF (II.LT.3) GO TO 250
    IF (II.LE.5.AND.(6.LT.0..OR.A.GT.1.)) GO TO 250

```

```

      F (KAC.EE.1) GO TO 239
      IF (SS.GT.1E) GO TO 239
      IF (SS.GT.0.2) GO TO 239
      KAC=1
      WG=SS/(SL-OS)
      WK=1.4*WG
      SR=0.
      SE=0.
      DO 235 I=1,N
      XR(I)=WK*XR(I)-WG*XA(I)
C
C   FRACOES MOLARES NEGATIVAS NAO SAO PERMITIDAS
C
      IF (XR(I).LT.0.) XR(I)=0.
      XE(I)=WK*XE(I)-WG*EX(I)
      IF (XE(I).LT.0.) XE(I)=0.
      SR=SR + XR(I)
      SE=SE + XE(I)
C
C   NORMALIZACAO ACELERADA DAS COMPOSICOES ( PARA PERMITIR QUE XR(I) E
C   XE(I) SEJAM IGUAIS A ZERO.
C
      DO 237 I=1,N
      XR(I)=XR(I)/SR
      XE(I)=XE(I)/SE
      GO TO 236
      239 KAC=0
C
C   ENTRADA DOS NOVOS VALORES DE K E GAMMA
C
      250 CALL LILIK(N,ID,3,XR,XE,T,K,GAR,GAE,ERL)
      IF (ERL.GT.1) GO TO 900
      ESS=1.E-03
      IF (IT.LE.5) GO TO 252
C
C   VERIFICACAO DA PROXIMIDADE AO FLAIT POINT
C
      PFI=K(IR)/K(IE) + K(IE)/K(IR)
      IF (PFI.GT.10..OR.SS.GT.0.05) GO TO 231
C
C   SAIDA DEVIDO A PROXIMIDADE AO FLAIT POINT
C
      IF (IT.GE.20) GO TO 290
      IF (PFI.GT.7.) GO TO 231

```

```

C
C VERIFICACAO SE A ALIMENTACAO ESTA PROXIMA AO PLAIT POINT OU NA REGIAO
C DOA UNICA FASE
C
      DE=AD
      IF (DE.GT.0.5) DE=AD-1.
      DI=(AG-A)/DE
      IF (DI.LT.0.1) GO TO 290
251 IF (PFI.LT.20) ESS=2.E-04
252 SL=SS
      SS=0.
253 DO 255 I=1,N
      K1(I)=K(I) - 1.
C
C CALCULO DA FUNCAO OBJETIVO
C
255 SS=SS + ABS(GAE(I)*XE(I) - GAR(I)*XR(I))
C
C VERIFICACAO DA CONVERGENCIA
C
      IF (SS.LE.ESS) GO TO 190
      IF (A.GE.0..AND.A.LE.1.) GO TO 260
      IF (IT.LT.0.OR.SS.GT.0.20) GO TO 260
      IF (IT.LT.5.AND.SS.GT.0.05) GO TO 260
C
C VERIFICACAO SE OUVI MUDANCA ENTRA AS REGIOES 0 - 1
C
      IF ((ABS(A)-ABS(AD)).GT.0.) GO TO 195
C
C ARMAZENAGEM DA ULTIMA COMPOSICAO DAS FASES UTILIZADAS NA ACELERACAO
C
260 DO 265 I=1,N
      RX(I)=XR(I)
265 EX(I)=XE(I)
      GO TO 200
C
C ALIMENTACAO PROXIMA AO PLAIT POINT -- VERIFICACAO DA REGIAO
C
290 IF (A.GE.0..AND.A.LE.1.) GO TO 905
      GO TO 195
C
C VERIFICACAO SE ESTA OCORRENDO DIVERGENCIA NA ACELERACAO ITERATIVA
C
190 IF (KAC.EQ.1) GO TO 260
C
C SOLUCAO CONVERGENTE -- VERIFICACAO DA REGIAO

```

```

C     CALL CHARGE (N,II,T,TAU,IER)
C
C     GO TO 100
C
C     100 WRITE (N,11)
C       11 FORMAT ('//','//',1X,'ALIMENTACAO PARA DA REGIAO DA DUAS PAGOS ',1X,'//',1X,'//')
C       DO 150 I=1,NR
C         XR(I)=Z(I)
C 150  XE(I)=Z(I)
C       IF (A.LT.1.) A=0.
C       IF (A.GT.1.) A=1.
C       ERR=ERR+1
C       RETURN
C
C     200 FALHA NA CONVERGENCIA -- A = 1 E ERR = 2
C
C     200 ERR=2
C       WRITE (N,12)
C       12 FORMAT ('//','//',1X,'FALHA NA CONVERGENCIA ',1X,'//','//')
C       GO TO 910
C
C     300 PARA ENTRADA DE DADOS IRREGULARES A = -1 E ERR = 3
C
C     300 WRITE (N,13)
C       13 FORMAT ('//','//',1X,'ENTRADA DE DADOS IRREGULARES ',1X,'//','//')
C       ERR=3
C       GO TO 910
C
C     400 ALIMENTACAO PROXIMA AO FLAIT POINT -- A = -1 E ERR = 2
C
C     400 WRITE (N,14)
C       14 FORMAT ('//','//',1X,'ALIMENTACAO PROXIMA AO FLAIT POINT ',1X,'//','//')
C       ERR=2
C 910  DO 915 I=1,NR
C       XR(I)=Z(I)
C 915  XE(I)=Z(I)
C       A=-1.
C       RETURN
C     END
C
C     SUBROUTINE TAUS(N,II,T,TAU,IER)
C
C     TAUS CALCULA O COEFICIENTE DE ITERACAO TAU DEPENDENTE DA TEMPERATURA
C     PARA O USO NA SUB-ROUTINA GAMMA. SE O SISTEMA DE DADOS ESTIVER PERDID

```

