

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ENGENHARIA DE SISTEMAS QUÍMICOS E INFORMÁTICA

**ESTUDO DA EFICIÊNCIA DE SEPARAÇÃO NUMA COLUNA DE
EXTRAÇÃO LÍQUIDO-LÍQUIDO MECANICAMENTE AGITADA
POR PALHETAS ROTATIVAS**

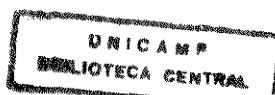
AUTORA : Ana Paula Brescancini Rabelo

ORIENTADOR : Prof. Dr. Elias Basile Tambourgi

**Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia
Química como parte dos requisitos para a obtenção do
título de Mestre em Engenharia Química**

AGOSTO/1995

CAMPINAS - SP



089708

UNIDADE	BC
CHAMADA:	R112e
Ex.	
CMBO BC	3266f
DOC.	315/98
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
RECO	Ph U ON
DATA	19/01/98
CPD	

CM-00105023-9

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

R112e Rabelo, Ana Paula Brescancini
Estudo da eficiência de separação numa coluna de
extração líquido-líquido mecanicamente agitada por
palhetas rotativas. / Ana Paula Brescancini Rabelo.--
Campinas, SP: [s.n.], 1995.

Orientador: Elias Basile Tambourgi.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

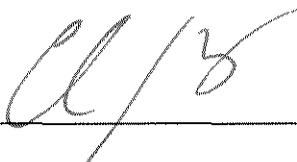
1. Extração por solventes. 2. Massa - Transferência.
3.*Extratores. I. Tambourgi, Elias Basile.
II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de
Engenharia Química. III. Título.

Esta versão corresponde à redação final da dissertação de mestrado defendida pela Engenheira Química Ana Paula Brescancini Rabelo e aprovada pela comissão julgadora em 22 de agosto de 1995.



Prof. Dr. Elias Basile Tambourgi

Tese defendida e aprovada, em 22 de agosto de 1995, pela banca examinadora constituída pelos Professores :



Prof. Dr. Elias Basile Tambourgi



Profª Drª Lúcia Helena Innocentini Mei



Prof. Dr. Roger Josef Zemp

RESUMO:

Com a finalidade de obter-se equipamentos mais eficientes para operações de extração líquido-líquido, desenvolveu-se a coluna de extração mecanicamente agitada por palhetas rotativas; sendo este trabalho inédito, já que não foram encontrados na literatura outros trabalhos que descrevessem equipamentos de extração deste tipo.

Para o estudo da eficiência deste equipamento, realizou-se experimentos com o sistema ternário água-ácido acético-butanol, onde eram variados aspectos geométricos e operacionais, tais quais : a área livre das palhetas, a vazão total de alimentação, a razão entre as vazões solvente/alimentação e a velocidade de rotação das palhetas.

Os dados foram analisados utilizando-se quatro formas de expressar a eficiência : Índice de recuperação do soluto, Eficiência de Murphree, número de unidades de transferência de massa (NUT) e número de estágios teóricos (NET). Foi verificado que os três primeiros métodos são adequados para a avaliação da coluna, contudo o último deles, o número de estágios teóricos, não apresentou resultados satisfatórios. Isso veio a comprovar o caráter contínuo da operação da coluna, já que o número de estágios teóricos é um método adequado para colunas que operam em estágios.

Foi também proposta uma correlação, obtida através da análise dimensional, para a eficiência de separação.

Neste trabalho, verificou-se que o equipamento permite que altas eficiências sejam obtidas. Foram encontradas eficiências da ordem de 90 %, nas melhores condições de operação da coluna. A correlação descreveu os experimentos com erros relativamente baixos.

Aos meus pais

Frederico Rabelo e Jone Brescancini Rabelo

À minha irmã

Viviane Brescancini Rabelo

Aos meus avós

Bracial Brescancini (in memoriam) e

Ida Fardona Brescancini

AGRADECIMENTOS

Ao professor Elias Basile Tambourgi, pela orientação, incentivo e amizade a mim dispensados durante o desenvolvimento deste trabalho.

Aos amigos Roberto Rodrigues de Souza, Elvira Cândida Cerdeira e Luís Mário Nelson de Góes pela dedicação e colaboração na execução deste trabalho.

Às alunas Andrea, Nicole, Adriana, Isa Mônica, Luciana e ao Renato pelo incentivo e colaboração nos trabalhos experimentais.

Aos professores e funcionários da Faculdade de Engenharia Química pelo apoio dispensado, em especial ao Prof. Roger Josef Zemp pela valiosa colaboração.

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

Aos amigos da Pós-Graduação e colegas do laboratório pelos momentos de companheirismo, amizade, apoio e estímulo.

A todos os amigos que direta ou indiretamente colaboraram na realização deste trabalho.

ÍNDICE

Lista de Figuras	v
Lista de Tabelas	viii
Nomenclatura	xii
Introdução	1
Capítulo I - A Extração Líquido-Líquido	6
I.1 - Introdução	7
I.2 - A extração líquido-líquido	7
I.2.1 - Aplicações	8
I.3 - Conceitos Básicos	10
I.4 - Equipamentos usados nos processos de extração	12
Capítulo II - Análise da Literatura	19
II.1 - Introdução	20
II.2 - Princípios da transferência de massa na extração líquido-líquido	20
II.3 - O contator de discos rotativos	21
II.4 - Estudo da transferência de massa em extratores líquido-líquido	22
Capítulo III-Montagem e Procedimento Experimental	27
III.1 - Introdução	28
III.2 - Descrição do Equipamento	28
III.3 - Procedimento Experimental	31
III.3.1 - Introdução	31

III.3.2 - Sistema Líquido Ternário	31
III.3.3 - Operação da Coluna	33
III.4 - Variáveis Estudadas	34
Capítulo IV- Transferência de Massa num Processo de Extração Líquido-Líquido	35
IV.1 - Introdução	36
IV.2 - Princípios da Transferência de Massa	36
IV.2.1 - Difusão na fase líquida	37
IV.3 - Mecanismos de Transferência de massa na interface entre duas fases	38
IV.3.1- Os coeficientes de transferência de massa	39
IV.4 - Número de Estágios Teóricos	42
IV.5 - O Número de Unidades de Transferência de Massa em operações contínuas	43
IV.6 - Eficiência de Extração	48
IV.7 - Análise dos Modelos	50
Capítulo V- Equilíbrio de Fases	51
V.1 - Introdução	52
V.2 - Equilíbrio de Fases	52
V.2.1 - Introdução	52
V.2.2 - O equilíbrio de fases	53
V.2.3 - Determinação das composições de equilíbrio	55
V.2.3.1 - Procedimento Iterativo	57
V.2.4 - Modelos Matemáticos	58
V.2.4.1 - Modelo UNIQUAC	59

V.3 - Curva de Distribuição	63
Capítulo VI-Análise dos Resultados	65
VI.1 - Introdução	66
VI.2 - Índice de Recuperação do Soluto	66
VI.2.1 - A Velocidade de Rotação	67
VI.2.2 - Razão entre as Vazões das Fases Contínua e Dispersa	69
VI.2.3 - Vazão Total das Fases	71
VI.2.4 - Área Livre das Palhetas	72
VI.3 - Eficiência de Separação (Eficiência de Murphree)	73
VI.3.1 - A Velocidade de Rotação	74
VI.3.2 - A Razão entre as Vazões das Fases Contínua e Dispersa	75
VI.3.3 - A Vazão Total de Alimentação	76
VI.3.4 - A Área Livre das Palhetas	77
VI.4 - NUT - Número de Unidades de Transferência	78
VI.4.1 - A Velocidade de Rotação das Palhetas	79
VI.4.2 - Razão entre as Vazões das Fases	80
VI.4.3 - A Vazão Total de Alimentação	81
VI.4.4 - A Área Livre das Palhetas	82
VI.5 - Número de Estágios Teóricos e Eficiência Global	83
VI.5.1 - A Velocidade de Rotação das Palhetas	84
VI.5.2 - Razão entre as Vazões de Alimentação	85
VI.5.3 - A Vazão Total de Alimentação	85
VI.5.4 - A Área Livre das Palhetas	86

VI.6 - Modelagem Matemática para a Eficiência de Murphree	87
VI.6.1 - Obtenção do modelo matemático	87
Capítulo VII- Conclusões e Sugestões	91
VII.1 - Introdução	92
VII.2 - Conclusões	92
VII.3 - Sugestões	94
Referências Bibliográficas	95
Apêndices	101
Apêndice A - Curvas de calibração dos rotâmetros	102
Apêndice B - Resultados referentes ao Equilíbrio de Fases	105
Apêndice C - Modelagem matemática para a Eficiência de Separação	110
Apêndice D - Tabelas com os resultados experimentais	116
Anexos	142
Anexo 1 - Regressão Linear Multivariável	143
Anexo 2 - Representação do Equilíbrio (sistemas ternários)	146
Anexo 3 - Seletividade e Curvas de Distribuição	149
Anexo 4 - Balanço Material	152
Anexo 5 - Critérios de escolha de solventes	154
Anexo 6 - Método de McCabe-Thiele para cálculo de NET e cálculo de NUT	156
Anexo 7 - Propriedades físicas e químicas dos componentes do sistema ternário	160
Anexo 8 - Método Numérico de Integração	163

LISTA DE FIGURAS

Figura I.1 - Esquema de um sistema de contato e separação em estágios (misturadores-decantadores)	13
Figura I.2 - Esquema de uma coluna de pratos fixos perfurados	14
Figura I.3 - Esquema de colunas recheadas e colunas "Spray"	15
Figura I.4 - Esquema de colunas de fluxo pulsado e de pratos pulsados	16
Figura I.5 - Esquema de colunas agitadas mecanicamente por discos rotativos (RDC)	17
Figura III.1 -Coluna de Extração Agitada por Palhetas Rotativas	29
Figura III.2 -Esquema de um diagrama ternário para um sistema tipo I	31
Figura IV.1 -Diagrama representando os gradientes de concentração na interface durante a transferência de massa	40
Figura IV.2 -Extração por contato contínuo contracorrente	45
Figura V.1 - Curva de distribuição para o sistema ternário butanol-ácido acético-água à 26,7°C	63
Figura V.2 - Curva de distribuição para o sistema ternário butanol-ácido acético-água à 26,7°C, para concentrações muito pequenas	64
Figura VI.1 -Gráfico do Índice de Recuperação do Solute pela Velocidade de Rotação das Palhetas, para $A_1 = 14\%$ e $Q_T = 5,5$ ml/s	67
Figura VI.2 -Gráfico do Índice de Recuperação do Solute pela Velocidade de Rotação das Palhetas, para $V_C/V_d = 6$ e $Q_T = 7,0$ ml/s	68
Figura VI.3 -Gráfico do Índice de Recuperação do Solute pela Velocidade de Rotação das Palhetas, para $A_1 = 0\%$ e $Q_T = 7,0$ ml/s	69
Figura VI.4 -Gráfico do Índice de Recuperação do Solute pela Razão entre as Vazões, para $Q_T = 5,5$ ml/s e $N = 2$ rps	70
Figura VI.5 -Gráfico do Índice de Recuperação do Solute pela Razão entre as Vazões, para $Q_T = 5,5$ ml/s e $N = 3$ rps	70

- Figura VI.6-** Gráfico do Índice de Recuperação do Solute pela Vazão total das fases, para $Al = 14\%$ e $V_C/V_d = 9$ 71
- Figura VI.7-** Gráfico do Índice de Recuperação do Solute pela Vazão total das fases, para $Al = 14\%$ e $N = 2$ rps 72
- Figura VI.8-** Gráfico do Índice de Recuperação do Solute pela Vazão total das fases, para $V_C/V_d = 9$ e $N = 2$ rps 73
- Figura VI.9-** Gráfico da Eficiência de Murphree pela Velocidade de Rotação das Palhetas, para $Al = 14\%$ e $Q_T = 5,5$ ml/s 74
- Figura VI.10-** Gráfico da Eficiência de Murphree pela Velocidade de Rotação das Palhetas, para $V_C/V_d = 6$ e $Q_T = 7,0$ ml/s 75
- Figura VI.11-** Gráfico da Eficiência de Murphree pela Vazão total de alimentação, para $V_C/V_d = 9$ e $Al = 14\%$ 76
- Figura VI.12-** Gráfico da Eficiência de Murphree pela Vazão total de alimentação, para $V_C/V_d = 9$ e $N = 1$ rps 77
- Figura VI.13-** Gráfico do NUT pela Velocidade de Rotação das Palhetas, para $Q_T = 5,5$ ml/s e $Al = 14\%$ 80
- Figura VI.14-** Gráfico do NUT pela Velocidade de Rotação das Palhetas, para $Q_T = 5,5$ ml/s e $V_C/V_d = 6$ 81
- Figura VI.15-** Gráfico do NUT pela Vazão total de alimentação, para $Al = 14\%$ e $V_C/V_d = 9$ 81
- Figura VI.16-** Gráfico do NUT pela Vazão total de alimentação, para $V_C/V_d = 6$ e $N = 2$ rps 82
- Figura VI.17-** Gráfico da Eficiência Global pela Velocidade de Rotação das Palhetas, para $Al = 14\%$ e $Q_T = 5,5$ ml/s 84
- Figura VI.18-** Gráfico da Eficiência Global pela Velocidade de Rotação das Palhetas, para $V_C/V_d = 6$ e $Q_T = 5,5$ ml/s 85
- Figura VI.19-** Gráfico da Eficiência Global pela Vazão total de alimentação, para $Al = 14\%$ e $V_C/V_d = 9$ 86
- Figura VI.20-** Gráfico da Eficiência Global pela Vazão total de alimentação, para $N = 2$ rps e $V_C/V_d = 6$ 86

Figura VI.21- Gráfico dos valores da Eficiência de Separação calculados pelo modelo matemático e os obtidos experimentalmente	89
Figura A.1- Curva de calibração do rotâmetro para o butanol	103
Figura A.2- Curva de calibração do rotâmetro para a água	104
Figura A.2.1- Representação de cada tipo de sistema ternário	148
Figura A.3.1- Representação da curva de distribuição do soluto entre dois líquidos parcialmente miscíveis	151
Figura A.6.1- Diagrama hipotético de McCabe-Thiele	157
Figura A.6.2- Método gráfico para determinação do NTU_j	158

LISTA DE TABELAS

Tabela I.1 - Classificação dos equipamentos, segundo Hanson [3]	18
Tabela III.1 - Variáveis estudadas neste trabalho	34
Tabela B.1 - Parâmetros para o modelo UNIQUAC	106
Tabela B.2 - Linhas de amarração experimentais	107
Tabela B.3 - Linhas de amarração obtidas pelo programa	108
Tabela B.4 - Concentração de ácido acético no equilíbrio (valores calculados)	109
Tabela C.1 - Tabela das Eficiências de Separação calculadas pelo modelo e experimentais	114
Tabela D.1.1 -Vazões de alimentação e saída das fases, para Al = 0% e N = 0 rps	117
Tabela D.1.2 -Vazões de alimentação e saída das fases, para Al = 0% e N = 1 rps	117
Tabela D.1.3 -Vazões de alimentação e saída das fases, para Al = 0% e N = 2 rps	118
Tabela D.1.4 -Vazões de alimentação e saída das fases, para Al = 0% e N = 3 rps	118
Tabela D.1.5 -Vazões de alimentação e saída das fases, para Al = 0% e N = 4 rps	119
Tabela D.2.1 -Vazões de alimentação e saída das fases, para Al = 14 % e N = 0 rps	119
Tabela D.2.2 -Vazões de alimentação e saída das fases, para Al = 14 % e N = 1 rps	120
Tabela D.2.3 -Vazões de alimentação e saída das fases, para Al = 14 % e N = 2 rps	120

Tabela D.2.4 -Vazões de alimentação e saída das fases, para Al = 14 % e N = 3 rps	121
Tabela D.2.5 -Vazões de alimentação e saída das fases, para Al = 14 % e N = 4 rps	121
Tabela D.3.1 -Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna, para Al = 0 % e N = 0 rps	122
Tabela D.3.2 -Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna, para Al = 0 % e N = 1 rps	122
Tabela D.3.3 -Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna, para Al = 0 % e N = 2 rps	123
Tabela D.3.4 -Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna, para Al = 0 % e N = 3 rps	123
Tabela D.3.5 -Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna, para Al = 0 % e N = 4 rps	124
Tabela D.4.1 -Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna, para Al = 14 % e N = 0 rps	124
Tabela D.4.2 -Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna, para Al = 14 % e N = 1 rps	125
Tabela D.4.3 -Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna, para Al = 14 % e N = 2 rps	125
Tabela D.4.4 -Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna, para Al = 14 % e N = 3 rps	126
Tabela D.4.5 -Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna, para Al = 14 % e N = 4 rps	126
Tabela D.5.1 -Frações molares de ácido acético na coluna, para Al = 0 % e N = 0 rps	127
Tabela D.5.2 -Frações molares de ácido acético na coluna, para Al = 0 % e N = 1 rps	127

Tabela D.5.3 -Frações molares de ácido acético na coluna, para Al = 0 % e N = 2 rps	128
Tabela D.5.4 -Frações molares de ácido acético na coluna, para Al = 0 % e N = 3 rps	128
Tabela D.5.5 -Frações molares de ácido acético na coluna, para Al = 0 % e N = 4 rps	129
Tabela D.6.1 -Frações molares de ácido acético na coluna, para Al = 14 % e N = 0 rps	129
Tabela D.6.2 -Frações molares de ácido acético na coluna, para Al = 14 % e N = 1 rps	130
Tabela D.6.3 -Frações molares de ácido acético na coluna, para Al = 14 % e N = 2 rps	130
Tabela D.6.4 -Frações molares de ácido acético na coluna, para Al = 14 % e N = 3 rps	131
Tabela D.6.5 -Frações molares de ácido acético na coluna, para Al = 14 % e N = 4 rps	131
Tabela D.7.1 -Valores do Índice de Recuperação do Soluto, para Al = 0 e 14 % e N = 0 rps	132
Tabela D.7.2 -Valores do Índice de Recuperação do Soluto, para Al = 0 e 14 % e N = 1 rps	132
Tabela D.7.3 -Valores do Índice de Recuperação do Soluto, para Al = 0 e 14 % e N = 2 rps	133
Tabela D.7.4 -Valores do Índice de Recuperação do Soluto, para Al = 0 e 14 % e N = 3 rps	133
Tabela D.7.5 -Valores do Índice de Recuperação do Soluto, para Al = 0 e 14 % e N = 4 rps	134
Tabela D.8.1 -Valores da Eficiência de Murphree , para Al = 0 e 14 % e N = 0 rps	134

Tabela D.8.2 -Valores da Eficiência de Murphree , para Al = 0 e 14 % e N = 1 rps	135
Tabela D.8.3 -Valores da Eficiência de Murphree , para Al = 0 e 14 % e N = 2 rps	135
Tabela D.8.4 -Valores da Eficiência de Murphree , para Al = 0 e 14 % e N = 3 rps	136
Tabela D.8.5 -Valores da Eficiência de Murphree , para Al = 0 e 14 % e N = 4 rps	136
Tabela D.9.1 -Valores do NUT para Al = 0 e 14 % e N = 0 rps	137
Tabela D.9.2 -Valores do NUT para Al = 0 e 14 % e N = 1 rps	137
Tabela D.9.3 -Valores do NUT para Al = 0 e 14 % e N = 2 rps	138
Tabela D.9.4 -Valores do NUT para Al = 0 e 14 % e N = 3 rps	138
Tabela D.9.5 -Valores do NUT para Al = 0 e 14 % e N = 4 rps	139
Tabela D.10.1 - Valores da Eficiência Global e do NET , para Al = 0 e 14 % e N = 0 rps	139
Tabela D.10.2 - Valores da Eficiência Global e do NET , para Al = 0 e 14 % e N = 1 rps	140
Tabela D.10.3 - Valores da Eficiência Global e do NET , para Al = 0 e 14 % e N = 2 rps	140
Tabela D.10.4 - Valores da Eficiência Global e do NET , para Al = 0 e 14 % e N = 3 rps	141
Tabela D.10.5 - Valores da Eficiência Global e do NET , para Al = 0 e 14 % e N = 4 rps	141
Tabela A.7.1 - Propriedades Físicas e Químicas dos Componentes do Sistema Ternário	161

NOMENCLATURA

A - área interfacial total entre as fases

α - área interfacial por unidade de volume da coluna

AEET - altura equivalente a um estágio teórico, equação IV.15

A_I - área livre das palhetas (%)

A_K - área superficial de grupo (equação UNIQUAC)

AUT - altura de uma unidade de transferência

C - fração mássica de soluto na fase refinado

D_L - difusividade do soluto na fase líquida

d_R - diâmetro do disco rotor

d_T - diâmetro da coluna

E - fase extrato

E* - eficiência de separação (eficiência de Murphree), dada pela equação II.1 (%)

E_D - difusividade turbilhonar

E_j - taxa da fase extrato

E_K - índice de recuperação do soluto (%), dado pela equação II.3

E₀ - eficiência global, dada pela equação IV.35

f - fugacidade

F - alimentação

G^E - energia livre de Gibbs de excesso

H - altura da coluna

K - constante de equilíbrio, dada pelas equações V.10 e V.11

k' - coeficiente de transferência de massa

k_j - coeficiente individual de transferência de massa para a fase j

K_j - coeficiente global de transferência de massa para a fase j

m - coeficiente de distribuição do soluto dado pelas equações IV.5 e IV.6

MIBK - metil-isobutil-cetona

N - velocidade de rotação das palhetas (rps)

n - número de moles

N - taxa de transferência de massa

N_B - velocidade molar de difusão por unidade de área

NC - número de estágios reais (compartimentos)

NET - número de estágios teóricos

NUT - número de unidades de transferência, dado pela equação II.2

q - soma das contribuições de área do grupo (equação UNIQUAC)

Q_K - parâmetros de grupo (área superficial - modelo UNIQUAC)

Q_T - vazão total de entrada das fases na coluna

R - fase refinado

r_i - parâmetro de volume para o componente i (equação - UNIQUAC)

R_j - taxa da fase refinado

R_K - parâmetros de grupo (volume-de-grupo - modelo UNIQUAC)

rps - rotações por segundo

u_{ij} - energia média de interação entre os componentes i e j (equação UNIQUAC)

V - vazão das fases

V_k - volume de grupo (equação - UNIQUAC)

W_i - fração molar do componente i na alimentação

x - fração molar de soluto na fase extrato

x^* - fração molar de soluto na fase extrato no equilíbrio

y - fração molar de soluto na fase refinado

y^* - fração molar de soluto na fase refinado no equilíbrio

y_B - concentração molar do soluto (moles/cm³)

z - distância na direção da difusão

Z - comprimento do extrator

Z_C - altura do compartimento da coluna

LETRAS GREGAS

Δ - variação

γ - coeficiente de atividade

α - fator de separação

ϕ_i - fração de volume do componente i (modelo UNIQUAC)

θ_i - fração de área para o componente i (modelo UNIQUAC)

ν_k - número de grupos do tipo k na molécula (modelo UNIQUAC)

β - seletividade

τ - parâmetro do modelo UNIQUAC

ÍNDICE INFERIOR

- 1- posição da medida : fundo da coluna
- 2- posição da medida : topo da coluna
- C - fase contínua
- d - fase dispersa
- e - fase extrato (figura IV.1)
- E - fase extrato
- f - alimentação
- j - fase ou componente
- k - fase extrato ou refinado
- M - valor médio
- o - valor global
- r - fase refinado (figura IV.1)
- R - fase refinado
- RM - média dos valores na interface e no seio do fluido
- t - total

ÍNDICE SUPERIOR

- E - fase extrato
- F - alimentação
- L - estado líquido
- O - padrão
- R - fase refinado

INTRODUÇÃO

Introdução :

A extração líquido-líquido, primeiramente, era utilizada como uma técnica laboratorial de separação. Atualmente, ela é empregada em vários outros setores industriais tais quais : extração de metais, purificação de antibióticos e para tratamentos de efluentes industriais, entre outros. Contudo, sua maior aplicação concentra-se na indústria petroquímica.