```

C      O VALOR DE TAU CORRESPONDENTE SERA 1 E IER RETORNARA COMO +/- 1.
C      QUANDO NAO-CONDENSAVEIS ESTAO PRESENTES IER = -2 , -1 OU 0
C
C      REAL TAU(3,3)
C      INTEGER ID(3)
C      COMMON/BINARY/ETA(3),U(3,3)
100 IER=0
110 DO 117 J=1,N
    II=ID(J)
C
C      VERIFICACAO SE ALGUM COMPONENTE E NAO-CONDENSAVEL E DO VALOR DE IER
C
    IF (U(II,II).GT.1.E+19) IER=(-1)*(IER*2 + 2)
    DO 117 J=1,N
    IF (J.EQ.1) GO TO 110
    JJ=ID(J)
C
C      VERIFICACAO SE O BINARIO SAO ANOS NAO-CONDENSAVEIS
C
    IF (U(II,II).GT.1.E+19.AND.U(JJ,JJ).GT.1.E+19) GO TO 110
C
C      VERIFICACAO SE HA DADOS BINARIOS PERDIDOS
C
    IF (ABS(U(II,JJ)).LT.1.E-19) GO TO 112
C
C      VERIFICACAO SE ALGUM COMPONENTE NO PAR BINARIO E NAO CONDENSAVEL
C
    IF ((U(II,II)+U(JJ,JJ)).GT.1.E+19) GO TO 110
C
C      CALCULO DO TERMO DE ITERACAO
C
    TAU(I,J)=EXP(-U(II,JJ)/T)
    GO TO 119
112 IF (IER.GE.0) IER=1
    IF (IER.LT.0) IER=-1
C
C      TERMO DE ITERACAO IGUAL A UNIDADE PARA O PAR COM OS DADOS PERDIDOS
C
113 TAU(I,J)=1.
117 CONTINUE
    RETURN
    END
C
C      SUBROUTINE CONDENS(W,ID,KEL,X,T,CAN,IER)

```



```

C
      IF (U(II,II).GT.1.E+19) GO TO 125
      SS=SS + X(I)
      SL=SL + X(I)*RL(I)
123 CONTINUE
126 DO 129 I=1,N
      II=ID(I)
      TH(I)=TH(I)/ST
      TP(I)=TP(I)/STP
      IF (U(II,II).GT.1.E+19) GO TO 128
C
C   CALCULO DA CONTRIBUICAO COMBINATORIAL PARA A ENERGIA LIVRE
C
127 GCL(I)=RL(I)-RU(II)*SL/SP + ALOG(RU(II)*SS/SP) + Z*QU(II)*
      G   ALOG(QU(II)*SP/(RU(II)*ST))/2.
      GO TO 129
128 GCL(I)=0.
129 CONTINUE
      IF (KEY.EQ.3) GO TO 140
C
C   OBTENCAO DOS PARAMETROS DE ITERACAO BINARIA UNIGUAC
C
130 CALL TAUS(N,ID,T,TAU,IER)
C
C   CALCULO DA CONTRIBUICAO RESIDUAL PARA A ENERGIA LIVRE
C
140 DO 141 I=1,N
141 FTS(I)=0.
142 DO 149 I=1,N
      FT(I)=1.E-30
      DO 143 J=1,N
143 FT(I)=FT(I) + TP(J)*TAU(J,I)
      DO 145 J=1,N
145 FTS(J)=FTS(J) + TP(I)*TAU(J,I)/FT(I)
149 CONTINUE
150 DO 159 I=1,N
      II=ID(I)
      IF (U(II,II).GT.1.E+19) GO TO 155
C
C   ENERGIA LIVRE RESIDUAL PARA COMPONENTES CONDENSAVEIS
C
      GRL=GF(II)*(1. - ALOG(FT(1)) - FTS(1))
      GO TO 158
155 GRL=0.
      DO 156 J=1,N

```

```

      JJ=ID(J)
C
C  ENERGIA LIVRE RESIDUAL PARA COMPONENTES NAO-CONDENSAVEIS
C
106 GRL=GRL + TH(J)*(U(II,JJ) + U(JJ,II)/T)
C
C  CALCULO DO COEFICIENTE DE ATIVIDADE
C
156 GAM(I)=EXP(GCL(I) + GRL)
157 CONTINUE
      IF (ABS(IER).EQ.1) ERG=1
      RETURN
      END
C
C  SUBROUTINE LILIK(N,ID,KEY,XR,XE,T,K,GAR,GAE,ERR)
C
C  LILIK CALCULA A TAXA DE EQUILIBRIO Ki EFETIVO PARA AS DUAS FASES PARA
C  OS COMPONENTES ( N.LE.3 )OS QUAIS APARECEM INDICADOS NO VETOR ID, DADA
C  TEMPERATURA T(K) E AS ESTIMATIVAS DA COMPOSICAO DE FASES XR E XE ( SE
C  CORRECAO PARA AVALIAR OS COEFICIENTES DE ATIVIDADE GAR E GAE ). LILIK
C  NORMALMENTE RETORNA ERR = 0, MAS SE DADOS DE COMBINACOES DE COMPONENTES
C  ESTAO PERDIDOS ELA RETORNA ERR = 1, E SE A E K ESTAO FORA DE FAIXA,
C  ENTAO ERR = 2.
C
      REAL XR(N),XE(N),K(N),GAR(N),GAE(N),X(3),Y(3),GX(3),GY(3)
      INTEGER ID(N),IDF(3),ERR,ERG
100 ERR=0
C
C  CONVERSÃO DOS VETORES DE COMPOSICAO PARA A DIMENSÃO 3 PARA ELEVAR DE
C  A SUB-ROUTINA
C
101 DO 102 I=1,N
      X(I)=XR(I)
      Y(I)=XE(I)
102 IDF(I)=ID(I)
C
C  OBTENÇÃO DOS COEFICIENTES DE ATIVIDADE DAS FASES R E E
C
      CALL GAMMA(N,IDF,KEY,X,T,GX,ERG)
      CALL GAMMA(N,IDF,3,Y,T,GY,ERG)
C
C  CONVERSÃO DO VETOR DOS COEFICIENTES DE ATIVIDADE PARA A DIMENSÃO N
C
110 DO 119 I=1,N
      GAR(I)=GX(I)

```

```

      GAE(I)=GY(I)
      K(I)=GAB(I)/GAE(I)
      IF (K(I).LE.0..OR.K(I).GT.1.E+19) GO TO 700
119  CONTINUE
      ERR=ERG
      RETURN

```