A extração líquido-líquido é um método indireto de separação, ou seja, ela exige a introdução de uma substância no sistema, o solvente. A extração líquido-líquido é uma operação unitária que permite a obtenção de produtos com um alto grau de pureza. Este método é empregado em casos onde um outro método direto de separação, como por exemplo a destilação ou cristalização, seja anti-econômico ou impraticável, como nos casos em que os componentes sejam pouco solúveis, tenham baixa volatilidade relativa, sejam sensíveis à temperatura, tenham pontos de ebulição próximos ou quando o componente desejado seja pouco volátil e esteja presente em pequena quantidade na solução. A escolha entre os métodos de separação é, também, realizada por critérios econômicos.

Em processos que empregam a extração líquido-líquido, a etapa de extração em si não exige um grande consumo energético, sendo que a viabilidade econômica destes processos é bastante influenciada pelos custos do equipamento e da recuperação do solvente.

Com a modernização dos processos industriais e a necessidade de obter-se produtos com melhor qualidade e mais baratos, vem ocorrendo nos últimos anos uma grande procura por tecnologias alternativas, econômica ou tecnicamente mais viáveis que as convencionais. Neste sentido, a extração líquido-líquido apresenta-se como um campo tecnológico extremamente interessante.

Mesmo com todos os avanços alcançados ultimamente, existe pouca informação na literatura quanto aos dados de projeto de equipamentos, dados de equilíbrio de fases e estudos sobre a transferência de massa. Atualmente, a engenharia química está buscando aprimorar a extração líquido-líquido por meio de estudos envolvendo o processo de como ocorre a extração e o desempenho dos equipamentos utilizados para a extração, além de estudos que auxiliem a contornar os problemas ligados à extrapolação de resultados, como por exemplo, estudos à nível de laboratório de fenômenos tais como a mistura longitudinal e os caminhos preferenciais, que afetam fortemente a eficiência do equipamento.

O emprego de extratores verticais nos processos de extração líquido-líquido se justifica devido a esses equipamentos ocuparem pequena área, terem boa eficiência de separação e apresentarem facilidades de operação e manutenção.

Entre os equipamentos de contato contínuo e de escoamento contracorrente, o extrator de palhetas rotativas é uma alternativa tecnologicamente atrativa, comparada a outros equipamentos de separação convencionais. Dentre as vantagens que podem ser observadas, encontram-se : o aumento do grau de dispersão e da eficiência para uma certa separação, promovidos pela agitação mecânica imposta pelas palhetas.

Neste trabalho, objetiva-se desenvolver e estudar um extrator para contato líquido-líquido, mecanicamente agitado por palhetas rotativas, que tenha vantagens econômicas na instalação, na operação e na manutenção em relação aos extratores mecanicamente agitados convencionais.

Sendo assim, dentro do principal objetivo deste trabalho que é a obtenção de dados que justifiquem a utilização do extrator de palhetas rotativas como uma opção para os processos de extração líquido-líquido, pretende-se estudar as condições de transferência de massa neste extrator.

A determinação do comportamento hidrodinâmico e operacional está fundamentada em estudos usando-se sistemas típicos, já conhecidos na literatura. Neste trabalho foi utilizado o sistema ternário água-ácido acético-butanol.

Pretende-se avaliar a eficiência do equipamento de extração (coluna de extração agitada por palhetas rotativas), a partir de parâmetros geométricos e operacionais.

Este trabalho é constituído de 7 capítulos, 4 apêndices e 8 anexos.

No Capítulo I , é feita uma revisão sobre os principais conceitos envolvendo a extração líquido-líquido, englobando os conceitos básicos, campos de aplicação desse processo de separação, aspectos econômicos, razões para o estudo e a utilização desse processo e os tipos de equipamentos existentes .

No capítulo II é realizada uma análise da literatura sobre a transferência de massa em processos de extração líquido-líquido, incluindo principalmente estudos realizados em colunas de extração mecanicamente

agitadas, além da apresentação dos principais modelos matemáticos usados no estudo da transferência de massa em processos de extração.

No capítulo III, é feita a apresentação do equipamento desenvolvido neste trabalho e do procedimento experimental adotado.

No capítulo IV, é realizada uma revisão da teoria envolvida nos processos de transferência de massa, sendo apresentadas as equações desenvolvidas para processos de extração líquido-líquido e equações para expressar a eficiência de separação; no fim deste capítulo, faz-se uma análise dessas equações e apresenta-se as equações escolhidas para serem utilizadas nas análises.

No capítulo V, é feita uma revisão sobre a teoria do equilíbrio de fases, em especial sobre o equilíbrio líquido-líquido; também é apresentado um esquema do programa usado no cálculo do equilíbrio e as equações e condições utilizadas no desenvolvimento desse programa, além da curva de distribuição para o sistema em estudo, obtida por meio deste programa.

No capítulo VI, são apresentados os resultados experimentais obtidos e feita a análise dos dados.

No capítulo VII, são apresentadas as conclusões finais, baseadas nas análises dos dados e as sugestões para trabalhos futuros.

No apêndice A são mostradas as curvas de calibração dos rotômetros utilizados nos experimentos.

No apêndice B, encontram-se os resultados relativos aos cálculos de equilíbrio, constantes utilizadas no modelo de predição e é feita uma comparação de resultados obtidos experimentalmente, encontrados na literatura e os resultados calculados, para o sistema usado neste trabalho, à temperatura em que os dados foram obtidos.

No apêndice C, encontram-se os dados e procedimento usados na obtenção do modelo matemático para a eficiência de separação.

No apêndice D, encontram-se as tabelas com resultados experimentais obtidos.

No anexo 1, é apresentado o procedimento usado para realizar-se a regressão linear multivariável, necessária para obtenção do modelo matemático para a eficiência de separação.

No anexo 2, são apresentados alguns modos de representação de sistemas ternários e os tipos de sistemas ternários possíveis de se obter.

No anexo 3, é feita a apresentação da curva de distribuição e alguns comentários sobre esta maneira de se representar dados de equilíbrio de fases, além de ser apresentada a definição de seletividade.

No anexo 4, são apresentadas as equações de balanço de massa usadas na análise da extração líquido-líquido.

No anexo 5 são apresentados os critérios de escolha dos solventes.

No anexo 6 são apresentados os métodos para o cálculo do número de estágios teóricos de McCabe-Thiele e o método para o cálculo do número de unidades de transferência apresentado por Treybal [5].

No anexo 7 são apresentadas as propriedades físicas e químicas dos componentes do sistema ternário utilizado (água, ácido acético, butanol).

No anexo 8 é apresentado o método numérico utilizado na integração da equação diferencial com a qual se obtém o valor do número de unidades de transferência.

CAPÍTULO I

A EXTRAÇÃO LÍQUIDO-LÍQUIDO

I.1 - Introdução

Devido à modernização dos processos industriais e à necessidade de obter-se produtos de melhor qualidade e mais viáveis economicamente, existe uma grande procura por tecnologias alternativas que sejam econômica e tecnicamente mais viáveis que as técnicas convencionais. Neste sentido, a extração líquido-líquido é um campo tecnológico extremamente interessante.

Neste capítulo, será apresentado o processo de extração líquido-líquido. Será apresentado um breve histórico sobre este processo, serão comentados os campos de aplicação, os conceitos básicos envolvidos neste processo de separação e uma apresentação dos equipamentos empregados nestes processos.

I.2 - A Extração Líquido-Líquido

Uma situação, que é muito comum na Engenharia Química, é a separação dos constituintes de uma mistura líquida homogênea composta de dois ou mais componentes. Para realizar essa separação existem vários métodos cuja aplicação é limitada pelas características físicas e químicas dos reagentes a serem manuseados, pelos custos de operação do processo de separação e pelas condições disponíveis para a implantação do processo escolhido.

Dentre os principais métodos de separação, adotados industrialmente, destacam-se a destilação e a extração líquido-líquido.

A extração líquido-líquido é um processo que envolve a transferência de massa entre dois líquidos imiscíveis, tendo a capacidade de realizar separações que são impossíveis por outros métodos. Na extração líquido-líquido, a separação de um componente de uma solução líquida homogênea ocorre pela adição de um constituinte líquido, insolúvel ou parcialmente solúvel na solução, o solvente, no qual o componente a ser extraído da solução, o soluto, é preferencialmente solúvel. O soluto difunde-se no solvente com uma velocidade característica até atingir-se as concentrações de equilíbrio em cada uma das fases formadas. Este processo de separação é baseado na distribuição do soluto entre as duas fases e a miscibilidade parcial dos líquidos.

O conhecimento das relações de equilíbrio de fases é fundamental para análises quantitativas de processos de extração. As relações de equilíbrio de fases

são baseadas em princípios termodinâmicos e representadas por diagramas estabelecidos por leis de distribuição dos constituintes entre as fases.

I.2.1 - Aplicações

A escolha entre os métodos de separação é feita de acordo com aspectos econômicos e de características físicas e químicas dos componentes da mistura a ser separada.

Atualmente, a extração líquido-líquido é empregada nos casos onde um outro método de separação seja anti-econômico ou inviável, como nos casos em que os componentes são pouco solúveis, têm baixa volatilidade relativa, são sensíveis à temperatura requerida para a separação, têm pontos de ebulição próximos ou quando o componente desejado é pouco volátil e está presente em pequena quantidade na solução, formam azeótropo ou onde a separação por outros métodos tenha alto custo.

Quanto à viabilidade econômica dos processos que empregam a extração líquido-líquido, esta é fortemente influenciada pelos custos do equipamento e pelos custos de recuperação do solvente, já que a etapa de extração em si não exige grande consumo de energia. O custo de operação de um processo de extração líquido-líquido pode ser dividido em :

1- capital: custo do equipamento mais o inventário do material contido na planta;

2- operação : custo da operação do extrator, da recuperação do solvente e de qualquer reposição de solvente necessária devido às perdas.

O custo de operação de um extrator líquido-líquido (consumo de energia mais manutenção) é geralmente negligenciável comparado aos outros fatores.

O custo do equipamento e da recuperação do solvente são os principais fatores de custo [1].

Embora aplicada , com sucesso, há muito tempo como uma técnica de separação laboratorial, a nível industrial, sua utilização iniciou-se nas primeiras décadas do século XX, quando se procurava um método que resolvesse o problema da remoção de hidrocarbonetos aromáticos do querosene. Principalmente depois da Segunda Guerra Mundial, ela teve grande

desenvolvimento na indústria, alcançando 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 e também na separação de compostos aromáticos; além de ser usada em outros processos orgânicos e na indústria farmacêutica.

As aplicações industriais da extração líquido-líquido vêm desenvolvendo-se rapidamente. O primeiro processo utilizado na indústria do petróleo foi o processo EDELEANU [1,2]. Esta foi a primeira aplicação comercial de êxito da extração em refinis de petróleo e foi originalmente utilizada para eliminar compostos aromáticos das hulhas de petróleos da Romênia por tratamento com dióxido de enxofre líquido.

Na indústria farmacêutica, por exemplo, tem sido utilizada na extração de penicilina e na recuperação e separação de vitaminas. Outras aplicações vem sendo divulgadas, tais quais : tratamento de efluentes, recuperação de ácidos e extração de minérios [3].

Ultimamente, principalmente devido à crise energética e conseqüente necessidade de procurar alternativas mais viáveis economicamente para uma dada separação, a extração líquido-líquido vem sendo usada de maneira crescente. Isso torna-se evidente verificando-se o grande número de novos equipamentos desenvolvidos no campo da extração líquido-líquido e a sua utilização em muitas separações onde antes a destilação era usada.

Alguns fatores que vêm estimulando o desenvolvimento da extração líquido-líquido, atualmente, são :

- Perspectivas de economia de energia em comparação à destilação, quando um soluto estiver presente na solução em pequena quantidade ou quando for considerado “pesado”.
- Possibilidade de evitar a degradação de compostos, devido ao efeito da temperatura, que pode ser causada por processos de separação que fazem uso da energia térmica.
- Desenvolvimento de equipamentos de extração mais eficientes e que promovem um contato das fases líquidas mais efetivo.

- Melhor entendimento dos princípios para desenvolvimento, projeto e “scale-up” dos processos de extração [4].

Esses processos podem ser realizados de diversas formas por meio de vários tipos de equipamentos, mas sempre seguindo os mesmos princípios básicos de contato entre os líquidos, transferência de massa, equilíbrio de fases e separação das fases. Esta separação das fases comumente ocorre pelo processo de decantação.

1.3 - Conceitos Básicos

A extração líquido-líquido é uma operação de transferência de massa entre duas fases líquidas imiscíveis com diferentes potenciais químicos [5].

Num processo de extração líquido-líquido as seguintes denominações são usadas :

SOLUTO - é o constituinte a ser extraído e que se encontra dissolvido no diluente;

ALIMENTAÇÃO - é a solução constituída pela mistura soluto + diluente, a qual se deseja separar;

SOLVENTE - é o líquido destinado a extrair os constituintes (solutos) da solução;

DILUENTE ou **INERTE** - é o líquido no qual se encontram dissolvidos os solutos;

EXTRATO - é a fase líquida rica em solvente, que contém o soluto extraído dissolvido;

REFINADO - é a fase líquida pobre em solvente, que retém essencialmente o diluente ou inerte.

Os solventes utilizados devem ser compostos que tenham densidades diferentes da densidade da alimentação. Por esse motivo, as expressões “fase leve” e “fase pesada” são usadas para nomear as fases “extrato” e “refinado”. Assim, em processos simples de extração, o soluto passa da fase refinado para a fase extrato.

O processo de extração líquido-líquido ocorre em duas etapas. Na primeira etapa, promove-se o contato do solvente com a solução. Durante esta operação, o soluto aproxima-se do equilíbrio entre as duas fases. Na segunda etapa, as duas fases em equilíbrio, ou próximas a ele, separam-se. Essas duas etapas são desenvolvidas num extrator e constituem a unidade de extração.

Durante um processo de extração vários fenômenos acontecem no interior do extrator, sendo que alguns desses fenômenos prejudicam o processo de transferência de massa. Os fenômenos mais conhecidos são definidos abaixo.

“Holdup” - é a fração de retenção da fase dispersa, que é a razão do volume da fase dispersa pelo volume total do equipamento.

Inundação - é quando as condições de operação na coluna fazem com que seja impossível as correntes escoarem contracorrentemente e uma fase se dispersar na outra. Nessa situação, as correntes entram e saem da coluna numa mesma extremidade.

“Backmixing” (ou mistura axial) - é o retorno axial da fase dispersa. A fase dispersa escoar em sentido oposto ao esperado. Ele faz com que o gradiente de concentração que é a força-motriz da transferência de massa na coluna, diminua, prejudicando, assim, a taxa de transferência de massa e a eficiência de separação. A alta velocidade da fase contínua pode fazer com que esta carregue as gotas da fase dispersa em sentido oposto ao do escoamento dessa fase.

“Backflow” - é o retorno axial da fase contínua. Ocorre quando a fase contínua é carregada na direção oposta a esperada [6].

Alguns outros conceitos são bastante importantes no processo de extração líquido-líquido. Entre eles estão : a representação do equilíbrio (sistemas ternários) que se encontra no Anexo 2; curvas de distribuição e seletividade que se encontram no Anexo 3 e balanço material num processo de extração que se encontra no Anexo 4. No Anexo 5 são apresentados os critérios de escolha dos solventes.

I.4 - Equipamentos usados nos processos de extração

A escolha de um extrator é função da natureza dos produtos e das características físicas e químicas do sistema em estudo, além de ser função do desempenho do aparelho, considerando-se as condições de extração.

Num processo de extração, existem diversos fatores que influenciam o desempenho do extrator, principalmente em escala industrial. Portanto, é necessário um estudo em escala piloto para melhor definir as condições de operação da coluna.

A utilização de extratores verticais nos processos de extração líquido-líquido é justificada devido a esses equipamentos ocuparem pequena área, terem boa eficiência de separação e apresentarem facilidades de operação e manutenção.

Atualmente, são utilizados tanto equipamentos em estágios quanto equipamentos de contato contínuo.

Existe um grande número de tipos de extratores, que podem ser classificados de acordo com os princípios gerais de operação e construção.

Vários autores, entre eles Hanson [3], dividiram os extratores em duas categorias, de acordo com o tipo de contato entre as fases :

❶ Sistemas de contato e separação de fases em estágios

Nesta categoria, se enquadram os misturadores-decantadores.

Misturadores-decantadores : Estes sistemas são formados 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. Após isso, deixa-se decantar a fase mais densa e, então, faz-se a separação das fases antes delas passarem ao próximo estágio. Um esquema destes sistemas é mostrado na figura I.1 .

Nestes equipamentos, obtém-se altas eficiências de separação em cada estágio. 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.

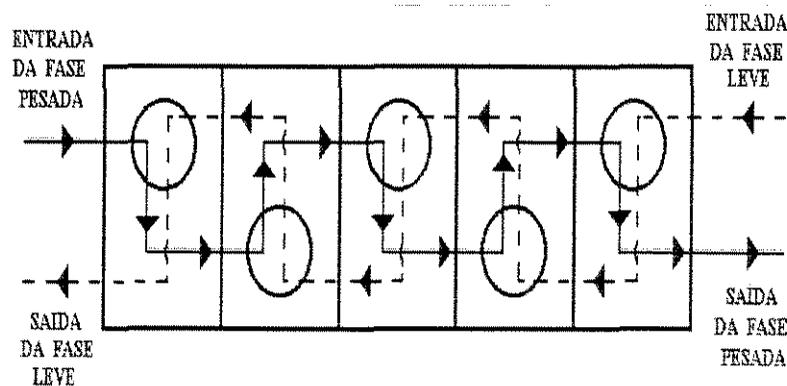


Figura I.1 - Esquema de um sistema de contato e separação em estágios (misturadores - decantadores)

② Sistemas de contato diferencial (contínuo)

A diferença essencial entre a operação em estágio e de contato contínuo pode ser resumida da seguinte forma: no caso da operação em estágios, o fluxo difusional de matéria entre as fases ocorre para reduzir a diferença de concentração que causa o fluxo. Se prosseguir por um tempo longo o suficiente, um equilíbrio é estabelecido, depois do qual nenhum fluxo difusional ocorre. A taxa de difusão e o tempo determinam a eficiência do estágio que pode ser alcançada numa certa situação. Por outro lado, na operação de contato contínuo, o afastamento do equilíbrio é mantido e o fluxo difusional entre as fases pode continuar sem interrupção. A escolha entre os métodos depende da eficiência que pode ser alcançada. Com alta eficiência, uma planta relativamente barata pode ser conseguida, cuja performance pode ser confiavelmente predita, usando-se a operação em estágios. Com baixa eficiência, contudo, os métodos de contato contínuo podem tornar-se mais desejáveis por razões de custo, principalmente.