```

C
C  PARA VALORES DE A E K FORA DE FAIXA  ERR = 2
C

```

```

700  ERR=2
      DO 700 I=1,N
700  K(I)=0.
      RETURN
      END

```

Listagem do arquivo INPUT.DAT

e

Listagem do arquivo OUTPUT.DAT

(um exemplo)

01WATER 544.37 221.20 .2380 0.6100 1.00 0.92 1.40 1.00
 01+5.70420E+01-7.00480E+03+3.56880E-03-6.56890E+00-6.50040E-07
 01+2.55730E+01+8.97860E+02+1.37050E-02+1.56250E-01
 02BUTANOL 562.93 44.13 .2390 3.2250 1.66 3.45 3.05 0.88
 02+2.16050E+01-8.03990E+03-2.86190E-02+1.46770E+00+8.95690E-00
 02+6.92270E+03-2.55470E+05+1.50160E+00-1.12600E+03
 03ACETICAC 594.88 57.85 .2240 2.5950 1.74 2.23 2.04 2.04
 03+3.86980E+02-1.50910E+04+1.67740E-01-6.76420E+01-7.27380E-05
 03-6.76200E+02+1.76910E+04-5.78110E-02+1.22970E+02

1.70 0.00 0.00
 1.55 2.20 0.00
 2.50 2.50 4.50

01 02+1.097590E+03+3.869000E+01
 01 03-2.999000E+02+5.307400E+02
 02 03-2.963000E+02+5.464800E+02

03 294.15 01 02 03
 02 01 0.8950 0.1000 0.0050

LIQUID/LIQUID EQUILIBRIUM FOR 3 COMPONENTS SYSTEM AT T= 294.15 K

INDEX	COMPONENT	FEED	R PHASE	E PHASE	K
1	WATER	.8950	.5096	.9831	.19286E+01
2	BUTANOL	.1000	.4806	.0130	.27017E-01
3	ACETICAC	.0050	.0098	.0039	.39718E+00

* E/F = .81390E+00 INTERACTIONS = 6

ANEXO (A - VI)

LISTAGEM DO PROGRAMA ADTRANSF

Neste anexo são apresentadas: a listagem completa do programa ADTRANSF, elaborado em linguagem FORTRAN 77, o arquivo de entrada de dados TRANSF1 e o arquivo de saída do programa (resultados obtidos pelo programa) denominado TRANSF2.

Listagem completa do Programa

ADTRANSF

PROGRAM ADTRANSF

PROGRAMA PARA ANALISE DIMENSIONAL DE EXTRATOR F.R.D.C.

CAPIVINAS, NOVENO DE 1970

Programa para a analise dimensional por regressao linear multivariada, para a caracterizacao numerica das condicoes de transferencia de soluto, (B $\rightarrow$ C), em um extrator contínuo contracorrente do tipo F.R.D.C.

PROGRAMA REELABORADO POR: Leoniq Antonio Perazolla

```
implicit real*8(a-h,o-z)
real l,dp,gr,ox,mi,cd,cr,cre,lan,nd,al,xn,qr,qd
dimension p1(10),b(10),a(10,11),c(10,11)
open (unit = 6,file = 'transf2.dat', status = 'new')
open (unit = 9,file = 'transf1.dat', status = 'old')
write (*,*)
write (*,10)
10 format (3x,'ANALISE DIMENSIONAL PARA VELOCIDADE CARACTERISTICA',
1 //,3x,'Entre com numero de Grupos Adimensionais ( 2 a 6 ) ',
2 //,3x,'m = ? ')
read (*,20)m
20 format (1E)
do 30 i = 1,m
p1(i) = 0
b(i) = 0
do 30 j = 1,m
a(i,j) = 0
30 continue
read (9,*) n,l,dp,ro,xmi,g
hkont = 0
do 40 kont = 1,n
read (9,*) cu,cr,cre,lan,nd,al,xn,qr,qd
40 call adim (p1,lan,al,dp,ro,xmi,g,cd,cr,cre,nd,al,xn,qr,qd)
hkont = hkont + 1
do 50 i = 2,m
a(i,i) = a(i,i) + dlog10(p1(i))
a(i,i) = a(i,i)
b(i) = b(i) + dlog10(p1(i))*dlog10(p1(i))
do 50 j = 2,m
a(i,j) = a(i,j) + dlog10(p1(i))*dlog10(p1(j))
50 continue
```

```

        b(i) = b(i) + dlog10(p1(1))
60      continue
70      a(i,1) = hkont
        do 80 i = 1,m
80          a(i,m+1) = b(i)
        do 90 i = 1,m
        do 90 j = 1,m + 1
90          c(i,j) = a(i,j)
            call gauss(m,1,i,c)
            do 110 i = 1,m
            s = 0.0
            do 100 i = 1,m
100              s = s + c(i,i)*a(j,m + 1)
                dif = s - c(i,m + 1)
                write (*,105)
105              format ( /,'COEFICIENTES RESULTANTES',// )
                write (*,107) i,c(i,m + 1),dif
107              format ( /,'C(',i3,')= ',f20.10,5x,'dif = ',f20.10,// )
110              continue
                do 120 i = 1,m
120                  b(i) = a(i,m + 1)
                    write (*,130) b(i)
130                  format (2x,/,1x,'teste = ',e12.5,/)
                    b(i) = 10.*ap(i)
                    write (*,140)
                    write (*,*)
140                  format (///,3x,'COEFICIENTES RESULTANTES DA EQUACAO',//)
                    write (*,150) b(i)
150                  format(1x,'x( i ) = ',f20.10,/)
                    write (*,160) (i,b(i),i = 2,m)
160                  format (1x,'x(',i2,') = ',f20.10,/)
                    write (*,170)
170                  format (///,3x,'Comparando Teoria e Experimento',///)
                    close (unit = 9)
                    open (unit = 10,file = 'transf1.dat', status = 'old')
                    read (10,*) nsl,dp,ro,xmi,g
                    hkont = 0
                    erro = 0
                    ermax = 0.0
                    do 200 i = 1,n
                    read (10,*) cd,cr,cre,lam,nd,al,xn,qv,qd
180                    call adim (p1,lam,1,dp,ro,xmi,g,cd,cr,cre,nd,al,xn,qv,qd)
                        hkont = hkont + 1
                        pior = xteor(m,p1,g)
                        pior = pior

```

```

delta = 100.0*(lam - pteor)/lam
errmax = dmax1(ermmax,dabs(delta))
erro = erro + dabs(delta)
write (6,190) 1,pteor,lam,delta
190 format (0x.13.1x,'Lam(CALC) = ',010.3,3x,'Lam(EXP) = ',
1 10.3,3x,'er = ',07.2,' %')
200 continue
erro = erro/nkcol
write (6,210) erro,errmax
210 format (//,1x,'erro medio = ',07.2,1x,' %',2x,'erro maximo = ',
1 07.0,' %')
close unit = 6)
stop
end

c
c Subrotina para os numeros adimensionais
c
subroutine adim (pi,lam,i,op,ro,xm1,q,cd,cr,cre,nd,al,xn,qr,qd)
implicit real*8(a-h,o-z)
real i,op,q,ro,xm1,cd,cr,cre,lam,nd,al,xn,qr,qd
dimension pi(10)
pi(1) = (cd - cr)/(cd - cre)
pi(2) = (op**2*xm1*ro)/xm1
pi(3) = nd*x1/(nd+1)
pi(4) = q/qd
pi(5) = al
pi(6) = xm1**2/(q*ro**2*pi**3)
return
end