Nos sistemas diferenciais, os líquidos escoam continuamente em contracorrente, sem misturadores ou decantadores intermediários, sendo que estes contadores são normalmente colunas verticais. O escoamento em contracorrente ocorre em função da diferença de densidade entre os líquidos em contato na coluna. A fase mais densa é alimentada no topo e flui de maneira descendente no interior da coluna e a fase menos densa é alimentada na base e flui em direção ao topo da coluna. As colunas de contato diferencial são equipamentos mais compactos e ocupam um menor espaço físico que os misturadores-decantadores.

Esta categoria pode ainda ser subdividida nas seguintes classes; de acordo com a maneira de promover-se a mistura das fases, como é mostrado abaixo :

A.1 - Colunas sem agitação mecânica e separação pela gravidade

- Contatores de múltiplos estágios, como por exemplo, as colunas de pratos perfurados. Na figura I.2 encontra-se um esquema de uma coluna de pratos fixos perfurados.

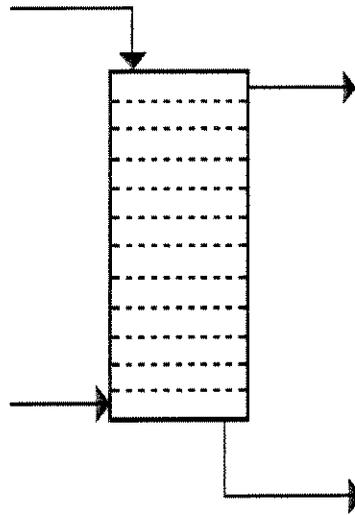


Figura I.2 - Esquema de uma coluna de pratos fixos perfurados

- Colunas Spray
- Colunas Recheadas

Na figura I.3 são mostrados os esquemas desses tipos de colunas.

A.2- Colunas com agitação mecânica e separação gravitacional

- Coluna de fluxo pulsado
- Coluna de pratos pulsados
- RDC
- Coluna Scheibel
- Coluna Oldshue-Rushton
- Coluna Kühni

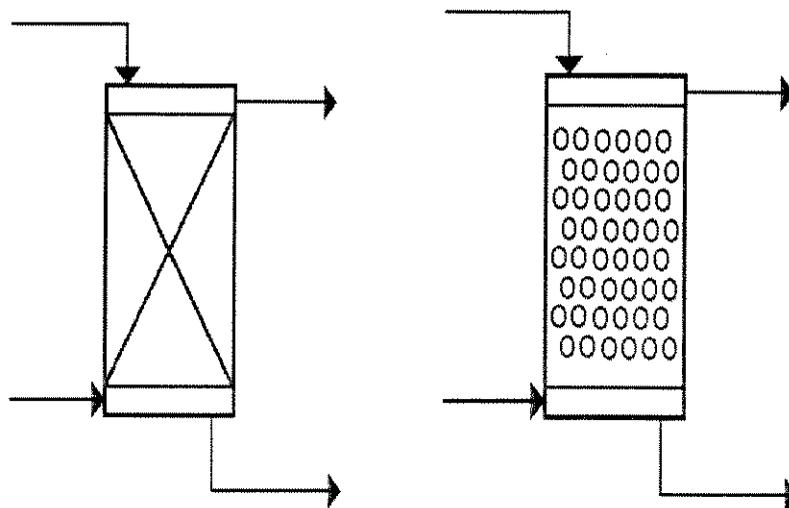


Figura I.3 - Esquema de colunas recheadas e colunas "Spray", respectivamente

A.3- Contatores Centrífugos

- Extrator Podbielniak
- Extrator Luwesta
- Extrator de Laval

Nos equipamentos da classe A.1, a forma de promover o contato entre as fases, e portanto a transferência de massa é a ação da força gravitacional, devido à diferença de densidades entre as duas fases. São os mais simples dos extratores diferenciais usados na extração líquido-líquido. Eles apresentam baixo custo de instalação e manutenção e ocupam reduzido espaço físico. A principal desvantagem é a baixa eficiência de separação que é obtida.

Nos extratores da classe A.2, além da força da gravidade, tem-se a ação da agitação causada mecanicamente que pode ser empregada através de pulsações ou sistemas rotativos.

Nas colunas pulsadas, além da força da gravidade existe a ação da agitação causada pelas pulsações, agindo conjuntamente como força-motriz para a transferência de massa na coluna. Nestes equipamentos a eficiência de separação cresce bastante em relação aos equipamentos da classe anterior. A

principal desvantagem é o alto consumo de energia necessário para produzir as pulsações. Na figura I.4 se encontra um esquema das colunas pulsadas.

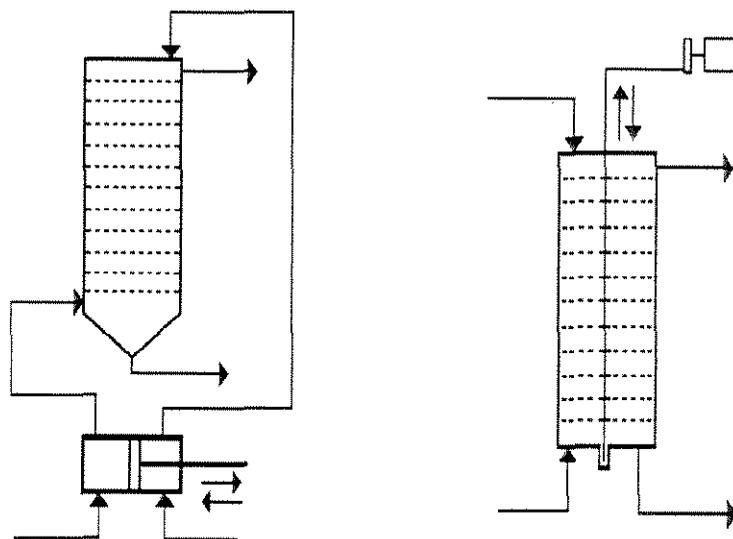


Figura I.4 - Esquema de colunas de fluxo pulsado e de pratos pulsados, respectivamente

Nas colunas agitadas mecanicamente por meio de sistemas rotativos, a força da gravidade atua em conjunto com a energia introduzida por esses sistemas de rotação, que podem ser : discos rígidos ou perfurados, pás, turbinas, etc. O grau de dispersão, e portanto, o grau de transferência de massa é bastante elevado em comparação aos equipamentos sem agitação mecânica. Na figura I.5 se encontra um esquema para este tipo de colunas.

Os equipamentos da classe A.3 utilizam a força centrífuga como força-motriz para a transferência de massa. Eles são de desenvolvimento mais recente e possuem alta eficiência de separação e ocupam reduzido espaço físico. A desvantagem é o seu alto custo de implantação.

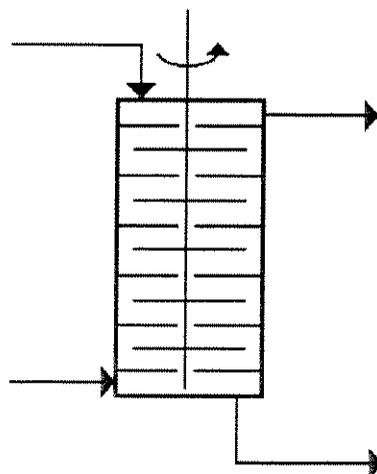


Figura I.5 - Esquema de colunas agitadas mecanicamente por discos rotativos (RDC)

A classificação dos extratores, segundo Hanson [3], é apresentado na tabela I.1 .

O equipamento desenvolvido neste trabalho é uma coluna mecanicamente agitada através de palhetas rotativas, portanto enquadra-se na classe A.2. O equipamento que mais se assemelha a esta coluna, de acordo com a literatura é o RDC (Contator de Discos Rotativos).

Tabela I.1 - Classificação dos equipamentos de extração, segundo Hanson [3].

Tipo de agitação	Contato com separação de fases	Contato Contínuo
Sem Agitação		<ul style="list-style-type: none"> -coluna de "Spray" - coluna de chicanas - coluna recheada - coluna de pratos perfurados
Aparelho Agitado por Rotação	<ul style="list-style-type: none"> - Holley-Mott - misturador-decantador simples - misturador-decantador com bomba - centrífuga de estágio individual - misturador-decantador tipo cascata 	<ul style="list-style-type: none"> - coluna Scheibel - coluna Oldshue-Rushton - contator de discos rotativos - coluna misturadora multi-estágio
Com Pulsação	<ul style="list-style-type: none"> - misturador-decantador com pulsação 	<ul style="list-style-type: none"> - coluna recheada com pulsação - coluna de pratos perfurados pulsados - coluna de fluxo pulsado com pratos perfurados

CAPÍTULO II

ANÁLISE DA LITERATURA

II.1 - Introdução

No capítulo anterior realizou-se um resumo sobre os princípios básicos envolvidos nos processos de extração líquido-líquido, além de ter sido feito um estudo dos principais tipos de equipamentos usados nesses processos.

Neste capítulo, será feita uma análise da literatura disponível sobre este assunto, focalizando principalmente, métodos de análise usados para avaliar esses processos, e em especial, os contadores de discos rotativos.

Não há nada publicado sobre o extrator de palhetas rotativas que foi desenvolvido neste trabalho, por isso o contador de discos rotativos (RDC) foi escolhido como alvo da pesquisa bibliográfica por ser este, o extrator que possui as características mais próximas ao que foi desenvolvido neste trabalho.

Neste capítulo será feita uma análise qualitativa dos fenômenos e apresentados os principais trabalhos realizados nessa área. A análise dos modelos desenvolvidos para estudos quantitativos se encontra no capítulo IV.

II.2 - Princípios da transferência de massa na extração líquido-líquido

Em equipamentos de extração líquido-líquido, em contracorrente, a transferência de massa ocorre numa dispersão de gotas que fluem pela gravidade através da fase líquida contínua, sendo o contador de discos rotativos um exemplo desses equipamentos [8].

A mudança da concentração numa gota, numa dada parte da coluna, é dependente da diferença de densidades, do coeficiente de transferência de massa, da área interfacial e do tempo de contato, sendo que todas essas variáveis dependem do diâmetro das gotas. A concentração nas gotas menores é mais próxima ao equilíbrio do que nas gotas maiores devido ao maior tempo de residência e maior área interfacial dessas gotas [8].

Segundo Hanson [6], em extratores comerciais, a transferência de massa ocorre entre a fase contínua e as gotas. Experimentalmente, foi verificado que o tamanho médio das gotas para sistemas aquosos-orgânicos normais, sob condições turbulentas é muito pequeno, estando entre 0,01 mm e 0,10 mm de diâmetro.

Em sistemas líquido-líquido, o aumento da agitação, inicialmente causa um aumento da área interfacial (através da diminuição no tamanho das gotas) e assim, aumentando a taxa de transferência de massa. Porém, isso não acontece indefinidamente. Primeiramente, há um limite para o aumento da área interfacial que pode ser obtida. Em segundo lugar, abaixo de um certo tamanho de gotas, estas começam a se comportar como esferas rígidas sem circulação interna, resultando no fato que a transferência de massa nas gotas ocorre apenas pelo lento processo de difusão molecular. Em terceiro lugar, após um certo ponto, o aumento na agitação pode começar a suprimir a interação gota-gota, reduzindo a mistura na fase dispersa e também a taxa de transferência de massa [6].

Há, portanto, um grau ótimo de agitação que fornece a taxa de transferência de massa máxima. Isso sem considerar a subsequente separação das fases.

Segundo Hanson [1], a coalescência das gotas da fase dispersa numa fase contínua é fundamental para ocorrer a separação das fases. Em geral, quanto menor o tamanho das gotas, mais lenta é a coalescência. Quanto menores forem as gotas, maior será a tendência da solução emulsificar.

Um outro fenômeno que pode ocorrer com o aumento da turbulência, é o “backmixing” (retorno axial da fase dispersa), que é um desvio do padrão de escoamento ideal. Ele pode ser detectado estudando-se a distribuição de tempos de residência. Geralmente, os contadores diferenciais são mais sujeitos ao “backmixing” [1].

II.3 - O Contator de Discos Rotativos

Uma maneira de melhorar a transferência de massa, aumentando a área interfacial entre as fases e diminuindo o tamanho das gotas é através de colunas mecanicamente agitadas. Há várias formas de promover a agitação numa coluna, estas podem ser por pulsações ou dispositivos rotativos.

Entre as colunas que utilizam sistemas rotativos se encontram os contadores de discos rotativos (RDC).

Entre os equipamentos que trabalham em contracorrente, o RDC tornou-se uma alternativa atrativa, quando comparado a outros equipamentos convencionais de separação líquido-líquido. Entre as vantagens deste

equipamento, estão o aumento do grau de dispersão e da eficiência de uma certa separação devido à agitação mecânica imposta aos discos.

Segundo Reman [9], o equipamento consiste de um cilindro vertical do qual a zona de extração é dividida em compartimentos idênticos por discos anulares estacionários, os discos fixos. Além destes, há discos rotores, sendo que cada compartimento possui um destes discos. Esses discos são fixos a um eixo que é coaxial ao tubo. Os discos rotores são fixos de maneira a estarem no meio de cada compartimento. O diâmetro dos discos rotores é sempre menor que o diâmetro de abertura dos discos fixos.

Quanto ao escoamento dos líquidos nos compartimentos do contator, nota-se teórica e experimentalmente que : as forças centrífugas produzidas pela rotação dos discos rotores induzem, próximo aos discos rotores um escoamento de líquidos a partir do eixo do rotor em direção à parede do tubo, e próximo aos discos fixos um escoamento de líquidos a partir da parede do tubo em direção ao eixo rotor. Além disso, há uma rotação do líquido em torno do eixo rotor. Então, o escoamento de líquido resultante é toroidal.

Um esquema desse equipamento pode ser visto no Capítulo I , figura I.5.

II.4 - Estudo da transferência de massa em extratores líquido-líquido

Murphree [10] apresentou uma equação para a determinação da eficiência de separação, para uma mistura de vários componentes. Esta equação é expressa da seguinte forma :

$$E^* = \frac{y_1 - y_2}{y_1 - y_2^*} \quad (II.1)$$

Esta equação representa a relação entre a eficiência obtida no equipamento (eficiência real) e a que seria obtida se o tempo de contato fosse suficiente para se atingir o equilíbrio (eficiência ideal). Esta equação é muito importante para fins de comparação e projeto de equipamentos de extração.

Reman [9] apresentou um trabalho sobre o contator de discos rotativos, operando com vários sistemas líquidos, onde a eficiência global do

processo foi obtida dividindo-se o número de estágios de equilíbrio pelo número de compartimentos e multiplicando-se o resultado por cem.

Ele verificou que a eficiência era proporcional à velocidade do rotor e que a eficiência aumentava com o aumento do diâmetro dos discos rotores. A eficiência também aumenta com o aumento da altura dos compartimentos e diminui com o aumento do diâmetro de abertura dos discos fixos.

Pelos resultados obtidos, o autor concluiu que o RDC pode ser usado para vários sistemas líquidos mesmo aqueles com tendência a emulsificar.

Quantitativamente, dobrando-se a velocidade de rotação dos discos, dobrava a eficiência.

Para o sistema MIBK-água-ácido acético, para velocidades de 875 rpm e razão entre as vazões de 6, a eficiência estava em torno de 18 %, para velocidades de 1825 rpm e a mesma razão entre as vazões das fases, ela chegava a aproximadamente 39 %. A eficiência aumentava com o aumento da razão entre as vazões das fases.

Smoot e Babb [11] sugerem o uso do número de unidades de transferência para a avaliação da eficiência. O número de unidades de transferência é dado pela equação :

$$NUT = \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{x^* - x} \quad (II.2)$$

Se a mistura longitudinal for grande, o valor calculado pode não representar a realidade, já que essa equação foi derivada, baseada num escoamento pistão.

Iannou [12] comparou os dados de transferência de massa e potência consumida, para uma coluna com pratos pulsantes de pequenos furos e pequena área livre com os dados existentes para outra coluna com furos e área livre grandes.

Nos experimentos realizados por este autor, foi utilizado o sistema água-ácido acético-metil isobutil cetona, na qual o ácido acético foi transferido da fase orgânica para a água. Os experimentos foram realizados, considerando numa primeira etapa o metil isobutil cetona como fase dispersa e numa segunda etapa a água como a fase dispersa. Observou-se neste trabalho, que altura

equivalente a um estágio teórico aumentava com o aumento da razão de fluxo da fase contínua e com o aumento de espaçamento entre os pratos, no entanto, este valor decrescia com o aumento da razão de fluxo da fase dispersa.

O trabalho apresentado por Khemangkorn, Molinier e Angelino [13] foi sobre a análise da influência da direção de transferência de massa em vários parâmetros, que afetam a performance e a eficiência de uma coluna de fluxo pulsado.

A eficiência global foi determinada para algumas séries de experimentos, onde a concentração do soluto na entrada e saída da seção de extração foram medidas depois do equilíbrio ter sido estabelecido. Observou-se que a direção de transferência de massa tem muito pouco efeito sobre a altura de uma unidade transferência .

Laddha, Degaleesan e Kannapan [14] realizaram um estudo da transferência de massa e da hidrodinâmica num contator de discos rotativos . Neste trabalho, foram apresentadas equações para o estudo da transferência de massa relacionadas ao diâmetro das gotas.

Neste trabalho os autores propuseram que as correlações para a transferência de massa num contator de discos rotativos são, no geral funções da seguinte relação :

$$N^3 d_R^5 / Z_c d_T^2$$

onde N é a velocidade de rotação, d_R é o diâmetro do disco rotor, d_T é o diâmetro da coluna e Z_c é a altura do compartimento usando-se unidades coerentes para todas as medidas. Esta relação foi primeiramente proposta por Reman e Olney.

O desempenho de um contator de discos rotativos com saia perfurada (RDCS) foi estudada por Kawase [15], em escala piloto. Os dados obtidos para este equipamento foram examinados usando a correlação proposta para uma coluna de discos rotativos. Foram realizados estudos sobre a eficiência de extração, na qual as concentrações das fases no topo e no fundo da coluna foram medidas. O cálculo da eficiência de extração neste equipamento, foi realizado usando a seguinte equação :

$$E_K = \frac{C_1 - C_2}{C_1} \quad (II.3)$$

O sistema usado foi querosene-o-cresol-água. No RDC, a velocidade do rotor governa a intensidade de turbulência e esta controla o tamanho das gotas dispersas. Korchinsky et al. [16,17,18] indicaram que a grande variação no tamanho das gotas observada num RDC, tem uma significativa influência na eficiência de extração.

A eficiência de extração para o RDCS é maior que para o RDC. Aumentando-se a razão entre as fases, aumenta a eficiência de extração até um máximo e depois começa a diminuir; sendo que este máximo se encontra em 0,35, sendo este o valor da razão. A eficiência por metro de coluna foi de aproximadamente 0,6 para o RDCS e de 0,3 para o RDC.

Neste trabalho, o autor verificou que o RDCS produz gotas de tamanhos mais uniformes e que a influência da velocidade de rotação é mais significativa neste equipamento que nas colunas de discos rotativos. Um estudo mais sistemático em diferentes tamanhos deste tipo de equipamento é desejável.

Coimbra [19] realizou um estudo da eficiência de extração em colunas de discos rotativos na purificação do ácido láctico. O sistema usado foi água-ácido láctico-álcool isoamílico. Nos experimentos foi analisada a influência da velocidade de rotação, do número de discos rotativos, da área livre de escoamento e razão solvente/alimentação sobre a eficiência de extração.

A eficiência foi estudada através das equações propostas por Murphree e Kawase. A autora obteve os seguintes resultados : o aumento da eficiência com o aumento da velocidade de rotação, da área livre de escoamento e da razão solvente/alimentação para as eficiências calculadas por ambas as equações. Quantitativamente, ela obteve para a eficiência de Murphree valores de 30% a 85% e para a eficiência de Kawase valores de 15% a 40%. Os dados de equilíbrio foram obtidos experimentalmente.

Perazolli [20] realizou o estudo de uma coluna de extração de discos rotativos perfurados, com variações na geometria, tais quais número de discos e área das perfurações e variações na velocidade de rotação e razão entre as fases, para o sistema água-ácido acético-butanol.

O autor usou a definição da eficiência dada por Murphree nas análises. Os cálculos de equilíbrio foram realizados através de um programa de computador. Ele obteve maiores eficiências com maiores áreas livres de escoamento e também, aumento na eficiência com o aumento na velocidade de

rotação até o ponto onde a resistência imposta ao escoamento pelos discos é tal que ocorre o retorno axial da fase contínua e a inundação. O valor máximo da velocidade situou-se em 200 rpm.

Foi observado que a eficiência aumenta com o aumento da razão entre as fases contínua e dispersa (contínua/dispersa). Quantitativamente, eficiências da ordem de 85% a 90% foram obtidas, nas melhores condições operacionais.

O trabalho desenvolvido por Duarte, Malmay e Molinier [21], para uma coluna pulsada de discos e coroas teve como objetivo estudar a eficiência, através da determinação da altura equivalente a um estágio teórico. O sistema utilizado foi água-ácido málico-álcool amílico, sendo que a transferência de massa se realizou da fase contínua (água) para a fase dispersa (álcool amílico).

A eficiência de Murphree foi utilizada para avaliar o comportamento da transferência de massa na coluna, sendo que os dados de equilíbrio para este sistema foram determinados experimentalmente. O número de estágios teóricos, foi calculado pela expressão proposta por Treybal e apresentada no capítulo IV, e conseqüentemente a determinação da altura equivalente a um estágio teórico.

Quantitativamente, a razão entre as fases que fornece os melhores resultados é 8,5 (S/F), obtendo-se eficiências superiores a 90% para (a.f) igual a 0,9 cm /s, onde a.f é a multiplicação da amplitude pela frequência das pulsações. Verifica-se que há um aumento da eficiência com o aumento da velocidade até um máximo, a partir de onde esta começa a diminuir. Para a altura equivalente a um estágio teórico, ocorre uma queda seguida de um aumento, nas mesmas condições. Valores da altura equivalente a um estágio teórico de 0,65 m foram obtidos, nos casos de maior eficiência.

CAPÍTULO III

MONTAGEM E PROCEDIMENTO

EXPERIMENTAL

III.1 - Introdução

Neste capítulo é apresentada a montagem experimental utilizada neste trabalho. São apresentados detalhes da montagem da coluna de extração agitada por palhetas rotativas e o procedimento experimental adotado para a obtenção dos resultados experimentais.

O procedimento experimental constitui-se basicamente em medir as concentrações de ácido acético nas correntes de alimentação e nas correntes de saída, através de titulação com hidróxido de sódio (NaOH).

III.2 - Descrição do Equipamento

A coluna de extração agitada por palhetas rotativas que está sendo desenvolvida é mostrada na figura III.1 .

Esta coluna possui 85 cm de altura e diâmetro interno de 5,6 cm. Ela é formada por 5 tubos de vidro de 5,6 cm de diâmetro interno e 6 cm de diâmetro externo; cada tubo tem 15,9 cm de comprimento (altura). Esses tubos são conectados através de flanges de PVC (Policloreto de Vinila) fixados em suas extremidades, que possuem 6 cm de diâmetro interno, 10,7 cm de diâmetro externo e 1 cm de espessura. Em uma das extremidades o flange atua como um distribuidor, pois este possui dimensões semelhantes ao outro, bem como um furo no centro por onde passa a haste de PVC que conecta as palhetas ao sistema de rotação e num raio de 2,3 cm a partir do centro e ao redor do furo central foram feitos 18 furos com 0,5 cm de diâmetro para cada furo. Em cada ponto de junção, colocou-se uma vedação de borracha entre as flanges a fim de melhorar a junção e com isso evitar vazamentos. Estas vedações de borracha possuem dimensões semelhantes às dos flanges. Os flanges e os aros de borracha são unidos por 6 parafusos.

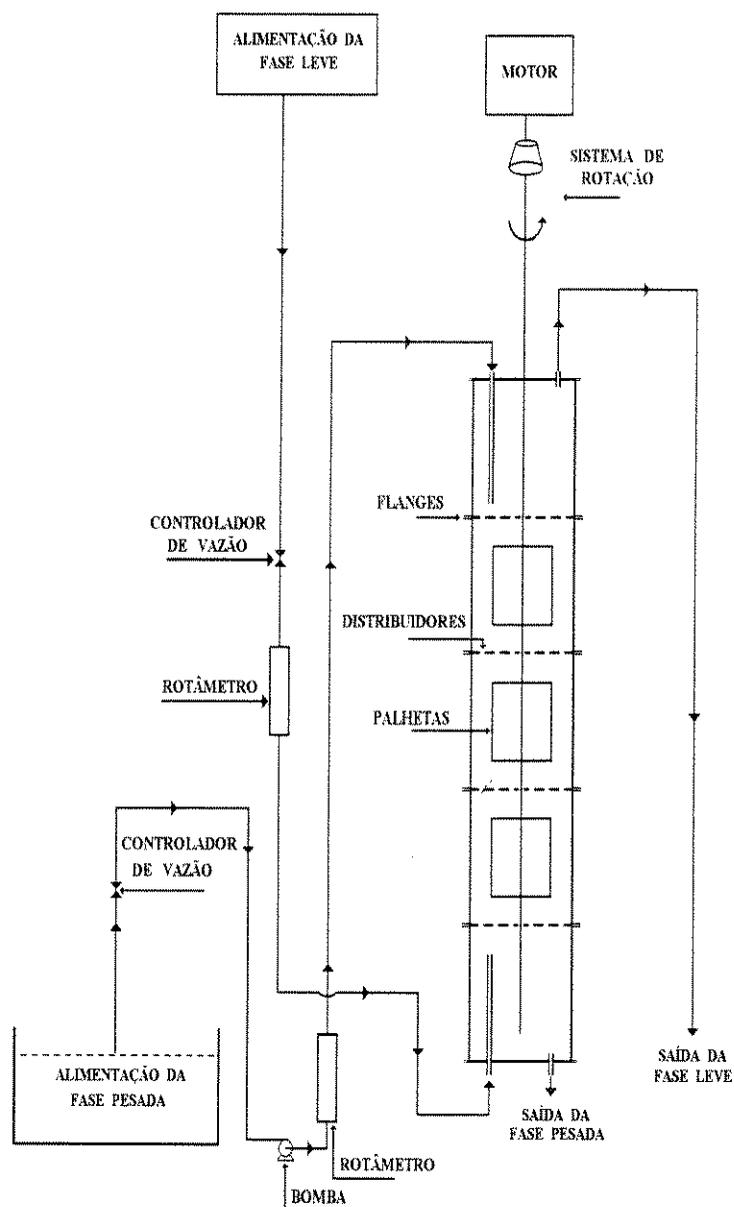


Figura III.1 - Coluna de Extração Agitada por Palhetas Rotativas

Pode-se considerar que a coluna é formada por 5 seções. As seções superior e inferior são as seções de alimentação e retirada das correntes líquidas. As demais seções são as seções de mistura. Neste equipamento tem-se 3 seções de mistura, sendo que em cada uma destas existe um conjunto de duas palhetas, presas numa haste, formando um ângulo de 180° de uma em relação a outra, formando o sistema que promove a agitação na coluna. As palhetas e a haste são de PVC. As palhetas têm 10 cm de altura; 1,8 cm de largura e 0,6 cm de espessura. Estas possuem uma largura suficiente para que elas fiquem próximas às paredes da coluna, a fim de garantir que todo o líquido esteja sendo agitado e com isso minimizar a formação de 'zonas mortas', próximas às paredes da coluna.

Uma das características geométricas, que foi variada nos experimentos, é a área livre das palhetas. A primeira configuração usada possuía a área livre das palhetas igual a 0 %, isto é, os agitadores eram formados por palhetas compactas. A segunda configuração possuía a área livre das palhetas igual a 14 %. Cada palheta possuía 14 % de área livre obtidos através de 8 furos de 0,63 cm de diâmetro cada um.

A haste, na qual as palhetas estão presas, é conectada a um motor de 12 volts, que proporciona a velocidade de rotação, a qual é controlada por um regulador de tensão ("dimmer") e medida por meio de um tacômetro digital sem contato. A velocidade de rotação é transmitida para as palhetas através de duas roldanas com diferentes diâmetros, sendo a de menor diâmetro conectada ao motor e a de maior diâmetro conectada à haste de PVC, a qual transmite a rotação às palhetas. A ligação entre as duas roldanas é feita por meio de uma correia de borracha. Este sistema permite o estudo de operações a baixas velocidades de rotação. A medida da velocidade de rotação é baseada na roldana de maior diâmetro, sendo esta a velocidade que realmente é transmitida às palhetas.

A alimentação da fase contínua (água) é realizada usando-se uma bomba e a alimentação da fase dispersa (n-butanol) é realizada usando-se a força da gravidade. A medida das vazões de alimentação são realizadas através de rotâmetros previamente calibrados.

Os dados referentes à calibração destes rotâmetros são apresentados no Apêndice A.

III.3 - Procedimento Experimental

III.3.1 - Introdução

Com o objetivo de estudar a transferência de massa na coluna, já apresentada, e sabendo-se que em geral este estudo é realizado através da avaliação da eficiência e do NUT (número de unidades de transferência); necessita-se medir as concentrações das fases leve e pesada na entrada e na saída da coluna. As equações que são usadas neste estudo serão apresentadas no próximo capítulo.

III.3.2 - Sistema Líquido Ternário

O sistema líquido ternário escolhido para a realização deste trabalho foi o sistema : n-butanol - ácido acético - água, que forma um sistema ternário tipo I. Um esquema da representação desse sistema em diagrama ternário se encontra na figura III.2. Optou-se por este sistema porque a relação entre as densidades e solubilidades da água e do n-butanol é adequada à extração líquido-líquido, bem como o ácido acético que é o soluto utilizado, é solúvel na água e no butanol. As concentrações do ácido acético podem ser determinadas por titulação simples em ambas as fases formadas durante a operação da coluna, as propriedades físicas e químicas e os dados de equilíbrio dos três componentes são conhecidos e facilmente encontrados na literatura e também, a curva de equilíbrio do sistema pode ser determinada teoricamente. Além disso, os componentes do sistema são economicamente viáveis.

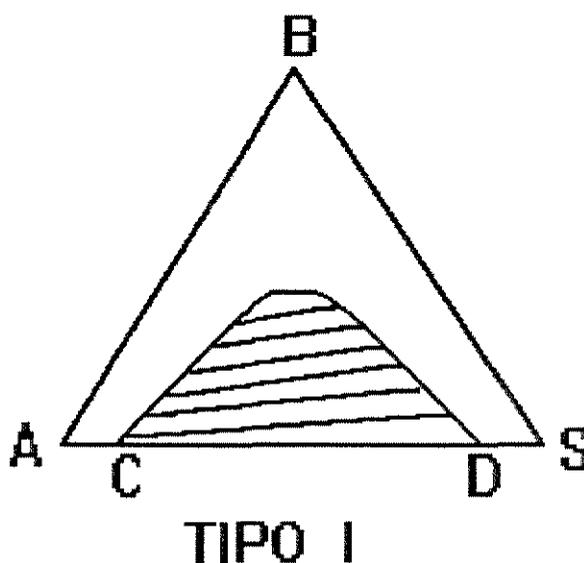


Figura III.2 - Esquema de um diagrama ternário para um sistema tipo I

No anexo 2 os sistemas ternários são comentados e a classificação dos mesmos é apresentada.

Nos experimentos realizados neste trabalho, o soluto foi adicionado à fase dispersa, que no caso é o n-butanol. Optou-se por introduzir o soluto nesta fase devido às dificuldades na purificação e reaproveitamento do n-butanol e também por facilitar a operação, já que esta fase não passa através de bombas para ser introduzida na coluna, pois o ácido é corrosivo ao material que constitui a bomba e isso afeta o funcionamento da mesma após um certo período de operação.

O sistema é distribuído da seguinte maneira :

Água - fase contínua (solvente)

n-butanol + ácido acético - fase dispersa

Ácido Acético - soluto

O n-butanol é pouco miscível na água e vice-versa.

A água foi utilizada como fase contínua, que foi alimentada no topo da coluna com vazão controlada e a fase dispersa, constituída por n-butanol e ácido acético, foi alimentada por meio da força da gravidade na base da coluna, também com vazão controlada. As fases contínua e dispersa entram em contato no interior da coluna, onde ocorre a transferência de soluto entre as fases. As fases que deixam a coluna são : extrato, que é constituído principalmente por água (solvente) e ácido acético (soluto) extraído da fase dispersa; esta fase sai da coluna pela base e segue para um reservatório para posterior tratamento ou eliminação e refinado, que é a fase rica em n-butanol e que apresenta também o ácido acético que não foi extraído, a qual sai da coluna pelo topo e segue para outro reservatório para ser recuperado ou armazenado.

O estudo da transferência de soluto neste trabalho foi realizado da fase dispersa para a contínua devido, principalmente a fatores econômicos e operacionais. Sendo que fatores econômicos, principalmente, justificam o fato do n-butanol ser a fase dispersa e não a contínua.

A concentração de ácido acético na alimentação (fase dispersa) se encontra na faixa de aproximadamente 2 % (em massa). A fase contínua (água) era isenta de ácido acético.

III.3.3 - Operação da Coluna

Para a operação da coluna, com a finalidade da obtenção de dados relativos à transferência de massa, deve-se seguir o seguinte procedimento :

Primeiro, enche-se a coluna com a fase contínua (água). Após preenchida toda a coluna, ajusta-se a vazão, através da regulagem do rotâmetro para o valor desejado. Depois regula-se a vazão de saída de modo que esta seja igual à vazão de entrada. Isto é feito, observando-se o nível de líquido no topo da coluna (este deve ser mantido constante).

A seguir, aciona-se o sistema de rotação e ajusta-se a velocidade de rotação no valor desejado. Posteriormente inicia-se a alimentação da fase dispersa (n-butanol e ácido acético), com vazão controlada também por um rotâmetro no valor desejado.

Após este procedimento, deixa-se a coluna operando por aproximadamente 5 minutos, tempo suficiente para a coluna atingir o estado estacionário, quando as concentrações de saída não variam com o tempo. Esse tempo foi medido experimentalmente, fazendo-se medidas da concentração de tempos em tempos, até a concentração se tornar constante, o que significa que o estado estacionário foi atingido.

Após este tempo, coleta-se amostras nas saídas das fases extrato (fundo da coluna) e refinado (topo da coluna) e determina-se as vazões de saída da coluna. As amostras são, então, pesadas e tituladas com uma solução de hidróxido de sódio (NaOH) com concentrações de 0,1N e 0,01 N; dependendo da concentração de ácido acético nas amostras a serem analisadas. Usa-se fenolftaleína como indicador na titulação.

Os dados experimentais relativos à concentração encontram-se no Apêndice D.

Com as medidas das vazões de saída (extrato e refinado), das vazões de entrada e concentrações de soluto em cada uma destas correntes, faz-se os balanços de massa globais e por componentes da coluna. Corridas com erros de balanço acima de 20 % foram desprezadas.

Os resultados obtidos serão analisados no capítulo VI. Este trabalho concentra-se no estudo e análise da eficiência e do índice de recuperação do soluto, para este sistema ternário, nesta coluna.

III.4 - Variáveis Estudadas

Neste trabalho analisa-se a influência de algumas variáveis geométricas e operacionais sobre a transferência de massa, na coluna apresentada anteriormente.

Na tabela abaixo são apresentadas as variáveis que serão avaliadas e seus respectivos valores :

Tabela III.1 - Variáveis estudadas neste trabalho

VARIÁVEIS ESTUDADAS	VALORES ASSUMIDOS
Área Livre das Palhetas (%)	0; 14
Vazão Total de Alimentação (ml/s)	5,5 ; 7,0 ; 8,5
Razão entre as Vazões de Alimentação	9; 6; 3; 1
Velocidade de Rotação (rps)	0; 1; 2; 3; 4

Obs. : rps = rotações por segundo

A razão entre as vazões de alimentação é V_c/V_d (Vazão da fase contínua / Vazão da fase dispersa).

CAPÍTULO IV

*TRANSFERÊNCIA DE MASSA
NUM PROCESSO DE EXTRAÇÃO
LÍQUIDO-LÍQUIDO*

IV.1 - Introdução

É de fundamental importância no estudo de um processo de extração líquido-líquido ou de um extrator em particular, a avaliação da transferência de massa no interior desse equipamento.

O estudo da transferência de massa num extrator visa principalmente avaliar o quanto o sistema se aproxima do equilíbrio. Com este estudo, pode-se definir um limite ideal de operação para o extrator.

Sabe-se que num processo de extração líquido-líquido, o processo de transferência de massa é governado, principalmente, pela difusão [22].

A transferência de massa num extrator é avaliada pelo número de estágios teóricos (NET) requeridos para se conseguir uma dada extração. A eficiência, numa coluna de extração, pode também ser expressa em termos de unidades de transferência de massa (NUT).

Da análise de trabalhos publicados, observou-se que os estudos de transferência de massa relacionam-se, principalmente, à análise do diâmetro médio de gotas, número de estágios teóricos, altura equivalente a um estágio teórico, coeficientes de transferência de massa e número de unidades de transferência de massa.

Assim, neste capítulo serão apresentados os princípios básicos da transferência de massa em processos de extração líquido-líquido, como também meios de representar a eficiência nestes processos.

IV.2 - Princípios da transferência de massa

Quando um sistema contém dois ou mais componentes cujas concentrações variam de ponto a ponto no sistema, há uma tendência natural à massa ser transferida, minimizando as diferenças de concentração no sistema, já que de acordo com a segunda lei da termodinâmica, sistemas que não estão em equilíbrio tendem a alcançar o equilíbrio com o tempo. O transporte de um constituinte de uma região de maior concentração para outra de menor concentração é chamado “transferência de massa”.

A transferência de massa tem um importante papel em muitos processos industriais, tais como: a remoção de poluentes das correntes de descarga de uma planta por extração ou absorção, a difusão de substâncias adsorvidas nos poros de carvão ativado, a taxa de reações químicas ou biológicas catalisadas são alguns exemplos típicos.

A transferência de massa, ocorre tanto pelo mecanismo molecular quanto pelo mecanismo convectivo. Estes mecanismos têm se mostrado diretamente dependentes do gradiente de concentração das espécies difundindo-se numa fase. Quando o equilíbrio é estabelecido, o gradiente de concentrações e, por sua vez, a taxa de difusão das espécies, tornam-se zero na fase. A transferência entre duas fases requer um afastamento do equilíbrio, o qual deve existir entre as concentrações médias ou nas concentrações no seio de cada fase.

O mecanismo de transferência de massa depende da dinâmica do sistema no qual ela ocorre. Massa pode ser transferida por movimento molecular randômico em fluidos sem movimento, ou pode ser transferida de uma superfície a outra, num fluido em movimento, ajudado pelas características dinâmicas do escoamento. O primeiro caso é característico da transferência de massa molecular e o segundo caso é característico da transferência de massa convectiva.

Por volta de 1815, Parrot observou qualitativamente que numa mistura gasosa que contém duas ou mais espécies moleculares, cujas concentrações relativas variam de ponto a ponto, um processo aparentemente natural resulta, o qual tende a diminuir quaisquer diferenças de composição. Esse transporte de massa, independente de qualquer convecção no sistema, é definido como “difusão molecular”.

A transferência de massa devido à convecção, envolve a transferência entre um fluido em movimento e uma superfície ou entre dois fluidos relativamente imiscíveis, em movimento. Este modo de transferência depende das propriedades de transporte e das características dinâmicas do fluido escoando.

No próximo item serão analisados alguns mecanismos de transferência de massa na interface entre duas fases.

IV.2.1 - Difusão na fase líquida

Existem dois tipos de movimentos de fluidos conhecidos, o laminar e o turbulento. No escoamento laminar, o fluido escoar em lâminas ou camadas; não existe mistura macroscópica de camadas adjacentes de fluido. No escoamento

turbulento, o movimento do fluido é caracterizado por perturbações de velocidades adicionais sobre o fluido principal, resultado de uma mistura interna.

A difusão em um fluxo laminar ocorre sempre quando diferentes concentrações são estabelecidas, e como resultado, origina-se um movimento dos constituintes, transversal ao fluxo, e também um movimento sobre as camadas do fluido [5].

Quando a transferência de massa ocorre num fluido turbulento, ocorre a difusão turbilhonar além da difusão molecular, obtendo-se a seguinte expressão:

$$N_B = -(D_L + E_D) \frac{\partial y_B}{\partial z} \quad (\text{IV.1})$$

onde : E_D é a difusividade turbilhonar, N_B é a velocidade molar de difusão por unidade de área, D_L é a difusividade do soluto (B) na fase líquida, y_B é a concentração molar do soluto e z é a distância na direção da difusão.

A resolução desta equação é difícil porque E_D é função dos padrões de fluxo, da distância z , e das propriedades do fluido. Por esta razão, têm-se desenvolvido modelos simplificados para soluções aproximadas de casos onde a transferência de massa ocorre em condições turbulentas, [23].

IV.3- Mecanismos de transferência de massa na interface entre duas fases

Em processos de extração líquido-líquido, a transferência de soluto para o solvente, ocorre na fronteira entre as duas fases, através da interface. Supondo-se que nenhuma substância permaneça acumulada na interface, a velocidade de transferência de massa deve ser a mesma nos dois lados da interface, de forma a serem proporcionais às resistências existentes em cada fase. Se não houver qualquer resistência à transferência na interface, as concentrações de ambas as fases serão relacionadas entre si pela condição de equilíbrio de fases [23].

Vários mecanismos vêm sendo sugeridos para representar as condições na região de fronteira entre as fases. O mais antigo é dado pela “Teoria dos Dois Filmes”, proposta por Whitmann em 1923 [24]. Ele sugeriu que a resistência à transferência em cada fase estaria situada num filme fino junto à

interface. A transferência através destes filmes é vista como um processo estacionário de difusão molecular obedecendo a seguinte equação :

$$N_B = -D_L \frac{\partial y_B}{\partial z} \quad (\text{IV.2})$$

Nesta teoria, supõe-se que a turbulência se extingue na interface e que existe uma camada laminar em cada um dos dois filmes. Fora da camada laminar, o movimento molecular é turbulento.