c
c Calculo de Lam pela equacao adimensional obtida
c
function xteor(m,pi,b)
implicit real*8(a-h,o-z)
dimension pi(10),b(10)
s = 1.
do 10 j = 1,m
s = s*pi(1)*b(1)
10 continue
xteor = s*b(1)
return
end

c
c SUBROTINA CAUSE RESOLVE SISTEMA DE EQUACOES ALGEBRICAS
c LINEARES PELO METODO DE ELIMINACAO DE GAUSS COM PIVOTA-
c TAO DE LINHA. PARA RESOLVER O PROBLEMA QX=U ONDE Q E UMA
c MATRIZ (N X L) E L (N X NS), O PROGRAMA USA UMA MATRIZ
c A QUE E FORMADA POR Q NAS SUAS PRIMEIRAS N COLUNAS E POR
c U NAS SEQUENTES NS COLUNAS. A SOLUCAO DO SISTEMA RETORNA
c NA FIDELIDADE DE 1 NA MATRIZ A.
c ENTRAR COM O VALOR IT DO QUE E O NUMERO DE LINHAS DA MA-

```

```

C      TRIZ A (M) E NCOL O NUMERO DE COLUNAS DA MATRIZ A  QUE
C      E = A * P * N.
C
C      SUBROUTINE GAUSS(M,NB,NCOL,A)
C
C      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C      DIMENSION A(10,11)
C      NI = M + 1
C      NT = M + NB
C      IF (M.EQ.1) GO TO 30
C      DO 40 I = 2,N
C      IF = I - 1
C      II = IF
C      X = dabs(A(II,II))
C      DO 10 J = I,N
C      IF (dabs(A(J,II)).LT.X) GO TO 10
C      X = dabs(A(J,II))
C      IF = J
C10    CONTINUE
C      IF (IF.EQ.11) GO TO 30
C      DO 20 J = II,NT
C      X = A(II,J)
C      A(II,J) = A(IF,J)
C20    A(IF,J) = X
C30    DO 40 J = I,N
C      X = A(J,IF) / A(II,II)
C      DO 40 K = I,NT
C40    A(J,K) = A(J,K) - X * A(II,K)
C50    DO 70 IF = I,N
C      I = NI - IF
C      DO 70 K = NI,NT
C      A(I,K) = A(I,K) / A(I,I)
C      IF (I.EQ.1) GO TO 70
C      II = I - 1
C      DO 60 J = 1, II
C60    A(J,K) = A(J,K) - A(I,K) * A(J,I)
C70    CONTINUE
C      RETURN
C      END

```

Listagem do arquivo de entrada para o
programa ADTRANSF, denominado

TRANSF1

0.0 40.0 5.4 1.0 0.001 901.0
 0.2817 0.1410 0.1336 0.950 7.0 0.4 1.333 5.428 5.734
 0.2817 0.1298 0.1205 0.942 7.0 0.4 1.333 5.400 5.734
 0.2817 0.1674 0.1824 0.950 7.0 0.4 1.333 6.653 6.843
 0.2817 0.1409 0.1536 0.951 7.0 0.4 2.000 5.474 5.734
 0.2817 0.1296 0.1205 0.944 7.0 0.4 2.000 5.547 5.734
 0.2817 0.1863 0.1824 0.961 7.0 0.4 2.000 6.733 6.843
 0.2817 0.1391 0.1336 0.963 7.0 0.4 2.833 5.657 5.734
 0.2817 0.1870 0.1824 0.954 7.0 0.4 2.833 6.971 6.843
 0.2817 0.1390 0.1336 0.829 7.0 0.2 1.333 5.429 5.734
 0.2817 0.1454 0.1205 0.846 7.0 0.2 1.333 5.486 5.734
 0.2817 0.2014 0.1824 0.809 7.0 0.2 1.333 6.767 6.843
 0.2817 0.1537 0.1336 0.864 7.0 0.2 2.000 5.371 5.734
 0.2817 0.1462 0.1205 0.840 7.0 0.2 2.000 5.672 5.734
 0.2817 0.1999 0.1824 0.824 7.0 0.2 2.000 6.571 6.843
 0.2311 0.1261 0.1111 0.858 7.0 0.2 1.333 5.600 5.734
 0.2311 0.1097 0.0981 0.913 7.0 0.2 1.333 5.571 5.734
 0.2311 0.1513 0.1466 0.931 7.0 0.2 1.333 6.553 6.843
 0.2311 0.1230 0.1111 0.901 7.0 0.2 2.000 5.486 5.734
 0.2311 0.1084 0.0981 0.923 7.0 0.2 2.000 5.271 5.734
 0.2311 0.1528 0.1466 0.949 7.0 0.2 2.000 6.318 6.843
 0.2311 0.1268 0.1111 0.869 7.0 0.2 2.833 5.413 5.734
 0.2311 0.1528 0.1466 0.949 7.0 0.2 2.833 6.514 6.843
 0.2311 0.1268 0.1111 0.869 7.0 0.2 1.333 5.286 5.734
 0.2311 0.1087 0.0981 0.920 7.0 0.2 1.333 5.318 5.734
 0.2311 0.1601 0.1466 0.861 7.0 0.2 1.333 6.353 6.843
 0.2311 0.1230 0.1111 0.901 7.0 0.2 2.000 5.333 5.734
 0.2311 0.1074 0.0981 0.930 7.0 0.2 2.000 5.174 5.734
 0.2311 0.1580 0.1466 0.880 7.0 0.2 2.000 6.571 6.843
 0.2293 0.1305 0.1074 0.811 5.0 0.2 1.333 5.750 5.734
 0.2293 0.1268 0.0962 0.770 5.0 0.2 1.333 5.474 5.734
 0.2293 0.1566 0.1486 0.901 5.0 0.2 1.333 6.703 6.843
 0.2293 0.1268 0.1074 0.841 5.0 0.2 2.000 5.722 5.734
 0.2293 0.1156 0.0962 0.854 5.0 0.2 2.000 5.463 5.734
 0.2293 0.1715 0.1486 0.716 5.0 0.2 2.000 6.971 6.843
 0.2293 0.1118 0.1074 0.964 5.0 0.2 2.833 5.662 5.734
 0.2293 0.1081 0.0962 0.911 5.0 0.2 2.833 5.312 5.734
 0.2293 0.1566 0.1466 0.901 5.0 0.2 2.833 6.216 6.843
 0.2293 0.1268 0.1074 0.841 5.0 0.2 1.333 5.650 5.734
 0.2293 0.1118 0.0962 0.888 5.0 0.2 1.333 5.611 5.734
 0.2293 0.1752 0.1466 0.670 5.0 0.2 1.333 6.800 6.843
 0.2293 0.1286 0.1074 0.826 5.0 0.2 2.000 5.163 5.734
 0.2293 0.1081 0.0962 0.911 5.0 0.2 2.000 5.563 5.734
 0.2293 0.1673 0.1486 0.768 5.0 0.2 2.000 6.351 6.843
 0.2293 0.1305 0.1074 0.811 5.0 0.2 2.833 5.311 5.734

0.2293	0.1044	0.0962	0.938	5.0	0.2	2.833	5.446	5.734
0.2293	0.1066	0.1466	0.901	5.0	0.2	2.833	6.378	6.843
0.2200	0.1118	0.1037	0.939	5.0	0.2	1.333	5.282	5.374
0.2200	0.1007	0.0869	0.396	5.0	0.2	1.333	4.143	5.734
0.2200	0.1603	0.1392	0.737	5.0	0.2	1.333	6.278	6.843
0.2293	0.1179	0.1074	0.914	5.0	0.2	2.000	5.300	5.734
0.2293	0.1094	0.0962	0.390	5.0	0.2	2.000	5.614	5.734
0.2293	0.1617	0.1486	0.838	5.0	0.2	2.000	6.803	6.843
0.2293	0.1672	0.1074	0.785	5.0	0.2	2.033	5.650	5.734
0.2293	0.1525	0.1486	0.951	5.0	0.2	2.033	6.895	6.843
0.2293	0.1158	0.1074	0.951	5.0	0.4	1.333	5.265	5.734
0.2293	0.1130	0.0962	0.874	5.0	0.4	1.333	4.900	5.734
0.2293	0.1517	0.1486	0.948	5.0	0.4	1.333	7.200	6.843
0.2293	0.1120	0.1074	0.788	5.0	0.4	2.000	5.480	5.734
0.2293	0.1094	0.0966	0.761	5.0	0.4	2.000	5.133	5.734
0.2293	0.1528	0.1486	0.948	5.0	0.4	2.000	6.500	6.843
0.2293	0.1081	0.1074	0.974	5.0	0.4	2.833	4.720	5.734
0.2293	0.1039	0.0962	0.727	5.0	0.4	2.833	3.926	5.734
0.2293	0.1517	0.1486	0.952	5.0	0.4	2.833	5.217	6.843

Listagem do arquivo de saída do programa
ADTRANSF (resultados obtidos), arquivo denominado

TRANSF2.DAT

COEFICIENTES RESULTANTES DA EQUACAO

$x(1) = .6577081468$
 $x(2) = .0831462770$
 $x(3) = .6885101233$
 $x(4) = -.0664881661$
 $x(5) = .1066827808$
 $x(6) = .0107803496$

Comparando Teoria e Experimento

1	Lam(CALC) =	.932	Lam(EXP) =	.950	er =	1.92 %
2	Lam(CALC) =	.932	Lam(EXP) =	.942	er =	1.05 %
3	Lam(CALC) =	.930	Lam(EXP) =	.950	er =	2.09 %
4	Lam(CALC) =	.963	Lam(EXP) =	.951	er =	-1.28 %
5	Lam(CALC) =	.962	Lam(EXP) =	.944	er =	-1.94 %
6	Lam(CALC) =	.961	Lam(EXP) =	.961	er =	-.03 %
7	Lam(CALC) =	.989	Lam(EXP) =	.963	er =	-2.73 %
8	Lam(CALC) =	.987	Lam(EXP) =	.954	er =	-3.48 %
9	Lam(CALC) =	.864	Lam(EXP) =	.829	er =	-4.24 %
10	Lam(CALC) =	.864	Lam(EXP) =	.846	er =	-2.07 %
11	Lam(CALC) =	.862	Lam(EXP) =	.809	er =	-6.51 %
12	Lam(CALC) =	.894	Lam(EXP) =	.864	er =	-3.32 %
13	Lam(CALC) =	.891	Lam(EXP) =	.840	er =	-6.10 %
14	Lam(CALC) =	.893	Lam(EXP) =	.824	er =	-8.37 %
15	Lam(CALC) =	.862	Lam(EXP) =	.858	er =	-.51 %
16	Lam(CALC) =	.863	Lam(EXP) =	.913	er =	5.51 %
17	Lam(CALC) =	.863	Lam(EXP) =	.931	er =	7.25 %
18	Lam(CALC) =	.893	Lam(EXP) =	.901	er =	.87 %
19	Lam(CALC) =	.896	Lam(EXP) =	.920	er =	2.97 %

20	Lam(CALC)	=	.895	Lam(EXP)	=	.949	er	=	5.66	%
21	Lam(CALC)	=	.920	Lam(EXP)	=	.869	er	=	-5.90	%
22	Lam(CALC)	=	.920	Lam(EXP)	=	.949	er	=	5.66	%
23	Lam(CALC)	=	.866	Lam(EXP)	=	.869	er	=	.38	%
24	Lam(CALC)	=	.865	Lam(EXP)	=	.920	er	=	5.94	%
25	Lam(CALC)	=	.865	Lam(EXP)	=	.861	er	=	-.50	%
26	Lam(CALC)	=	.895	Lam(EXP)	=	.901	er	=	.66	%
27	Lam(CALC)	=	.897	Lam(EXP)	=	.930	er	=	3.38	%
28	Lam(CALC)	=	.895	Lam(EXP)	=	.860	er	=	-1.47	%
29	Lam(CALC)	=	.832	Lam(EXP)	=	.811	er	=	-2.54	%
30	Lam(CALC)	=	.835	Lam(EXP)	=	.770	er	=	-8.46	%
31	Lam(CALC)	=	.834	Lam(EXP)	=	.901	er	=	7.47	%
32	Lam(CALC)	=	.861	Lam(EXP)	=	.841	er	=	-2.41	%
33	Lam(CALC)	=	.864	Lam(EXP)	=	.854	er	=	-1.16	%
34	Lam(CALC)	=	.860	Lam(EXP)	=	.716	er	=	-20.12	%
35	Lam(CALC)	=	.837	Lam(EXP)	=	.964	er	=	7.97	%
36	Lam(CALC)	=	.791	Lam(EXP)	=	.911	er	=	2.20	%
37	Lam(CALC)	=	.892	Lam(EXP)	=	.901	er	=	.99	%
38	Lam(CALC)	=	.833	Lam(EXP)	=	.841	er	=	.90	%
39	Lam(CALC)	=	.834	Lam(EXP)	=	.888	er	=	6.11	%
40	Lam(CALC)	=	.830	Lam(EXP)	=	.670	er	=	-24.32	%
41	Lam(CALC)	=	.867	Lam(EXP)	=	.826	er	=	-4.96	%
42	Lam(CALC)	=	.863	Lam(EXP)	=	.911	er	=	5.28	%
43	Lam(CALC)	=	.865	Lam(EXP)	=	.730	er	=	-12.69	%
44	Lam(CALC)	=	.889	Lam(EXP)	=	.811	er	=	-9.59	%
45	Lam(CALC)	=	.889	Lam(EXP)	=	.936	er	=	5.17	%
46	Lam(CALC)	=	.891	Lam(EXP)	=	.901	er	=	1.16	%
47	Lam(CALC)	=	.834	Lam(EXP)	=	.930	er	=	10.37	%
48	Lam(CALC)	=	.851	Lam(EXP)	=	.896	er	=	5.05	%
49	Lam(CALC)	=	.837	Lam(EXP)	=	.739	er	=	-13.31	%
50	Lam(CALC)	=	.866	Lam(EXP)	=	.914	er	=	5.29	%
51	Lam(CALC)	=	.862	Lam(EXP)	=	.890	er	=	3.11	%
52	Lam(CALC)	=	.861	Lam(EXP)	=	.838	er	=	-2.80	%
53	Lam(CALC)	=	.887	Lam(EXP)	=	.985	er	=	9.92	%
54	Lam(CALC)	=	.886	Lam(EXP)	=	.951	er	=	6.84	%
55	Lam(CALC)	=	.903	Lam(EXP)	=	.931	er	=	3.63	%
56	Lam(CALC)	=	.907	Lam(EXP)	=	.874	er	=	-3.79	%
57	Lam(CALC)	=	.896	Lam(EXP)	=	.968	er	=	7.43	%
58	Lam(CALC)	=	.932	Lam(EXP)	=	.962	er	=	3.14	%
59	Lam(CALC)	=	.935	Lam(EXP)	=	.961	er	=	2.67	%
60	Lam(CALC)	=	.932	Lam(EXP)	=	.948	er	=	1.72	%
61	Lam(CALC)	=	.968	Lam(EXP)	=	.994	er	=	2.59	%
62	Lam(CALC)	=	.980	Lam(EXP)	=	.927	er	=	-5.74	%
63	Lam(CALC)	=	.973	Lam(EXP)	=	.962	er	=	-1.16	%

erro medio = 4.78 % erro máximo = 24.32 %

NOMENCLATURA UTILIZADA

A	= Superfície interfacial (cm^2).
a	= Área interfacial (cm^2).
a	= Área interfacial efetiva no contato entre as fases (cm^2/cm^3).
Ad	= Área superficial da fase dispersa (cm^2).