Em 1935, Higbie [25] sugeriu que o processo de transferência ocorria, principalmente, devido às substâncias trazidas pelos turbilhões para a interface, onde acontecia a transferência em regime transiente, durante um certo período, na superfície exposta. Esta teoria é geralmente conhecida como “Teoria da Penetração”. Posteriormente, Danckwerts [26] propôs uma modificação nesta teoria.

Mais recentemente, em 1958, Toor e Marchells [27] propuseram uma teoria mais geral, a “Teoria da Penetração em Filmes”. Parte-se do princípio que toda a resistência à transferência de massa se encontra num filme laminar na interface, tal como na Teoria dos Dois Filmes, mas considera-se a transferência de massa como um processo transiente. Supõe-se que se forma periodicamente uma superfície renovada, com o fluido sendo transferido do interior da fase para a interface, pela ação de correntes turbilhonares. Desta forma, mostra-se claramente que as duas primeiras teorias apresentadas são casos particulares desta última, já que, em tempos muito pequenos de exposição, quando o material difundido ainda não alcançou o extremo oposto da camada, o processo é idêntico ao que se postula na Teoria da Penetração e quando exposto a períodos prolongados, nos quais um gradiente de concentração estacionário já foi estabelecido, as condições são semelhantes àquelas consideradas na Teoria dos Dois Filmes.

IV.3.1 - Os coeficientes de transferência de massa

A velocidade de transferência de massa, na ausência de correntes internas, é diretamente proporcional à força-motriz, ou direção de deslocamento provocada por gradientes de concentração, sendo apresentada da seguinte forma:

$$N_B = k(y_{B1} - y_{OB}) \quad (\text{IV.3})$$

onde : k' é um coeficiente de transferência de massa genérico, em m/s; y_B é a concentração molar de soluto; o sub-índice i representa o valor na interface e o sub-índice 0 representa o valor global, ou seja no seio da fase.

A figura IV.1 representa graficamente um processo de transferência de massa.

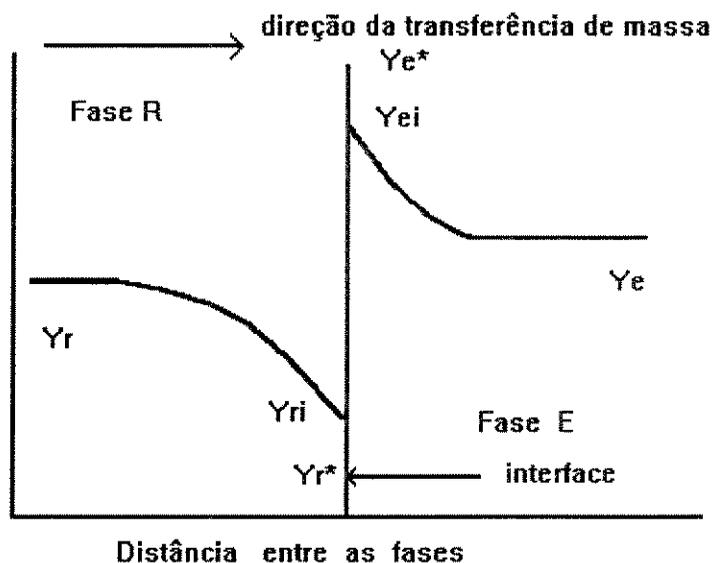


Figura IV.1 - Diagrama representando os gradientes de concentração na interface durante a transferência de massa

A transferência através da interface do refinado (R), é realizada pela diferença de concentração ($y_R - y_{Ri}$), sendo esta diferença de concentrações a força-motriz da transferência de massa na fase refinado. Na interface do extrato, a transferência de massa ocorre pela diferença de concentração ($y_{Ei} - y_E$), sendo esta diferença de concentrações a força-motriz da transferência de massa na fase extrato. Neste caso, o fluxo de soluto, N_B , pode ser representado pela seguinte equação :

$$N_B = k_R(y_R - y_{Ri}) = k_E(y_{Ei} - y_E) \quad (\text{IV.4})$$

onde : k_R e k_E são os coeficientes parciais ou individuais de transferência de massa relativos às fases refinado e extrato, respectivamente; y_R e y_E são as concentrações molares do soluto nas fases refinado e extrato respectivamente, e y_{Ri} e y_{Ei} são as concentrações do soluto na interface, também relativas às fases refinado e extrato, respectivamente.

De acordo com a “Teoria do duplo filme” ou “Teoria das duas resistências” (1923, 1935), supõe-se que as duas fases em contato estão

efetivamente em equilíbrio na interface, e que a resistência à transferência de massa está localizada nas camadas adjacentes de um lado e de outro da interface.

A transferência de massa entre os filmes é realizada por um processo relativamente lento, devido à difusão molecular. As difusividades dos solutos em fase líquida são, geralmente, da ordem de 10^{-6} a 10^{-5} cm^2/s [41]. As concentrações no interior de cada fase são supostas constantes. Em alguns casos, a difusão turbulenta é muito mais importante do que a difusão molecular. O aumento da agitação, por sua vez, favorece a transferência de massa porque provoca uma diminuição no tamanho das gotas sem contribuir, significativamente, para a turbulência da fase contínua.

Nos casos em que a lei de distribuição assume que a distribuição do soluto pode ser representada por uma reta, o equilíbrio na interface obedece as seguintes equações :

$$y_R^* = y_E / m \quad (\text{IV.5})$$

$$y_E^* = m \cdot y_R \quad (\text{IV.6})$$

onde : y_E^* e y_R^* representam as concentrações de equilíbrio, respectivamente com y_R e y_E e m é o coeficiente de distribuição do soluto.

A taxa de transferência de massa global do soluto é determinada pela seguinte expressão :

$$N_B = K_R (y_R - y_R^*) = K_E (y_E^* - y_E) \quad (\text{IV.7})$$

onde : N_B é a taxa de extração do soluto, K_R e K_E são os coeficientes globais de transferência que estimam as resistências das duas fases. A taxa de fluxo pode ser, também, expressa das seguintes formas :

$$N_B = K_E (y_E^* - y_E) = K_E \Delta y_{OE} \quad (\text{IV.8})$$

ou

$$N_B = K_R (y_R - y_R^*) = K_R \Delta y_{OR} \quad (\text{IV.9})$$

A força-motriz $(y_{Ei} - y_E)$, na equação IV.4, pode ser expressa como $m'(y_{Ri} - y_R^*)$, assim como, a força-motriz $(y_R - y_{Ri})$, na mesma equação, pode ser expressa como $(1/m'')(y_E^* - y_{Ei})$, onde m' e m'' são coeficientes de distribuição.

Dessa maneira, para a fase extrato, tem-se :

$$\Delta y_{OE} = \Delta y_E + m' \Delta y_R \quad (\text{IV.10})$$

$$\frac{N_B}{K_E} = \frac{N_B}{k_E} + \frac{m' N_B}{k_R} \quad (\text{IV.11})$$

$$\frac{1}{K_E} = \frac{1}{k_E} + \frac{m'}{k_R} \quad (\text{IV.12})$$

e para a fase refinado, da mesma forma, tem-se :

$$\frac{1}{K_R} = \frac{1}{k_R} + \frac{1}{m' k_E} \quad (\text{IV.13})$$

As equações (IV.12) e (IV.13) representam as resistências totais, de acordo com a teoria de Whitman, onde se relacionam os coeficientes de transferência globais com os parciais [28].

IV.4 - Número de Estágios Teóricos

A partir do estudo de uma unidade de extração em escala piloto, é possível determinar-se o número de estágios teóricos (NET) correspondente a uma dada separação.

Através do número de estágios teóricos, é possível dimensionar um equipamento que efetue uma extração líquido-líquido, de maneira aproximada; entretanto, a noção de estágio teórico permite, a princípio, definir o extrator em estágios separados, com mistura e decantação completa em cada estágio. Quando a transferência de soluto é elevada e o equipamento assegura um eficiente contato entre as fases, o estágio real pode ser comparado aos estágios teóricos. Neste caso, pode-se calcular a eficiência de estágio através do número total de elementos que compõem o extrator.

Para um sistema ternário, o número de estágios teóricos (NET) pode ser calculado graficamente através do método de McCabe-Thiele [29], que se aplica aos sistemas em que o solvente e o diluente são totalmente ou quase totalmente imiscíveis.

Treybal [5] demonstra que, se considerarmos a imiscibilidade dos solventes e a linearidade na distribuição, $y = mx$, a expressão para o número de estágios teóricos pode ser representada pela equação de Kremser, que é apresentada a seguir :

$$NET = \frac{Ln \left[\left(\frac{x_0 - y_1}{x_1 - y_1} \frac{m}{m} \right) \left(1 - \frac{1}{\varepsilon} \right) + \frac{1}{\varepsilon} \right]}{Ln \varepsilon} \quad (IV.14)$$

onde : x e y são as concentrações de soluto nas fases refinado e extrato, respectivamente, m é o coeficiente de distribuição e ε é o fator de extração (a definição deste fator encontra-se no Anexo 4). Os índices 0 e 1 representam a altura ou distância correspondente às posições 0 e Z (inicial e final) num extrator.

A altura equivalente a um estágio teórico (AEET) pode ser calculada pela relação entre a altura da coluna experimental (H) e o número de estágios teóricos (NET) [5] :

$$AEET = \frac{H}{NET} \quad (IV.15)$$

Pode-se determinar a altura útil de uma coluna de extração, conhecendo-se o número de estágios teóricos (NET) e a altura equivalente a um estágio teórico (AEET), que estão relacionados pela equação [5] :

$$H = NET \cdot AEET \quad (IV.16)$$

A AEET varia geralmente com a concentração do soluto, as vazões das fases, a taxa de solvente, a velocidade de agitação e o diâmetro da coluna. Para extratores em contato contínuo, onde a decantação ocorre somente nas extremidades do aparelho, a noção de estágio teórico não tem significado físico, porque em algum ponto do equipamento, as duas fases não estão em equilíbrio termodinâmico. Para evitar esses inconvenientes, outros parâmetros são ajustados para melhor definir esse comportamento, tais como, a altura de unidades de transferência (AUT) e o número de unidades de transferência (NUT). As noções são semelhantes às de AEET e NET, e ambos resultam de um balanço diferencial efetuado sobre uma secção da coluna [5].

IV.5- O número de unidades de transferência de massa em operações contínuas

A eficiência de um extrator, que promove um contato contínuo entre as fases, pode ser quantificada em termos do número de unidades de transferência (NUT).

A vantagem de se usar a unidade de transferência ao invés do coeficiente de transferência deve-se ao fato de que esta permanece, aproximadamente, constante ao alterar-se as condições de fluxo [23].

Considere a coluna de extração da figura IV.2, onde as fases refinado e extrato fluem contracorrentemente. A fase refinado, ou solução a ser extraída, entra na coluna, numa taxa R_1 [moles / h cm² de secção transversal da coluna], a velocidade molar superficial, com uma concentração de soluto distribuído x_{R1} (fração molar) e deixa a coluna numa taxa R_2 , com uma concentração x_{R2} . R_2 é menor que R_1 devido à extração.

Similarmente, o solvente que forma a fase extrato, entra numa taxa E_2 [moles / h cm²], sendo que a concentração varia de x_{E2} a x_{E1} e deixa a coluna numa taxa E_1 . As concentrações em cada uma das fases podem ser expressas em termos de frações molares, x , ou moles por cm³ de solução, C (concentração molar). Para uma área de secção transversal da coluna de 1 cm², a superfície interfacial total entre as fases é A cm². Por unidade de volume da coluna, a superfície interfacial (área) exposta é a cm²/cm³. Em alguma posição na coluna onde as taxas de extrato e refinado são R e E , uma mudança diferencial na concentração dessas correntes ocorre numa altura diferencial, dH . Essa mudança na concentração resulta da difusão de soluto da fase R para a fase E devido aos gradientes de concentração.

Se N é a transferência total de soluto, [moles / h cm²], então a taxa de transferência para a secção diferencial pode ser dada pela equação abaixo :

$$dN = d(Rx_R) = k_R dA C_{RM} (x_R - x_{Ri}) \quad (IV.17)$$

onde C_{RM} é a média dos valores C_R e C_{Ri} . O uso dessa equação limita as relações resultantes a casos onde os solventes são completamente imiscíveis ou a soluções relativamente diluídas, desde que a difusão, na qual a equação (IV.17) é baseada, inclui apenas a difusão de soluto dissolvido e não considera a difusão dos solventes.

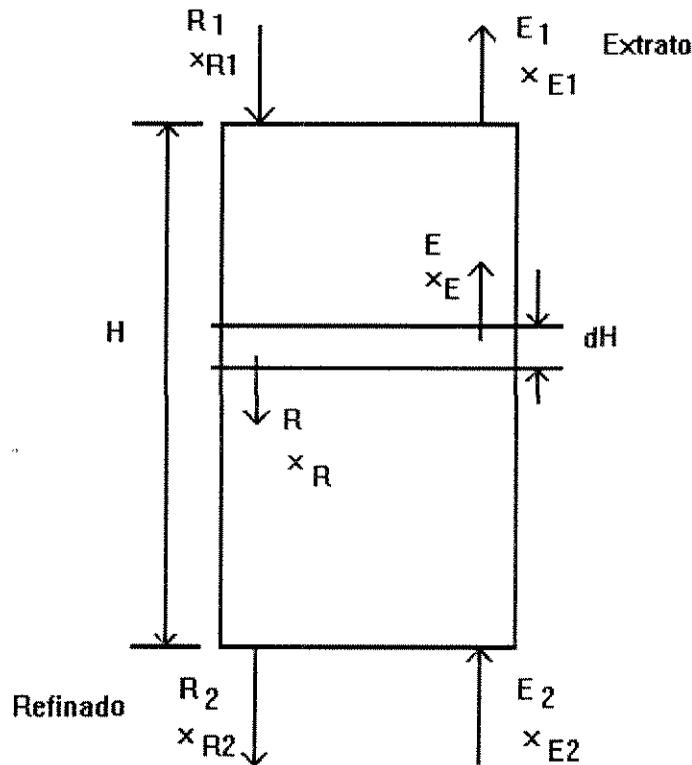


Figura IV. 2 - Extração por contato contínuo contracorrente.

A taxa total de refinado, R , varia de um extremo a outro da coluna, mas o refinado livre de soluto, $R(1 - x_R)$, permanece constante. Conseqüentemente, tem-se :

$$d(Rx_R) = R(1 - x_R)d\left(\frac{x_R}{1 - x_R}\right) = \frac{Rdx_R}{1 - x_R} \quad (\text{IV.18})$$

O coeficiente de transferência de massa k_R inclui um termo $(1 - x_R)_{iM}$ que varia através da coluna. A quantidade $k_R \cdot (1 - x_R)_{iM}$ é, mais provavelmente, constante. Além disso, $dA = a dH$. Assim, a equação (IV.17) pode ser escrita da seguinte forma :

$$\frac{(1 - x_R)_{iM} dx_R}{(1 - x_R)(x_R - x_{Ri})} = \frac{k_R a (1 - x_R)_{iM} C_{RM} dH}{R} \quad (\text{IV.19})$$

Desde que os termos $(1 - x_R)_{iM}$ e $(1 - x_R)$ são geralmente, aproximadamente 1, o lado esquerdo da equação (IV.19) é essencialmente a mudança na concentração, dx_R , pela unidade da diferença de concentração $(x_R - x_{Ri})$, que está provocando a transferência e representa uma medida da dificuldade de extração. Este termo (lado esquerdo) é denominado NUT, o número de unidades de transferência, que quando multiplicado por um fator

determinado experimentalmente, AUT , a altura de uma unidade de transferência, nos fornece a altura da coluna. Então, tem-se :

$$NUT_R = \int_{x_{R2}}^{x_{R1}} \frac{(1-x_R)_{iM} dx_R}{(1-x_R)(x_R-x_{Ri})} = \int_0^H \frac{dH}{AUT_R} = \frac{H}{AUT_R} \quad (IV.20)$$

De modo similar, as diferenças de concentração em termos da fase extrato podem ser usadas. Neste caso, teria-se a seguinte equação :

$$NUT_E = \int_{x_{E2}}^{x_{E1}} \frac{(1-x_E)_{iM} dx_E}{(1-x_E)(x_{Ei}-x_E)} = \int_0^H \frac{dH}{AUT_E} = \frac{H}{AUT_E} \quad (IV.21)$$

- Unidades globais de transferência :

As dificuldades práticas de usar-se as concentrações interfaciais de equilíbrio verdadeiras, x_{Ei} e x_{Ri} levam à introdução de coeficientes globais de transferência de massa K_E e K_R , que expressam a taxa de difusão, em termos dos gradientes de concentração globais $(x_R - x_R^*)$ e $(x_E - x_E^*)$. Na ausência dos k 's, seu uso requer que o coeficiente de distribuição (m) seja verdadeiramente constante na faixa de concentrações encontradas. O coeficiente de distribuição (m) é dado pela seguinte expressão :

$$m = \frac{x_{Ei}}{x_{Ri}} = \frac{x_E^*}{x_R^*} = \frac{x_E}{x_R} \quad (IV.22)$$

Essa é uma séria restrição e na prática, as equações baseadas nos gradientes de concentração globais são geralmente usadas, desprezando-se a constância de ' m '. Obtém-se, então, nesta situação, as seguintes equações :

$$NUT_{OR} = \int_{x_{R2}}^{x_{R1}} \frac{(1-x_R)_{OM} dx_R}{(1-x_R)(x_R-x_R^*)} = \int_{x_{R2}}^{x_{R1}} \frac{dx_R}{(1-x_R) \ln \frac{(1-x_R^*)}{(1-x_R)}} \quad (IV.23)$$

$$NUT_{OR} = \frac{H}{AUT_{OR}} \quad (IV.24)$$

e

$$NUT_{OE} = \int_{x_{R2}}^{x_{R1}} \frac{(1-x_E)_{OM} dx_E}{(1-x_E)(x_E^* - x_E)} = \int_{x_{R2}}^{x_{R1}} \frac{dx_E}{(1-x_E) \ln \frac{(1-x_E)}{(1-x_E^*)}} \quad (IV.25)$$

$$NUT_{OE} = \frac{H}{AUT_{OE}} \quad (IV.26)$$

sendo que :

$$(1-x_R)_{OM} = \frac{(1-x_R^*) - (1-x_R)}{\ln \frac{(1-x_R^*)}{(1-x_R)}} \quad (IV.27)$$

e

$$(1-x_E)_{OM} = \frac{(1-x_E) - (1-x_E^*)}{\ln \frac{(1-x_E)}{(1-x_E^*)}} \quad (IV.28)$$

Estas são as equações usadas para projeto. A equação (IV.23) é usada nos casos onde a principal resistência difusional se encontra na fase refinado (m grande) e a equação (IV.25) nos casos onde a principal resistência difusional se encontra na fase extrato (m pequeno).

Se algumas condições forem satisfeitas, podem ser consideradas simplificações nas equações, que facilitam a integração.

As condições a serem satisfeitas são as seguintes:

- se $(1 - x_R^*)$ e $(1 - x_R)$ diferirem por um fator menor que 2, pode-se usar uma média aritmética no lugar da média logarítmica nas equações acima; este procedimento acarreta um erro de 1,5 % no máximo, na maioria dos casos.

- se as soluções forem diluídas e “m” for constante : Para soluções diluídas, $(1 - x_R)$ e $(1 - x_E)$ são aproximadamente 1 e R e E são substancialmente constantes. Através de procedimentos matemáticos bem detalhados por Treybal [5], para essas soluções diluídas, as seguintes relações são válidas :

$$NET = \frac{NUT_{OR} - NUT_{OE}}{\ln(NUT_{OR} - NUT_{OE})} \quad (IV.29)$$

$$AEET = \frac{HUT_{OR} \ln \varepsilon}{1 - \varepsilon} = \frac{HUT_{OE} \ln \varepsilon}{\varepsilon - 1} \quad (IV.30)$$

$$\varepsilon = m \frac{E}{R} \quad (IV.31)$$

$$NUT_{OR} = \frac{NET \ln \varepsilon}{1 - \varepsilon} \quad (IV.32)$$

$$NUT_{OE} = \frac{NET \ln \varepsilon}{\varepsilon - 1} \quad (IV.33)$$

A partir da equação IV.23, pode-se verificar que se a solução for bastante diluída, ou seja, se a concentração de soluto for pequena, esta equação pode ser simplificada e adquirir a seguinte forma :

$$NUT = \int_{x_{R2}}^{x_{R1}} \frac{dx_R}{(x_R - x_R^*)} \quad (II.2)$$

Neste trabalho experimental, verificou-se a validade dessa aproximação, visto que foram realizados cálculos com ambas as equações e os resultados foram praticamente idênticos, sendo que o sistema, com o qual os experimentos foram realizados, era bastante diluído. Sendo assim, os valores de NUT foram obtidos a partir dessa equação.