Al	= Área livre de escoamento (adimensional).
α_{12}	= Parâmetro UNIQUAC de interação binário.
C	= Concentração (moles/litro).
Cd	= Coeficiente de arraste (adimensional).
D	= Coeficiente de dispersão (cm^2/s).
$\mathcal{D}$	= Difusividade do soluto (cm^2/s).
$\mathcal{D}_A$	= Coeficiente de difusão (cm^2/s).
dc	= Diâmetro interno da coluna.
di	= Diâmetro interno da coroa (cm).
dg	= Diâmetro da gota (cm).
dp	= Diâmetro do disco rotativo (cm).
dp_s	= Diâmetro médio de Sauter das gotas ascendentes da fase dispersa (cm).
E	= Quantidade de extrato (moles).
E	= Coeficiente de dispersão axial (cm^2/s).
F	= Quantidade de alimentação (moles).
f	= Fugacidade (atm).
Fa	= Força de arraste (Dina).
FC	= Fator de correção (adimensional).

F_e = Força devido ao empuxo (Dina).
 F_g = Força devido a ação da gravidade (Dina).
 Fr = Número de Froude (adimensional).
 g = Aceleração da gravidade (cm/s^2).
 h = Altura do compartimento de transferência de massa (cm).
 I_e = Índice de eficiência (cm^2/s).
 $[HTU]$ = Comprimento da unidade de transferência de massa (cm).
 K = Coeficiente de transferência de massa (cm/s).
 k_a = Coeficiente volumétrico de trans. massa ($1/\text{s}$).
 K_t = Taxa de equilíbrio (adimensional).
 L = Comprimento efetivo do extrator (cm).
 LR = Leitura no rotâmetro.
 m = Coeficiente de distribuição (Adimensional).
 N = Velocidade de rotação dos discos (rpm).
 Na = Taxa de transferência de massa (mol/s).
 N_{cr} = Velocidade crítica de rotação (cm/s).
 N_d = Número de discos rotativos (adimensional).
 N_p = Número de potência (adimensional).
 N_p = Normalidade da solução padronizada de NaOH.
 $[NTU]$ = Número de unidades de transferência de massa (adm.).
 N_1 = Total de soluto transferido ($\text{mol/h} \cdot \text{cm}^2$).
 P = Pressão absoluta (atm).
 $\mathcal{P}$ = Potência consumida (W).
 Pe = Número de Peclet (adimensional).
 Pe_{dr} = Número de Peclet para as gotas ascendentes (adim.).

P_o = Potência consumida na agitação (W).
 Q = Vazão volumétrica (cm^3/s).
 $Q_{\text{H}_2\text{O}}$ = Vazão volumétrica de água (cm^3/s).
 Q_{nBut} = Vazão volumétrica de n-butanol (cm^3/s).
 Re = Número de Reynolds (adimensional).
 Re^* = Número de Reynolds de agitação (adimensional).
 r = Coordenada radial.
 q = Fator relativo à estrutura da molécula (adimens.).
 q' = Fator relativo à estrutura da molécula (adimens.).
 R = Quantidade de refinado (moles).
 r = Fator relativo ao tamanho da molécula.
 R_g = Constante dos gases ideais ($\text{atm}\cdot\text{cm}^3/\text{moles}\cdot\text{K}$).
 s = Taxa de renovação da superfície (s^{-1}).
 Sc = Número de Schmit (adimensional).
 T = Temperatura absoluta (K).
 t = tempo (s).
 V = Velocidade superficial (cm/s).
 $\bar{V}$ = Velocidade superficial média relativa a parede do extrator (cm/s).
 V_d = Volume da fase dispersa (cm^3).
 V_f = Velocidade de arraste incipiente (cm/s).
 V_g = Volume gasto de NaOH 0,1N na neutralização (cm^3).
 V_n = Velocidade característica (cm/s).
 V_R = Velocidade média das gotas ascendentes em relação a fase contínua (cm/s).
 V_s = Velocidade de deslizamento (cm/s).

- w_i = Fração molar do componente i na alimentação.
 x = Fração volumétrica retida da fase dispersa (hold up) (adimensional).
 x_j^i = Fração molar do componente i na fase j (adimen.).
 y = Fração mássica.
 Z = Fator de compressibilidade.

LETRA GREGAS

- Δ = Desvio mássico médio entre a entrada e saída, com base no ácido acético (%).
 Δ_{12} = Variação de energia característica à mistura binária.
 e_b = número para a concentração no interior da gota rígida (adimensional).
 γ = Coeficiente de atividade (adimensional).
 η = Eficiência de separação (adimensional).
 ϕ = Velocidade de rotação corrigida (adim.).
 λ = Eficiência de separação (adimensional).
 μ = Viscosidade (poise).
 ρ = Massa específica (g/cm³).
 σ = Tensão superficial (Dina/cm).

SUPERSCRITOS

C	= Fase contínua.
D	= Fase dispersa.
E	= Fase extrato.
e	= No equilíbrio.
R	= Fase refinado.
L	= Estado líquido.
O	= Padrão.

SUBSCRITOS

AA	= Ácido acético.
b	= no seio da gota ou escoamento.
C	= Fase contínua.
cf	= Da fase contínua no ponto de inundação.
cr	= no ponto crítico.
D	= Fase dispersa.
df	= Da fase dispersa no ponto de inundação.
E	= Fase extrato.
f	= No ponto de inundação.
graf	= Obtido graficamente.
i	= na interface.
K	= Obtido por G.S.LADDHA e outros ⁽¹⁶⁾ (1978).

- L = Obtido por D.H.LOGSDAIL e outros⁽⁶⁾(1957).
- LM = Média logarítmica.
- m = Da mistura bifásica.
- m = Média.
- R = Fase refinado.
- O = Global.
- o,s = Global calculado pelo método da gota estagnada.
- P = Obtido neste trabalho.
- T = Obtido por E.B.TAMBOURGI⁽³⁰⁾(1989).
- Z = Obtido por S.H.ZANG e outros⁽²²⁾(1981).
- 1 = Topo da coluna.
- 2 = Base da coluna.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 - NEWMAN Trans. ICHE, 27 : 310, 1931
- 2 - P.V.DANCKWERTS Trans. Faraday Soc., 46 : 300, 1950
- 3 - G.H.REMAN *A New Efficient Apparatus: The Rotating Disc Contactor.* Proc. 3rd Word Petroleum Congre., 121 : 131, HAGUE, 1951
- 4 - H.J.VERMUIS e H.A.KRAMERS *Liquid - Liquid Extration in a Rotating Disc Contactor.* Chem. Eng. Science, 3 : 55, 1954
- 5 - G.H.REMAN e R.B.OLNEY *The Rotating Disc Contactor - A New Tool for Liquid - Liquid Extration.* Chem. Eng. Progress, vol.51, n° 3, 141 : 146, 1955
- 6 - D.H.LOGSDAIL et alii *Liquid - Liquid Extration Part XII: Flooding Rates and Performance Data for a Rotary Disc Contactor.* Trans. Inst. Chem. Engrs, vol.35, 301 : 315, 1961
- 7 - E.P.OLNEY et alii *Fundamentals Aspects of Rotating Disc Contactor Performance.* AIChE Journal, 8 : 252 , 1962
- 8 - K.R.WERTERTERP e P.LANDSMAN *Axial Mixing in a Rotating Disc Contactor.* Chem. Eng. Science, vol.17, 363 : 372, 1962
- 9 - T.MISEK *Hidrodynamic Behavior of Agitated Liquid Extractors.* Collection Czechoslov. Chem. Commun, 28:1931, 1963
- 10 - P.J.KING e E.RHODES *The Performance Characteristics of the*

- Rotating Disc Contactor.* Manufacturing Chemist, 35 : 51, 1964
- 11 - R.B.OLNEY *AIChE Journal*. 10 : 827, 1964
 - 12 - E.D.OLIVER *Diffusional Separation Process: Theory, Design and Evaluation*. 1ed., John Wiley Sons, 1966
 - 13 - R.B.AKELL *International Symposium on Solvent Extraction*. Chem. Eng. Proces. 62 (9), 51 : 55, 1966
 - 14 - R.E.TREYBAL *Mass Transfer Operations* 2^o ed., MacGraw-Hill, N.Y. , 1968
 - 15 - B.J.POPE e N.R.SHAH *An Improved Contactor for Liquid - Liquid Extraction*. Int. Solvent Ext. Conference - ISEC - 699 : 710, 1971
 - 16 - G.S.LADHA et alii *Hydrodynamics and Mass Transp. in Rotary Disk Contactors*. The Can. Journal of Chem. Eng., vol.56, 137 : 150, 1978
 - 17 - N.IRVING SAX *"Dangerous Properties of Industrial Materials" Fourth Edition"* Litton Educat. Publishing, Inc., 1975
 - 18 - N.BACCAN et alii *Química Analítica Quantitativa Elementar* 2^o ed. Editora da UNICAMP, Campinas - SP, 1979
 - 19 - J.M.SMITH e H.C.VAN NESS *Introdução a Termodinâmica da Engenharia Química*. Guanabara Dois. RJ - RJ, 1980
 - 20 - J.M.PRAUSNITZ et alii *Computer Calculations for Multicomponent Vapor - Liquid and Liquid - Liquid Equilibria*. University of California Berkeley, Prentice-Hall - Inc, USA, 1980

- 21 - R.H.PERRY e D.H. CHILTON *Manual de Engenharia Química* 5^{ed.}
Guanabara Dois, RJ - RJ, 1980
- 22 - S.H.ZHANG et alii *Hydrodynamics, Axial Mixing and Mass Transfer in Rotating Disc Contactors*. The Can. Journal of Chem. Eng., vol.59, 573 : 583, 1981
- 23 - D.A BLACKADDER e R.M. NEDDERMAN *Manual de Operações Unitárias*. Trad. L.R.GODOI VIDAL. Editora Hemmus, SP - SP, 1982
- 24 - A.G.FOUST et alii *Princípios das Operações Unitárias*. Trad. H.MÁCEDO. 2^o ed. Guanabara Dois, RJ - RJ, 1982
- 25 - J.M.KIM et alii *Residence Time Distribution Analysis in Controllable Flow Conditions: Case of Rotating Disc Reactor*. Chem. Eng. Sci. 39 (5), 813 : 819, 1984
- 26 - E.H.MAXIMILIAN *Fortran IV* MacGraw - Hill, SP - SP, 1985
- 27 - E.M.MAXIMILIAN *Linguagem de Programação Estruturada Fortran 77*. MacGraw - Hill, SP - SP, 1986
- 28 - D.Q.KERN *Processos de Transmissão de Calor*. Editora Guanbara, RJ - RJ, 1987
- 29 - L.M.NÊLSON DE GÔES *Desenvolvimento e Estudo de um Contactor de Discos Rotativos*. CAMPINAS-SP, UNICAMP, 1987 (Tese de Mestrado)
- 30 - E.B.TAMBOURGI *Estudo da Hidrodinâmica de uma Coluna de Discos Rotativos* EPUSP - SP, 1989 (Tese de doutorado)
- 31 - E. SIKHA *Programme LQLOFT: Calcul des Coefficients D'interaction Binaires pour L'equation D'UNIQUAC a partir de Donnees Experimentales D'equilibre Liquide- Liquide*. (

- 33 - C. J. KING *Separation Process.* McGraw - Hill, N.Y., 1971
- 34 - H. H. RACHAFORD Jr E J. D. RICE J. Petrol. Technol., 4. sec.
1. 19 : sec. 2, 3. 1952
- 35 - J. H. WEGSTEIN Commun A.C.M., 1 : 9. 1955