IV.6 - Eficiência de Extração

Sabe-se que existem dois aspectos distintos sobre a eficiência de extração a serem considerados : o primeiro, costuma diferenciar o comportamento real do ideal; e o segundo interpreta a eficiência em termos de mecanismos de transporte de massa. Baseados nestes aspectos, várias definições de eficiência têm sido propostas [22].

Foram consideradas três definições de eficiência encontradas na literatura: a de Kawase [15], a de Reman [9] e a de Murphree [10].

A eficiência definida por Kawase (1990) é baseada nas concentrações da fase onde se encontra o soluto. Ela é definida da seguinte maneira :

$$E_K = \frac{c_f - c_r}{c_f} \quad (\text{II.3})$$

onde : c_f é a fração mássica de soluto na alimentação e

c_r é a fração mássica de soluto no refinado.

Esta definição representa um **índice de recuperação do soluto** .

A eficiência global definida por Reman (1950) é baseada no número de estágios teóricos calculados para a coluna em estudo e o número de estágios (compartimentos) que a coluna realmente possui. Ela é definida da seguinte maneira :

$$E_o = \frac{\text{NET}}{\text{NC}} \times 100 \quad (\text{IV.34})$$

Embora seja conveniente para muitos projetos, esta eficiência é significativa apenas para uma relação de equilíbrio linear, ou seja, quando o coeficiente de distribuição for constante [22].

Uma terceira definição de eficiência será usada. Ela é uma correlação experimental que descreve a eficiência de separação do extrator em estudo, definida da seguinte forma :

$$E = \frac{y_f - y_r}{y_f - y_r^*} \quad (\text{II.1})$$

Chegou-se a esta definição, através de uma modelagem, fazendo-se uso de conhecimentos de análise adimensional.

Nesta definição, y_r^* é a concentração de soluto (fração molar) que se encontraria na fase refinado se o sistema estivesse em equilíbrio. Esta relação representa o desvio em relação ao equilíbrio.

Para o uso da equação (II.1), é necessário o conhecimento das condições de equilíbrio para o sistema líquido ternário, o que pode ser obtido experimentalmente ou através da teoria desenvolvida por Prausnitz [30]. O cálculo do equilíbrio é realizado através de um programa computacional que utiliza as propriedades de cada substância e também parâmetros de iteração

binários entre os pares de componentes da mistura, para o modelo UNIQUAC (modelo amplamente empregado para o cálculo do equilíbrio de fases em sistemas líquido-líquido), ou outro modelo que faça uso de parâmetros, como por exemplo o ASOG, entre outros.

No próximo capítulo será feita uma análise do equilíbrio de fases e do método usado para o cálculo do equilíbrio de fases para um sistema líquido ternário.

IV.7- Análise dos modelos

O estudo da eficiência será feito baseado nas definições do índice de recuperação do soluto, da eficiência global, da eficiência de Murphree e do NUT.

Os resultados relativos ao número de estágios teóricos serão apresentados, mas deve-se lembrar que eles não são adequados para a avaliação de equipamentos que operam em contato contínuo, e sim para sistemas em estágios. Isto compromete os resultados da eficiência global, já que esta é baseada no número de estágios teóricos.

Portanto, os modos mais adequados para quantificar a eficiência numa coluna de extração de contato contínuo, são o índice de recuperação do soluto, o número de unidades de transferência (NUT) e a eficiência de separação.

CAPÍTULO V

EQUILÍBRIO DE FASES

V.1 - Introdução

O projeto de equipamentos destinados a efetuar operações de separação, como por exemplo: a extração líquido-líquido e a destilação, requer estimativas quantitativas do equilíbrio de fases.

Neste capítulo será abordado o equilíbrio de fases, principalmente para sistemas líquido-líquido. Serão apresentadas equações que descrevem o equilíbrio e um procedimento iterativo para o cálculo do equilíbrio para um sistema líquido multicomponentes, além de ser apresentada a curva de distribuição do soluto entre as fases, obtida para o sistema água-ácido acético-butanol, à temperatura em que os experimentos foram realizados.

V.2 - Equilíbrio de Fases

V.2.1 - Introdução

O equilíbrio líquido-líquido depende de vários fatores, destacando-se entre esses a natureza dos componentes da mistura, as concentrações dos componentes em ambas as fases, a temperatura e a pressão do sistema.

A análise termodinâmica do sistema permite o cálculo do equilíbrio de fases. Primeiro, dados binários e de componentes puros são analisados, para fornecer valores fundamentais que, a seguir, são reduzidos para obter-se parâmetros, num modelo molecular. Esse modelo pode ser usado para avaliar o comportamento de líquidos e vapores multicomponentes.

Para o equilíbrio líquido-líquido o efeito da pressão, geralmente, não é importante a não ser que a pressão seja muito alta ou as condições estejam próximas da região crítica de líquido-vapor.

Quando duas fases líquidas estão presentes deve-se calcular para cada componente os coeficientes de atividade nas duas fases; sendo que estes coeficientes são, freqüentemente, funções fortemente não lineares das composições. Cálculos de equilíbrio líquido são altamente sensíveis a pequenas mudanças na composição.

V.2.2 - O Equilíbrio de Fases

O tratamento termodinâmico do equilíbrio de fases multicomponente, apresentado por Gibbs, é baseado no conceito de potencial químico. Duas fases estão em equilíbrio termodinâmico quando existe a igualdade de pressão, temperatura e de potencial químico para cada componente presente em ambas as fases [30].

Como o potencial químico é uma quantidade destituída de sentido físico direto, Lewis introduziu o conceito de fugacidade, uma pressão termodinâmica, que é, então, usada no cálculo do equilíbrio de fases [30].

Sendo a condição de equilíbrio, para um sistema líquido-líquido, descrita pela igualdade das fugacidades pode-se apresentar a seguinte expressão :

$$f_i^E = f_i^R \quad (\text{V.1})$$

A fugacidade de cada fase é definida por :

$$f_i^E = \gamma_i^E x_i^E f_i^{OLE} \quad i = 1, 2, \dots \quad (\text{V.2})$$

$$f_i^R = \gamma_i^R x_i^R f_i^{OLR} \quad i = 1, 2, \dots \quad (\text{V.3})$$

onde f_i^{OLj} é a fugacidade padrão do componente i na fase j no estado líquido, γ_i^j é o coeficiente de atividade do componente i na fase j e x_i^j é a fração molar do componente i na fase j . E e R são as fases extrato e refinado, respectivamente.

Como no equilíbrio ocorre a igualdade das fugacidades padrão, tem-se a seguinte equação resultante :

$$\gamma_i^E x_i^E = \gamma_i^R x_i^R \quad (\text{V.4})$$

Existem três maneiras de descrever o equilíbrio de fases :

1) Modelos para a determinação do excesso de energia de Gibbs, como as equações de van Laar, Redlich-Kister e Black ou os modelos de composição local que envolvem as equações NRTL, UNIQUAC e de Wilson modificada, que têm se mostrado superiores aos outros por correlacionarem dados de equilíbrio ternário e dados binários, com maior precisão e por serem mais adequados para predizer diagramas de fases ternários a partir de dados binários;

2) Equações de estado, onde o coeficiente de atividade está relacionado com as propriedades P-V-T da mistura;

3) Métodos de contribuição de grupo, como UNIFAC e ASOG, que apresentam bons resultados quando os parâmetros de interação de grupo são baseados em dados de equilíbrio líquido-líquido.

Um modelo matemático baseado preferencialmente em considerações moleculares é um método conveniente de expressar o excesso de energia de Gibbs, G^E , como uma função da fração molar, x .

Dessa relação, um coeficiente de atividade individual, γ_i , para o componente i pode ser calculado de G^E , através da expressão :

$$RT \ln \gamma_i = \left[\frac{\partial n_i G^E}{\partial n_i} \right]_{T, P, n_{j \neq i}} \quad (V.5)$$

onde : n_i é o número de moles do componente i ; $n_t = \sum_j n_j$

n_j é o número de moles do componente j

$$x_i = n_i/n_t$$

R = constante universal dos gases ídeais, Kcal/gmol K

T = temperatura absoluta do sistema, K

P = pressão do sistema, bar

G^E = excesso de energia de Gibbs, Kcal/gmol

Os parâmetros desta equação podem ser calculados com base nos dados experimentais binários e ternários, onde as fontes de dados binários possíveis são :

- a) dados de equilíbrio líquido-vapor à temperatura constante (P , y , x);
- b) dados de equilíbrio líquido-vapor à pressão constante (T , y , x);
- c) dados de pressão total à temperatura constante (P , x ou y);
- d) dados no ponto de bolha (ou de orvalho) à pressão constante (T , x ou y);

- e) dados de solubilidade mútua;
- f) dados do ponto azeotrópico;
- g) coeficiente de atividade à diluição infinita.

V.2.3 - Determinação das composições de equilíbrio

Para se efetuar os cálculos do equilíbrio líquido-líquido necessita-se de:

- 1- Um modelo que forneça G^E e γ_i em função da composição e temperatura.
- 2- Um método para calcular as composições de equilíbrio líquido-líquido usando o modelo acima comentado [32].

A fim de encontrar-se as composições de equilíbrio deve-se resolver simultaneamente as equações de balanço de massa e as relações de equilíbrio de fase, obtidas através da análise termodinâmica do sistema.

O balanço de massa será dado pelas equações de :

$$\text{- Balanço de massa total : } F = E + R \quad (\text{V.6})$$

F - quantidade de alimentação (moles), neste caso inclui o solvente

E - quantidade de saída da fase extrato (moles)

R - quantidade de saída da fase refinado (moles)

- Balanço de massa de cada componente (i) :

$$Fx_i^F = Ex_i^E + Rx_i^R \quad (\text{V.7})$$

x_i^j é a fração molar do componente i na fase j.

Fazem parte também do balanço de massa as seguintes relações das frações molares para cada fase :

$$\sum_{i=1}^n x_i^R = 1 \quad (\text{V.8})$$

$$\sum_{i=1}^n x_i^E = 1 \quad (\text{V.9})$$

As demais equações vêm das relações de equilíbrio, sendo que a relação a que se chega, após realizada a análise termodinâmica é semelhante à equação (V.4) mostrada anteriormente.

Deve-se lembrar que o sistema se encontra à pressão e temperatura constantes.

Para os cálculos de separação líquido-líquido, é mais conveniente expressar o equilíbrio das fases em termos de taxas de equilíbrio, K_i , que são definidas abaixo :

$$K_i = \frac{x_i^E}{x_i^R} \quad (\text{V.10}) \quad \text{ou} \quad K_i = \frac{\gamma_i^R}{\gamma_i^E} \quad (\text{V.11})$$

King [33] sugeriu a seguinte aproximação, obtida através de manipulações das equações anteriores :

$$W_i = \frac{E}{F} K_i x_i^R + [1 - \frac{E}{F}] x_i^R \quad (\text{V.12})$$

ou, isolando-se x_i^R :

$$x_i^R = \frac{W_i}{(K_i - 1)\alpha + 1} \quad (\text{V.13})$$

onde : $\alpha = E/F$ e

W_i = fração molar do componente i na alimentação.

$$\text{Da equação (V.10), tem-se : } x_i^E = x_i^R K_i \quad (\text{V.14})$$

e das equações (V.13) e (V.14), tem-se :

$$x_i^E = \frac{K_i W_i}{(K_i - 1)\alpha + 1} \quad (\text{V.15})$$

$$\text{Das equações (V.8) e (V.9), tem-se : } \sum_{i=1}^n x_i^E - \sum_{i=1}^n x_i^R = 0 \quad (\text{V.16})$$

E substituindo-se as equações (V.13) e (V.15) na equação (V.16), tem-se :

$$\sum_{i=1}^n \left[\frac{(K_i - 1)W_i}{(K_i - 1)\alpha + 1} \right] = 0 \quad (\text{V.17})$$

Para um dado coeficiente de equilíbrio (K_i), esta relação pode ser solucionada para α através de uma técnica iterativa, como por exemplo, o método de Newton-Raphson. O valor de α deve estar situado entre 0 e 1.

Para o processo iterativo de cálculo de α , deve-se utilizar como função objetivo a seguinte relação :

$$G(x^R, x^E, \alpha) = \sum \left[\frac{(K_i - 1)W_i}{(K_i - 1)\alpha + 1} \right] \quad (\text{V.18})$$

A solução será obtida quando a função objetivo alcançar um valor menor que o valor do erro previamente estabelecido. Geralmente o erro é assumido como sendo 10^{-5} .

V.2.3.1 - Procedimento Iterativo

O método para resolução da equação é o método de Newton-Raphson, descrito a seguir :

$$\underline{x}_i^{(r+1)} = \underline{x}_i^{(r)} - t \underline{J}^{-1} G(\underline{x}_i^{(r+1)}) \quad (\text{V.19})$$

$$\underline{J} = \left| \frac{\partial G_i}{\partial x_j} \right|_{i \neq j} \quad (\text{V.20})$$

O escalar “t” é chamado “passo” e seu valor deve estar situado na faixa de 0 a 1.

Para este tipo de resolução, usa-se, normalmente, $t = 1$.

O cálculo das composições das fases E e R (x^E e x^R) também são determinadas iterativamente, sendo que neste caso a função objetivo será :

$$H(x_i^R, x_i^E) = \sum_{i=1}^n |\gamma_i^E x_i^E - \gamma_i^R x_i^R| \quad (\text{V.21})$$

A solução desta função será alcançada quando esta atingir um valor menor que um certo erro, normalmente considerado como sendo 10^{-3} .

Se o sistema estiver próximo ao 'plait point', será necessário um número muito grande de iterações para chegar-se ao resultado.

Quando a alimentação estiver fora da região de duas fases (no diagrama ternário), o valor de α será maior ou igual a 1.

Todo esse procedimento foi sugerido por Prausnitz e outros [30], onde ele também sugere o uso do método UNIQUAC para o cálculo dos coeficientes de atividade, o qual será apresentado no próximo item.

V.2.4 - Modelos Matemáticos

Os modelos usados para correlacionar o equilíbrio líquido-líquido, baseados na Termodinâmica Clássica e Molecular, podem ser divididos em dois grupos :

1- Modelos para os coeficientes de atividade em função do excesso de energia livre de Gibbs.

2- Métodos de contribuição de grupos.

As principais equações usadas para a representação dos coeficientes de atividade são : a de Margules (1895), a de van Laar (1910), a de Redlich-Kister (1948), a de Wilson (1964), a NRTL (Reman, 1966) e a UNIQUAC (Abrams e Prausnitz, 1975).

Para calcular as composições de equilíbrio líquido-líquido através de modelos como NRTL e UNIQUAC, precisa-se determinar parâmetros do modelo a partir de dados de equilíbrio de fase.

Os modelos de contribuição de grupos são usados para calcular os coeficientes de atividade na ausência de dados experimentais sobre o sistema em estudo.

V.2.4.1 - Modelo UNIQUAC

A equação UNIQUAC (Universal Quasi Chemical) proposta por Abrams e Prausnitz [34] é deduzida a partir de análise efetuada por Guggenheim [35]. Esse modelo, que é baseado na mecânica estatística, supõe que as composições locais resultam tanto das diferenças de tamanho, como da energia entre as moléculas da mistura. Esta teoria é generalizada através da introdução da fração de área local como variável de concentração primária, sendo que o tamanho molecular e os parâmetros de forma são obtidos através dos dados dos componentes puros, obtendo-se assim, uma equação para o excesso de energia livre de Gibbs para uma mistura líquida.

A equação UNIQUAC, resultante do procedimento comentado, usa dois parâmetros ajustáveis por binário e a extensão a sistemas multicomponentes não exige parâmetros ternários ou superiores.

O modelo UNIQUAC fornece uma boa representação para o equilíbrio líquido-líquido para misturas binárias ou multicomponente, constituídas por não eletrólitos, como por exemplo, hidrocarbonetos, cetonas, ésteres, aminas, álcoois, nitrila, água, etc. , além de poder ser aplicado a soluções de polímeros.

Os efeitos do tamanho e forma molecular são introduzidos através de parâmetros estruturais obtidos a partir de dados dos componentes puros e do uso da entropia combinatorial de Staverman como uma condição limite para misturas atérmicas [34].

As equações resultantes são :

$$\frac{G^E}{RT} = \sum_{i=1}^m x_i \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{Z}{2} \sum_{i=1}^m q_i x_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} - \sum_{i=1}^m q_i x_i \ln \left[\sum_{j=1}^m \theta_j \tau_{ij} \right] \quad (\text{V.22})$$

e

$$\begin{aligned} \ln \gamma_i = & \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{Z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} + l_i - \frac{\phi_i}{x_i} \sum_{j=1}^m x_j l_j - \\ & - q_i \ln \left(\sum_{j=1}^m (\theta_j \tau_{ij}) \right) + q_i + q_i \sum_{j=1}^m \frac{\theta_j \tau_{ij}}{\sum_{k=1}^m \theta_k \tau_{kj}} \end{aligned} \quad (\text{V.23})$$

onde :

$$l_i = \frac{Z}{2}(r_i - q_i) - (r_i - 1)$$

$$\phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_{j=1}^m x_j r_j}$$

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_{j=1}^m x_j q_j}$$

$$\tau_{ij} = \exp \left[- \frac{(u_{ij} - u_{jj})}{RT} \right]$$

com os subíndices invertidos para o componente j.

γ_i = coeficiente de atividade do componente i.

r_i = parâmetro de volume para o componente i.

q_i = parâmetro de área superficial para o componente i.

ϕ_i = segmento ou fração de volume do componente i = $\frac{x_i r_i}{\sum x_j r_j}$

θ_i = fração de área do componente i = $\frac{x_i q_i}{\sum x_j q_j}$

$$\ln \tau_{ij} = - \frac{(u_{ij} - u_{jj})}{RT}$$

u_{ij} = energia média de interação entre os componentes i e j.

Z = número de coordenação médio, geralmente considerado como sendo 10.

q = soma das contribuições de área do grupo.

Os parâmetros ajustáveis ($u_{ij} - u_{jj}$) representam a energia de interação entre uma molécula do componente i e outra do componente j.

Os parâmetros dos componentes puros r_i e q_i são, respectivamente, medidas do volume molecular de van der Waals e das áreas de superfície

molecular e são calculados como a soma dos parâmetros de volume-do-grupo (R_k) e área-do-grupo (Q_k).

$$r_i = \sum_k \nu_k^{(i)} R_k \quad \text{e} \quad q_i = \sum_k \nu_k^{(i)} Q_k$$

onde $\nu_k^{(i)}$, sempre um inteiro, é o número de grupos do tipo k na molécula i .

Os parâmetros de grupo R_k e Q_k são obtidos através do volume-de-grupo de van der Waals e das áreas superficiais de grupo, V_k e A_k :

$$R_k = \frac{V_k}{15,17} \quad \text{e} \quad Q_k = \frac{A_k}{2,5 \times 10^9}$$

Z é o número de coordenação do sistema e quando os valores dos parâmetros ajustáveis são dependentes de Z , a qualidade da predição final é independente de Z desde que $6 \leq Z \leq 12$ (Abrams recomenda $Z = 10$).

Os parâmetros da equação UNIQUAC de volume (r) e de área superficial (q) podem ser calculados por um método de contribuição de grupos, na falta de dados experimentais, considerando que a molécula é formada por uma reunião de grupos funcionais e que o volume R_i e a área superficial Q_i do grupo i serão aproximadamente os mesmos em qualquer molécula em que o grupo ocorra. Portanto, os parâmetros de volume (r) e área superficial (q) de uma molécula são dados pelo somatório dos parâmetros R e Q dos grupos funcionais. A vantagem dessa abordagem é que, a partir de um número relativamente pequeno de grupos funcionais, as propriedades de muitas diferentes moléculas podem ser obtidas [36].

As equações de composição local apresentam também parâmetros que fornecem a dependência dos coeficientes de atividade com a temperatura.

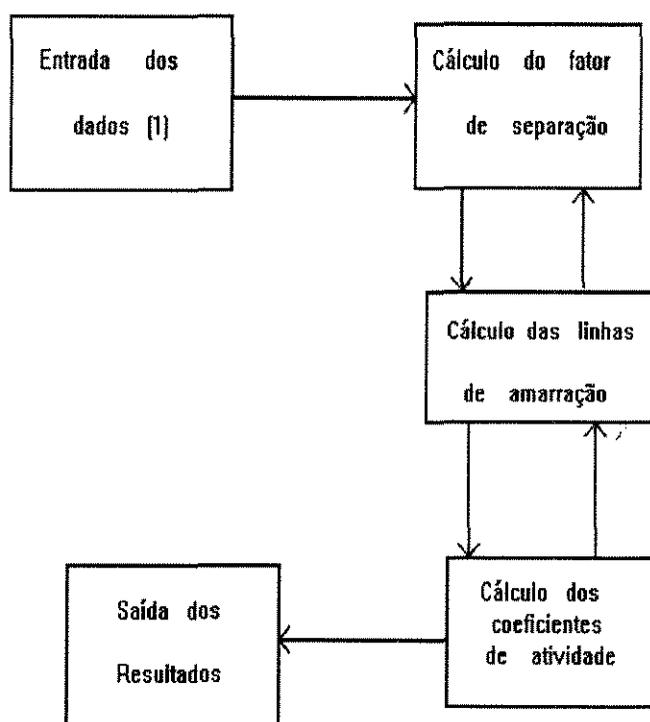
Como os parâmetros de tamanho (r_i) e área superficial (q_i) podem ser calculados a partir de informações de estrutura molecular, a equação UNIQUAC contém apenas dois parâmetros τ_{ij} e τ_{ji} , ou de modo equivalente $u_{ij} - u_{jj}$ e $u_{ji} - u_{jj}$ para cada par binário. Portanto, o modelo UNIQUAC é um modelo de coeficiente de atividade de dois parâmetros.