Neste item apresentamos as equações das melhores curvas dos pontos experimentais quando construímos gráficos destes com as outras variáveis estudadas.

Os números entre parênteses indicam as respectivas páginas onde estão localizadas as figuras.

Figura (3.2) - Gráfico para cálculo da velocidade característica em função das condições experimentais de inundação.

$l = 40 \text{ cm}$; $d_p = 5,1 \text{ cm}$ e $d_c = 5,3 \text{ cm} \dots (56)$

The regression formula for computing Y_0 is :

$$Y_0 = 0.00173 + 0.57500 \times ((X - 0.00000) / 0.10000)$$

Figura (3.3) - Gráfico para cálculo da velocidade característica em função das condições experimentais de inundação.

$l = 40 \text{ cm}$; $d_p = 5,1 \text{ cm}$ e $d_c = 5,3 \text{ cm} \dots (57)$

The regression formula for computing Y_0 is :

$$Y_0 = 0.00387 + 0.38520 \times ((X-0.00000)/0.10000)$$

Figura (3.4) - Gráfico para cálculo da velocidade característica em função das condições experimentais de inundação.

$l = 40 \text{ cm}$; $d_p = 5,1 \text{ cm}$ e $d_c = 5,3 \text{ cm} \dots (58)$

The regression formula for computing Y_0 is :

$Y_0 = 0.00036$

$+ 8.60131 \times ((X - 0.00000) / 0.10000)$

Figura (3.5) - Influência da velocidade de rotação na velocidade característica para as duas geometrias estudadas.....(59)

The regression formula for computing Y_0 is :
 $Y_0 = 3.45855$
 $-2.89208 \times ((X-0.00000)/250.00000)$

The regression formula for computing Y_1 is :
 $Y_1 = 6.81116$
 $-5.26721 \times ((X-0.00000)/250.00000)$

Figura (3.6) - Comparação entre os resultados relativos à velocidade característica, obtidos experimentalmente neste trabalho com os resultados obtidos pelas correlações propostas por outros pesquisadores.....(64)

The regression formula for computing Y_0 is :
 $Y_0 = 1.16090$
 $+104.76524 \times ((X-0.00000)/5.00000)$

The regression formula for computing Y_1 is :
 $Y_1 = 0.48525$
 $+6.54104 \times ((X-0.00000)/5.00000)$

The regression formula for computing Y_2 is :
 $Y_2 = 1.54363$
 $+10.17765 \times ((X-0.00000)/5.00000)$

Figura C 4.6 D - Influencia do número de discos rotativos.(C 110 D)

The regression formula for computing Y_0 is :

$$Y_0 = 0.84494 \\ + 0.05476 \times ((X - 50.00000) / 130.00000)$$

The regression formula for computing Y_1 is :

$$Y_1 = 0.87618 \\ + 0.06383 \times ((X - 50.00000) / 130.00000)$$

Figura C 4.7 D - Influência da relação V_0/V_d C ND = 5 D...C 111 D

The regression formula for computing Y0 is :

$$Y0 = 0.87484 \\ + 0.02855 \times ((X-60.00000)/120.00000)$$

The regression formula for computing Y1 is :

$$Y1 = 0.80506 \\ + 0.08279 \times ((X-60.00000)/120.00000)$$

The regression formula for computing Y2 is :

$$Y2 = 0.81024 \\ + 0.06651 \times ((X-60.00000)/120.00000)$$

Figura (4.8) - Influência da relação V_c/V_d ($N_d = 7$)... (112)

The regression formula for computing Y_0 is :

$$Y_0 = 0.86892 + 0.06747 \times ((X-60.00000)/120.00000)$$

The regression formula for computing Y_1 is :

$$Y_1 = 0.89750 + 0.03678 \times ((X-60.00000)/120.00000)$$

The regression formula for computing Y_2 is :

$$Y_2 = 0.87391 + 0.07999 \times ((X-60.00000)/120.00000)$$

Figura (4.9) - Influência da área livre de escoamento

Nd = 5.....(113)

The regression formula for computing Y0 is :

$$Y_0 = 6.87988 \\ + 0.11887 \times ((X-50.00000)/130.00000)$$

The regression formula for computing Y1 is :

$$Y_1 = 6.84374 \\ + 0.10637 \times ((X-50.00000)/130.00000)$$

The regression formula for computing Y2 is :

$$Y_2 = 6.77674 \\ + 0.13248 \times ((X-50.00000)/130.00000)$$

The regression formula for computing Y3 is :

$$Y_3 = 6.76887 \\ + 0.12589 \times ((X-50.00000)/130.00000)$$

Figura (4.10) - Influência da área livre de escoamento

Nd = 7.....(114)

The regression formula for computing Y2 is :
 $Y_2 = 0.38155$
 $+0.01796 \times ((X-60.00000)/110.00000)$

The regression formula for computing Y1 is :
 $Y_1 = 0.90026$
 $+0.01607 \times ((X-60.00000)/110.00000)$

The regression formula for computing Y2 is :
 $Y_2 = 0.22266$
 $+0.03745 \times ((X-60.00000)/110.00000)$

The regression formula for computing Y3 is :
 $Y_3 = 0.94622$
 $+0.01227 \times ((X-60.00000)/110.00000)$

Figura (4.12) - Comparação entre os resultados exp. e os
 resultados obtidos pela cor. (4.74), pa-
 ra a eficiência de sep. (λ).....(125)

The regression formula for computing $\hat{Y}_0$ is :
 $\hat{Y}_0 = 0.800000$
 $+ 0.200000 \times ((X - 0.800000)/0.200000)$