Optou-se pelo uso da equação UNIQUAC para o cálculo do equilíbrio de fases do sistema porque esta equação possui apenas dois parâmetros ajustáveis

por binário e alguma capacidade preditiva baseada nas propriedades de componentes puros, além de apresentar vantagens na representação de equilíbrios líquido-líquido em comparação, por exemplo com o método NRTL, que por exigir um grande número de parâmetros ajustáveis, apresenta problemas computacionais.

A seguir apresenta-se um fluxograma do procedimento de cálculo do equilíbrio, usado no programa .

Fluxograma de cálculo :



Onde : (1) - Dados de entrada : - composição de alimentação

- parâmetros do modelo UNIQUAC

- número de componentes

(2) - Saída dos resultados : - composições das fases

- coeficiente de atividade

- fator de separação

Obs. : O programa, a partir dos dados de alimentação, faz as aproximações iniciais para os cálculos iterativos.

V.3 - Curva de distribuição

Uma maneira de se apresentar as composições de equilíbrio entre duas fases é através da curva de distribuição. No anexo 3, essa forma de representação é apresentada. Abaixo, encontra-se a curva de distribuição (figura V.1) para o sistema ternário em estudo, à 26,7°C. A temperatura em que os experimentos foram realizados foi de aproximadamente 27°C. No apêndice B, encontram-se as tabelas com os valores de equilíbrio obtidos através do programa, para as várias alimentações (linhas de amarração), a tabela para a construção da curva de equilíbrio, os valores de equilíbrio para o sistema ternário encontrados na literatura e os valores dos parâmetros usados na equação do modelo UNIQUAC.

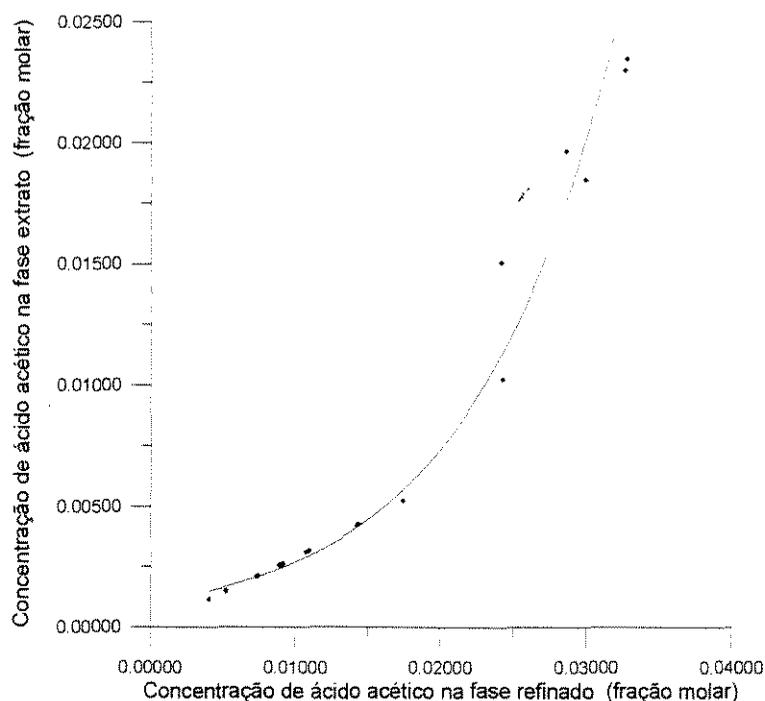


Figura V.1 - Curva de distribuição para o sistema ternário butanol-ácido acético-água à 26,7°C

A equação e o coeficiente de determinação para a curva da figura V.1 são:

$$Y = \exp(100,867 \cdot X) \cdot 0,00098049$$

Coeficiente de determinação : 0,985314

A curva de distribuição é um gráfico que relaciona a concentração de soluto na fase extrato e a concentração de soluto na fase refinado.

Como pode ser visto na figura V.2, para valores de concentração bastante baixos, abaixo de 0,006 (fração molar) para a fase extrato e abaixo de 0,02 (fração molar) para a fase refinado, os dados para o sistema ternário butanol-ácido acético-água à 26,7°C são melhor representados por uma reta. Abaixo da figura são mostrados a equação da reta obtida e o coeficiente de determinação da reta.

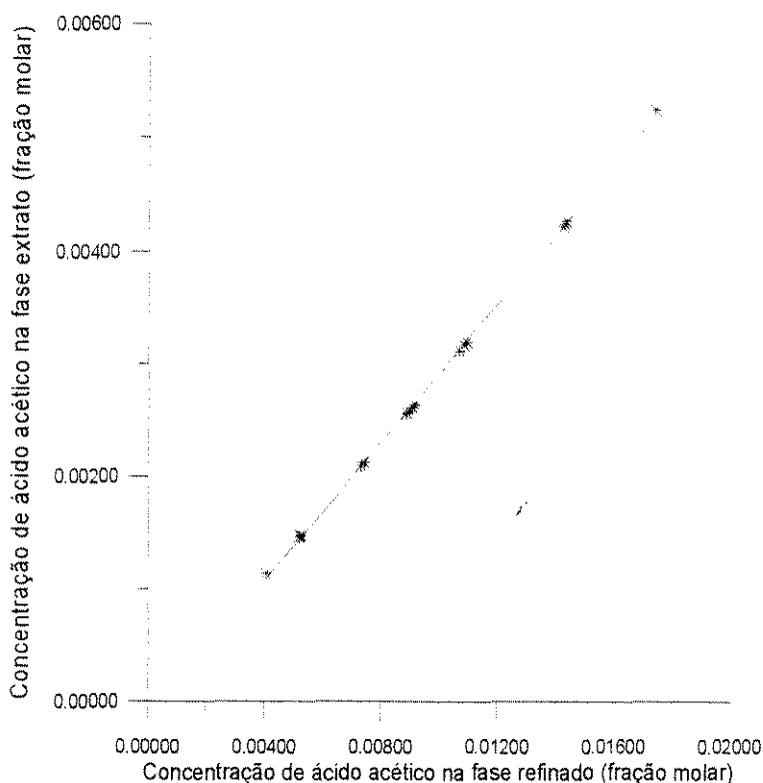


Figura V.2 - Curva de distribuição para o sistema ternário butanol-ácido acético-água à 26,7°C, para concentrações muito pequenas

Equação da reta : $Y = 0,306312 \cdot X - 0,000146849$

Coeficiente de determinação : 0,999552

Nos cálculos e representações do equilíbrio utiliza-se a concentração representada pela fração molar, portanto x e y são as frações molares de ácido acético.

Nas equações, X e Y representam as coordenadas dos eixos x e y, respectivamente.

CAPÍTULO VI

ANÁLISE DOS RESULTADOS

VI. 1 - INTRODUÇÃO

Após apresentados a teoria envolvida no estudo da transferência de massa em sistemas de extração líquido-líquido e os cálculos preliminares necessários, tais quais os cálculos de equilíbrio de fases e construção da curva de distribuição, serão apresentados os resultados experimentais.

Neste capítulo, serão apresentados os resultados obtidos experimentalmente e as tendências observadas no comportamento do sistema. Também faz parte deste capítulo a discussão da influência que cada variável estudada exerce sobre o desempenho do equipamento.

No estudo realizado, foram empregadas diferentes condições geométricas e operacionais em cada experimento. Essas condições são apresentadas na tabela III.1 do capítulo III.

As tabelas completas das condições de operação e resultados se encontram no apêndice D.

A apresentação dos resultados para a análise será dividida de acordo com a forma de expressar a eficiência. Sendo assim, este capítulo terá os seguintes itens : índice de recuperação do soluto, eficiência de separação (Murphree), número de estágios teóricos (NET) - Eficiência Global e número de unidades de transferência (NUT).

VI. 2 - Índice de recuperação do soluto

A primeira forma de expressar a eficiência que será analisada é o índice de recuperação do soluto. Com as concentrações de ácido acético (medidas na corrente de saída da fase refinado e na corrente de alimentação) e o uso da equação II.3, obteve-se os resultados apresentados nas tabelas D.7.1 até D.7.5 do apêndice D e com base neles construiu-se os gráficos contidos neste item.

VI. 2.1 - A velocidade de rotação

A primeira variável a ser analisada é a velocidade de rotação das palhetas. Como pode ser verificado nas figuras VI.1 e VI.2, ocorre um aumento no índice de recuperação do soluto com o aumento da velocidade de rotação das palhetas. Nota-se que esse aumento é mais acentuado nas velocidades de rotação baixas (abaixo de 2 rps) para razões entre as vazões de alimentação abaixo de 9. Acima de 2 rps ainda ocorre um aumento no índice de recuperação do soluto, porém, menos acentuado, para razões entre as vazões de alimentação iguais a 1. Isto ocorre porque o aumento da agitação, no início, melhora a mistura entre as fases e aumenta a área interfacial, por diminuir o tamanho médio das gotas, e promovendo com isso o aumento na taxa de transferência de massa, que é diretamente proporcional à área interfacial. Contudo, isso não ocorre indefinidamente.

As razões para isso são : primeiro, há um limite para o aumento da área interfacial que pode ser obtido; segundo, abaixo de um certo tamanho, as gotas começam a se comportar como esferas rígidas, sem circulação interna, com isso, a transferência de massa nas gotas ocorre apenas devido ao lento processo de difusão molecular ; terceiro, depois de um certo valor, o aumento da agitação pode começar a suprimir a interação gota-gota reduzindo, portanto, a mistura na fase dispersa e, conseqüentemente, a taxa de transferência de massa.

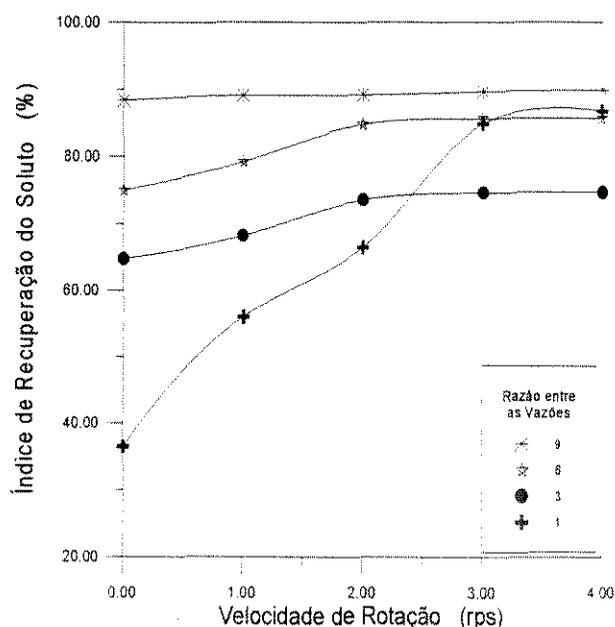


Figura VI.1 - Gráfico do índice de Recuperação do Soluta pela Velocidade de Rotação das Palhetas para 14% de área livre das palhetas e 5,5 ml/s de vazão total de alimentação

Além disso, durante os experimentos e pelos resultados obtidos observou-se também que velocidades de rotação muito altas provocavam um aumento na resistência imposta ao escoamento pelas palhetas, o que impedia ou retardava a ascensão das gotas da fase dispersa até o topo da coluna, prejudicando a transferência de massa. Velocidades das palhetas muito elevadas podem provocar o “*backmixing*” (retorno axial da fase dispersa) e o “*backflow*” (retorno axial da fase contínua).

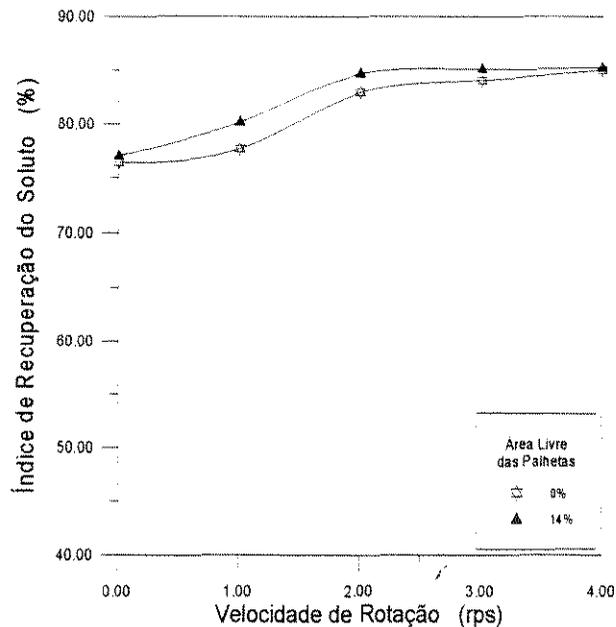


Figura VI.2 - Gráfico do índice de Recuperação do Soluta pela Velocidade de Rotação das Palhetas para razão entre as vazões de alimentação igual a 6 e 7,0 ml/s de vazão total de alimentação

Observando-se as figuras VI.1 e VI.2, nota-se que esses efeitos começam a ocorrer com velocidades de rotação superiores a 2 rps, com exceção para o caso em que a razão entre as vazões é 1. Neste último caso, com velocidades entre 2 e 3 rps, ocorre um aumento bastante acentuado do índice de recuperação de soluto, sendo que os fenômenos contrários à transferência de massa começam a ocorrer a velocidades superiores a 3 rps. Pelos resultados obtidos, observou-se que, a velocidades mais elevadas (superiores a 3 rps), para uma razão entre as vazões igual a 1, o comportamento do sistema é mais instável. Em alguns casos, com razão entre as vazões igual a 1 e velocidades superiores a 3 rps ocorre a inundação da coluna, como é visto na figura VI. 3 (não há medida quando a velocidade é 4 rps porque ocorreu a inundação).

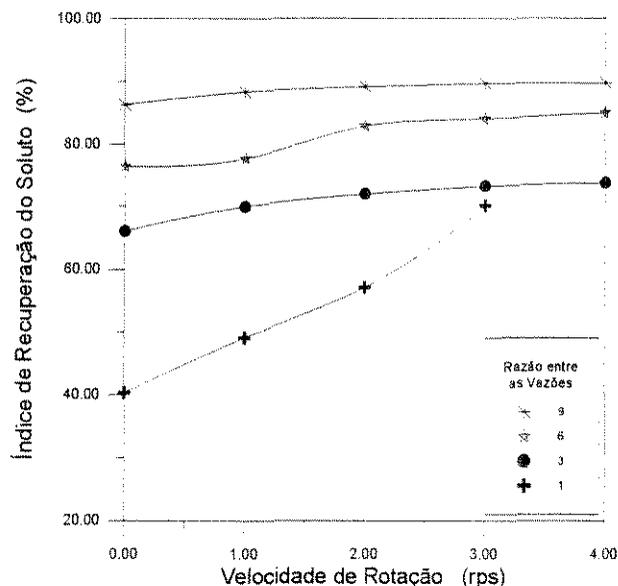


Figura VI.3 - Gráfico do índice de Recuperação do Soluta pela Velocidade de Rotação das Palhetas para 0% de área livre das palhetas e 7,0 ml/s de vazão total de alimentação

VI. 2. 2 - Razão entre as vazões das fases contínua e dispersa

A segunda variável a ser analisada é a razão entre as fases (vazão da fase contínua / vazão da fase dispersa). Observando as figuras VI.1 e VI.4, nota-se que o índice de recuperação do soluto é maior quanto maior for a razão entre as vazões de alimentação. Isso se deve, principalmente, à maior facilidade em extrair-se mais ácido acético (soluto) com mais água (solvente), já que há um aumento na quantidade de solvente em contato com o soluto.

Observando-se a figura VI.5, nota-se que, quando a razão entre as vazões é 3, ocorre uma queda no índice de recuperação do soluto, para velocidades de rotação superiores a 3 rps. Contudo, é o aumento no índice de recuperação do soluto, para a razão entre as vazões igual a 1, o que é muito acentuado. Esse não é o comportamento esperado.

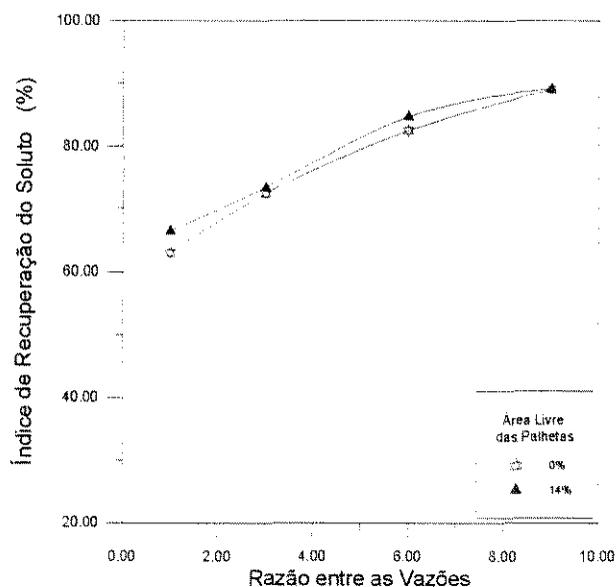


Figura VI.4 - Gráfico do índice de Recuperação do Solutu pela Razão entre as vazões de alimentação para 5,5 ml/s de vazão total de alimentação e velocidade de rotação das palhetas de 2 rps

A razão entre as vazões igual a 1 não é uma boa escolha porque o sistema apresenta um comportamento instável e a tendência de ocorrer a inundação da coluna é maior.

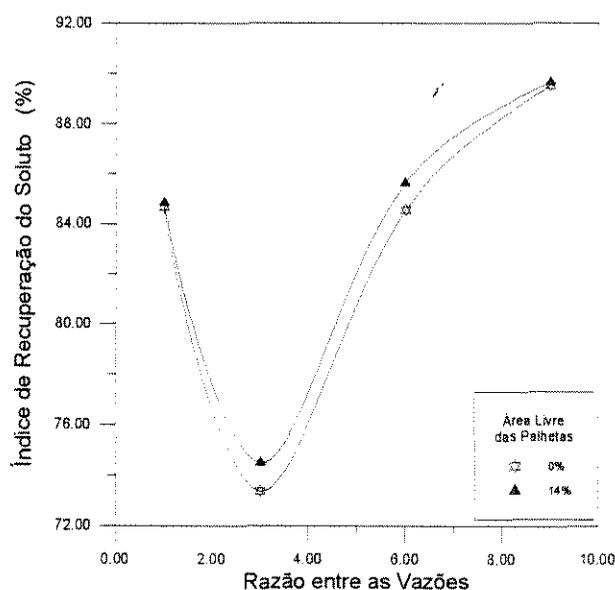


Figura VI.5 - Gráfico do índice de Recuperação do Solutu pela Razão entre as vazões de alimentação para 5,5 ml/s de vazão total de alimentação e velocidade de rotação das palhetas de 3 rps

Isso ocorre porque, neste caso, tem-se menos solvente onde a fase dispersa pode dispersar-se. A velocidades mais elevadas, a resistência ao escoamento e o *backmixing* fazem com que as gotas tenham dificuldade em

dispersar-se e concentrem-se no fundo da coluna, isso aumenta a tendência de ocorrer a inundação.

VI. 2. 3 - Vazão total das fases

A terceira variável a ser analisada é a vazão total das fases. Observando-se a figura VI.6, pode-se perceber que ocorre um aumento no índice de recuperação do soluto com o aumento tanto da velocidade de rotação das palhetas, como da vazão total das fases. Nota-se que, para velocidades baixas (0 a 1 rps), o aumento da vazão total de alimentação faz com que o índice de recuperação do soluto diminua.

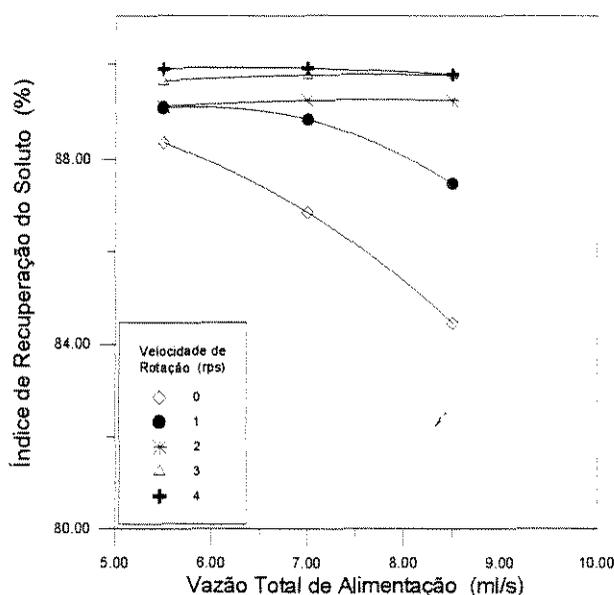


Figura VI.6 - Gráfico do índice de Recuperação do Soluta pela Vazão total de alimentação para 14% de área livre das palhetas e razão entre as vazões de alimentação igual a 9

Isso ocorre porque o aumento da vazão total faz com que o tempo de contato entre as fases seja menor e com isso o índice de recuperação do soluto seja reduzido. Contudo, com velocidades de rotação maiores (acima de 2 rps), a agitação melhora a mistura entre as fases. O aumento da vazão total de alimentação eleva a turbulência no interior da coluna ainda mais, provocando o aumento no índice de recuperação do soluto.

Na figura VI.7, nota-se que o aumento no índice de recuperação do soluto relativo ao aumento da vazão não é muito acentuado.

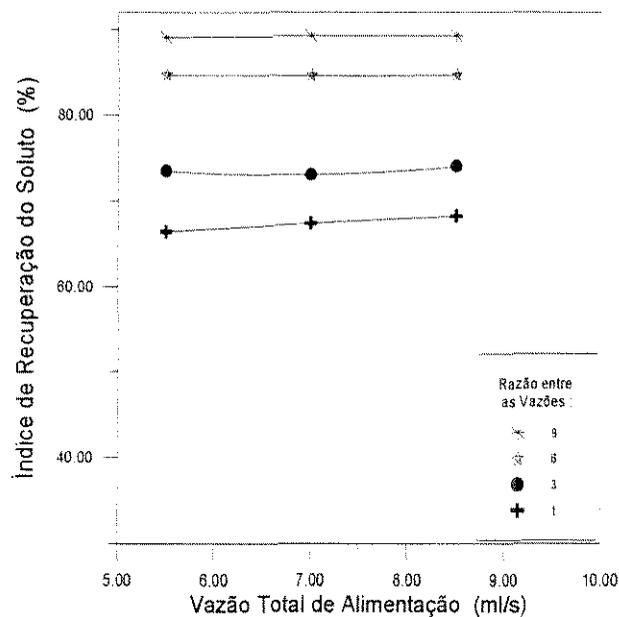


Figura VI.7 - Gráfico do índice de Recuperação do Soluta pela Vazão total de alimentação para 14% de área livre e 2 rps de velocidade de rotação das palhetas

VI. 2. 4 - Área livre das palhetas

A quarta variável a ser analisada é a área livre das palhetas. Observando-se as figuras VI.2 e VI.8, nota-se um aumento no índice de recuperação do soluto com o aumento da área livre das palhetas. Isso ocorre devido ao aumento da superfície de contato entre as duas fases. A taxa de transferência de massa é diretamente proporcional à superfície de contato entre as fases. O aumento da área livre promove também o aumento da turbulência no interior da coluna melhorando a mistura entre as fases. Como pode ser notado na figura VI.2, esse aumento não é muito acentuado, sendo maior nas velocidades entre 0 e 2 rps e menor para velocidades acima de 2 rps, devido aos fatores já comentados no item VI.2.1.

Nas condições mais favoráveis à transferência de massa, o índice de recuperação do soluto alcança valores da ordem de 90 %.

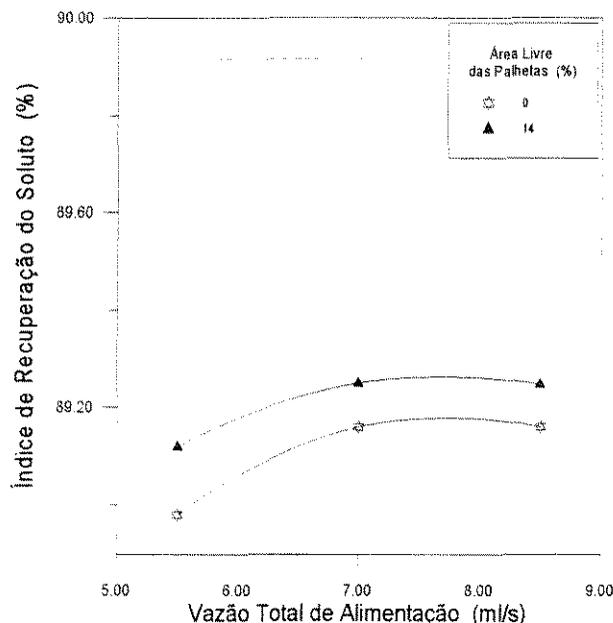


Figura VI.8 - Gráfico do índice de Recuperação do Solute pela Vazão total de alimentação para razão entre as vazões igual a 9 e 2 rps de velocidade de rotação das palhetas

VI. 3- Eficiência de separação (Eficiência de Murphree)

Aplicando-se na equação II.1 os valores das concentrações de equilíbrio (obtidos através do programa de computador) e os valores das concentrações de entrada e saída da coluna da fase refinado (constituída basicamente de butanol e ácido acético), lembrando que a equação II.1 é a definição da Eficiência de Separação, proposta por Murphree, pode-se observar o comportamento abaixo comentado.

As concentrações de equilíbrio usadas são referentes às condições de saída da fase refinado ou da fase extrato. Assim, devido às condições de escoamento , encontra-se a composição de saída da fase refinado que estaria em equilíbrio com a composição de entrada da fase extrato ou a composição de saída da fase extrato que estaria em equilíbrio com a composição de entrada da fase refinado.

Treybal [5, 28] apresenta esta equação para a expressão da eficiência de separação.

Deve ser ressaltado que o índice de recuperação do soluto é a medida da quantidade de soluto que foi extraída durante o processo, enquanto a

eficiência de Murphree é uma medida de quanto o sistema se aproxima do equilíbrio.

Ambas as medidas apresentaram comportamento semelhante. No geral, a eficiência de Murphree apresenta valores um pouco maiores que o índice de recuperação de soluto.

As tabelas referentes à eficiência de Murphree encontram-se no apêndice D, tabelas D.8.1 até D.8.5.

VI. 3. 1. - A velocidade de rotação

A primeira variável a ser analisada é a velocidade de rotação das palhetas. Como acontece com o índice de recuperação do soluto, nota-se um aumento na eficiência com o aumento da velocidade de rotação das palhetas. É verificado que esse aumento é mais acentuado a baixas velocidades de rotação (variando entre 0 e 2 rps). Nas velocidades de rotação mais altas, ocorre um aumento na eficiência, mas este aumento é menos acentuado. Esse comportamento pode ser verificado nas figuras VI.9 e VI.10.

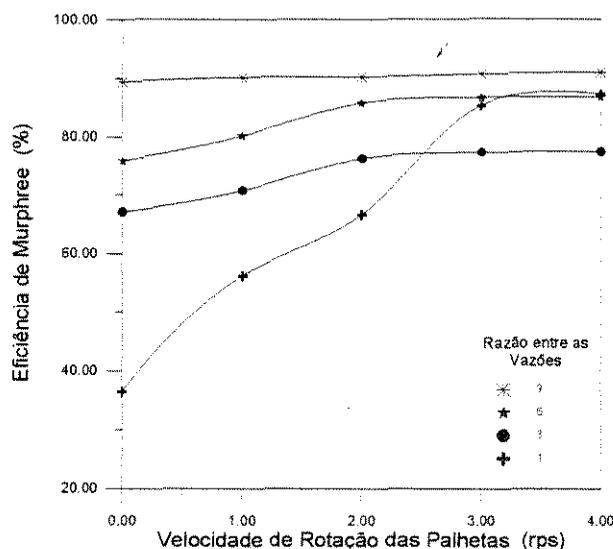


Figura VI.9 - Gráfico da Eficiência de Murphree pela Velocidade de Rotação das Palhetas para 14% de Área Livre das Palhetas e 5,5 ml/s de Vazão Total de Alimentação

Os fatores que provocam este comportamento são os mesmos que foram comentados na análise do índice de recuperação do soluto. Em resumo são:

- A baixas velocidades : a diminuição no tamanho das gotas, aumento da mistura entre as fases e turbulência, sendo que estes fatores aumentam a transferência de massa;

- A altas velocidades : o aparecimento do “ *backmixing* ”, aumento da resistência imposta pelas palhetas ao escoamento, entre outros, sendo que estes fatores prejudicam o processo de transferência de massa.

Com velocidade de rotação acima de 3 rps e razão entre as vazões igual a 1, a eficiência aumenta acentuadamente. Com esta condição de operação, o comportamento da eficiência, que reflete o comportamento do sistema, é instável. Nessas condições, a tendência de ocorrer inundação na coluna é maior, pelas razões já comentadas para o comportamento do Índice de Recuperação do Solutos.

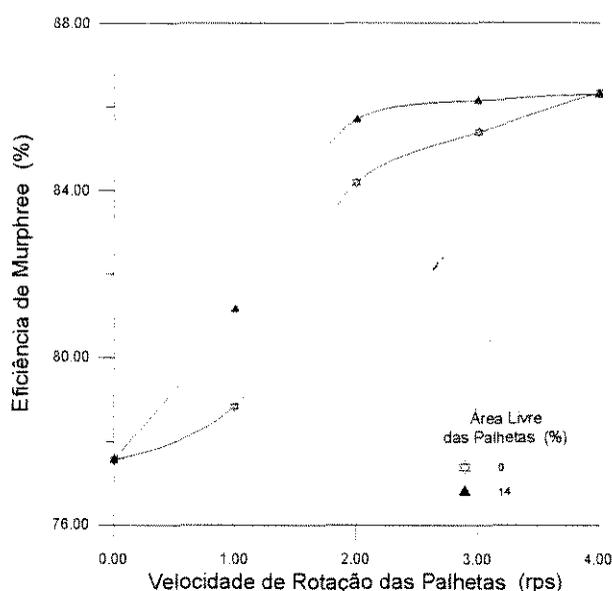


Figura VI.10 - Gráfico da Eficiência de Murphree pela Velocidade de Rotação das Palhetas para Razão entre as Vazões de 6 e 7,0 ml/s de Vazão Total de Alimentação

VI. 3. 2 - A razão entre as vazões das fases contínua e dispersa

A segunda variável a ser analisada é a razão entre as vazões de alimentação das fases. Observando-se a figura VI.9, nota-se um aumento na eficiência com o aumento da razão entre as fases de alimentação. Isso ocorre porque uma maior quantidade de solvente pode extrair mais soluto e, assim, a

fase refinado aproxima-se mais do equilíbrio, o que é verificado pelo aumento da eficiência de Murphree.

VI. 3. 3 - A vazão total de alimentação

A terceira variável analisada é a vazão total de alimentação das fases. Na figura VI.11, verifica-se o aumento da eficiência com o aumento da velocidade de rotação e também com o aumento da vazão total de alimentação para velocidades de rotação das palhetas acima de 2 rps.

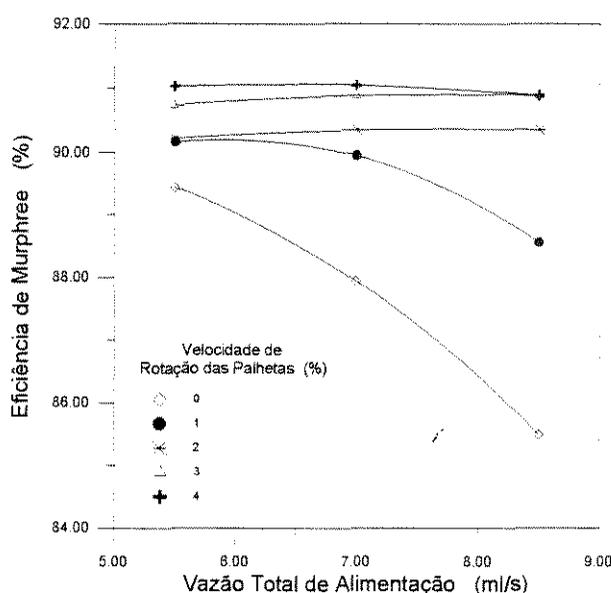


Figura VI.11 - Gráfico da Eficiência de Murphree pela Vazão Total de Alimentação para Razão entre as Vazões de 9 e Área Livre das Palhetas igual a 14%

Para velocidades de rotação baixas (entre 0 e 1 rps), o aumento da vazão total de alimentação diminui a eficiência, ou seja, o sistema se encontra mais afastado do equilíbrio. Os motivos que causam este comportamento são os mesmos comentados para o índice de recuperação do soluto. O aumento da vazão total de alimentação faz com que o tempo de contato entre as fases seja menor e isso faz com que o sistema se mantenha mais afastado do equilíbrio. Com velocidades de rotação mais elevadas (acima de 2 rps), o aumento da mistura e da turbulência, faz com que o tempo de contato entre as fases aumente e com isso o sistema se aproxime do equilíbrio.

Nesta figura, nota-se também que com velocidade entre 3 e 4 rps, o aumento da eficiência é menor. Com altas vazões e altas velocidades, esse aumento é praticamente nulo, isto demonstra que neste caso os efeitos de retorno axial da fase dispersa e resistência ao escoamento imposta pelas palhetas começam a impedir que o sistema se aproxime mais do equilíbrio.

VI. 3. 4 - A área livre das palhetas

Nas figuras VI.10 e VI.12, pode-se notar um aumento na eficiência com o aumento da área livre das palhetas. Com o aumento da área livre, aumenta a superfície de contato entre as duas fases e também a turbulência no interior da coluna. Isso provoca uma melhor mistura das fases e a diminuição do diâmetro médio das gotas, além de aumentar o tempo de contato entre as gotas e a fase contínua. Esses fatores aproximam o sistema do equilíbrio, o que é verificado pelo aumento da eficiência de Murphree.

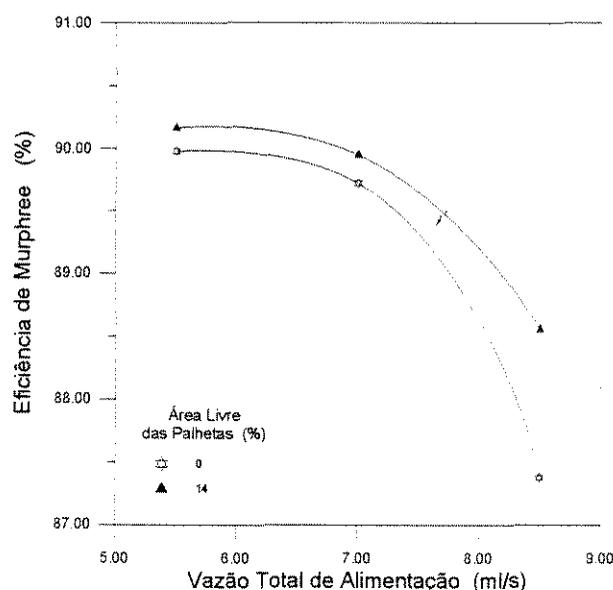


Figura VI.12 - Gráfico da Eficiência de Murphree pela Vazão Total de Alimentação para Razão entre as Vazões de 9 e Velocidade de Rotação das Palhetas de 1 rps

Como pode ser observado nas tabelas D.8.1 até D.8.5 do apêndice D, é possível obter eficiências da ordem de 91 %, nas melhores condições de operação. Para valores da velocidade de rotação das palhetas entre 3 e 4 rps ocorre uma pequena diminuição da eficiência com o aumento da área livre das palhetas de 0% a 14%. Isto ocorre devido à turbulência excessiva que prejudica a aproximação do equilíbrio. Além disso, ocorrem o *backmixing*, o *backflow* e a resistência imposta pelas palhetas ao escoamento de maneira mais acentuada.

Além destes fatores, existem os erros (desvios) no cálculo do equilíbrio. Como pode ser visto para o Índice de recuperação do soluto, o aumento da eficiência devido ao aumento da área livre das palhetas é muito pequeno, na maioria dos casos, não chegando a 1%; com isso, um erro também pequeno no valor de equilíbrio calculado, pode causar essa queda da eficiência.

Esse comportamento é verificado para o NUT e a Eficiência Global, também. Sendo que, todas essas medidas relacionam-se às condições de equilíbrio.

Outro fator importante é o comportamento do sistema para razão entre vazões igual a 1. Para a eficiência de Murphree, em alguns casos, o sistema apresenta um aumento da eficiência para esta razão entre as vazões. Mas deve-se lembrar que o sistema apresenta um comportamento instável nesta condição, havendo uma maior tendência de ocorrer a inundação da coluna.

VI. 4 - NUT - Número de unidades de transferência

Treybal [5] sugere que o número de unidades de transferência (NUT) é uma das maneiras mais adequadas de se expressar a eficiência de operação de colunas que operam continuamente (colunas diferenciais), já que para chegar-se a esse valor emprega-se uma análise diferencial da variação de concentração na coluna.

Usando-se os valores de equilíbrio e os valores das concentrações de entrada e saída da fase refinado na equação II. 2 para o cálculo do NUT, pode-se avaliar a performance da coluna em relação a essa medida. A integração da equação II. 2 foi realizada através de um método numérico. O escolhido foi a regra dos trapézios repetida. Os valores das concentrações de equilíbrio foram encontrados através do programa de computador que faz uso do modelo termodinâmico de predição UNIQUAC. Com os dados de equilíbrio obtidos, construiu-se uma curva de distribuição do ácido acético entre as fases refinado e extrato e desta curva obteve-se os valores de equilíbrio usados. É um procedimento usado também para encontrar-se as concentrações de equilíbrio que foram usadas na equação II.1, para a eficiência de Murphree.

A equação (II.2) para o cálculo de NUT é uma simplificação da equação (IV.23). Se a concentração de soluto for pequena, esta simplificação é válida. Neste trabalho, verificou-se a validade dessa simplificação, visto que

realizou-se cálculos com ambas as equações e obteve-se resultados praticamente idênticos. Deve-se lembrar que o sistema com o qual os experimentos foram realizados era bastante diluído.

Da teoria, sabe-se que quanto maior o valor de NUT, mais próximo o sistema estará do equilíbrio e maior terá sido a extração que ocorreu na coluna.

Outra maneira de analisar o NUT é quanto à dificuldade de extração. O gradiente de concentração é a força-motriz da transferência de massa e quanto menor ele for, mais lenta e mais difícil será a transferência de massa. Gradientes pequenos significam que o sistema está próximo do equilíbrio e o valor do NUT, nestes casos, é maior. Deve ser comentado que a dificuldade de extração não significa que o sistema possui baixa eficiência, mas sim que ele está próximo ao equilíbrio.

Observando-se as figuras VI.13 a VI.16, nota-se um comportamento semelhante ao observado na eficiência de Murphree. Assim, pode-se dizer que os fenômenos que ocorrem no interior da coluna atuam sobre o NUT da mesma forma que atuam sobre a eficiência de Murphree, já que ambos estão relacionados ao equilíbrio entre as fases.

Os valores obtidos para o NUT encontram-se no apêndice D, nas tabelas D.9.1 até D.9.5.

VI. 4. 1 - A velocidade de rotação das palhetas

Ocorre um aumento do NUT com o aumento da velocidade de rotação das palhetas. Os efeitos da velocidade de rotação no valor de NUT podem ser verificados nas figuras VI.13 e VI.14.

Nota-se que o aumento é mais acentuado para velocidades de rotação entre 0 rps e 3 rps. Os fatores que atuam sobre o NUT são os mesmos que atuam sobre a eficiência de Murphree e o índice de recuperação do soluto.

Para a razão entre as vazões igual a 1, nota-se, a altas velocidades de rotação, um comportamento diferente do esperado. Ocorre um aumento muito acentuado no NUT. Os motivos para esse comportamento também foram comentados anteriormente

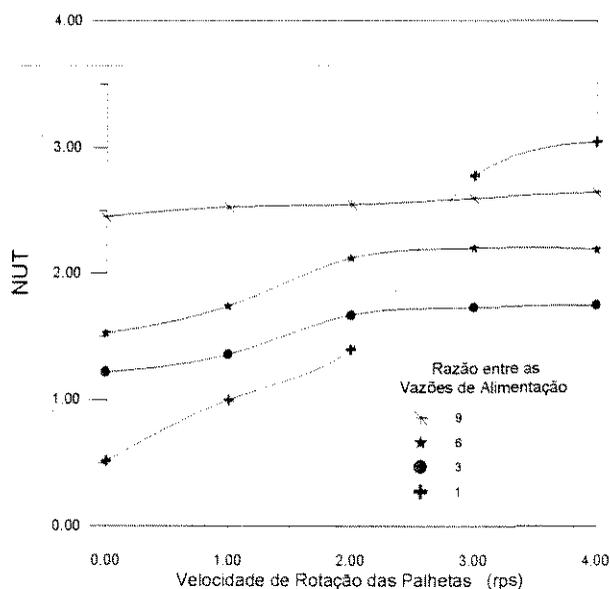


Figura VI.13 - Gráfico do NUT pela Velocidade de Rotação das Palhetas para 5,5 ml/s de Vazão total de Alimentação e Área Livre das Palhetas de 14%

VI. 4. 2 - Razão entre as vazões

Observando-se a figura VI.13, verifica-se o aumento do NUT com o aumento da razão entre as fases solvente / alimentação. Isso mostra que ocorre um aumento da extração e uma aproximação do equilíbrio entre as fases com o aumento da razão solvente / alimentação. Isso ocorre porque uma maior quantidade de solvente pode extrair mais soluto. Este fato foi comentado anteriormente para a eficiência de Murphree. Como também já foi comentado o comportamento do sistema a altas velocidades de rotação para a razão entre as vazões igual a 1, quando ocorre um grande aumento na eficiência, aumentando também a tendência à inundação da coluna.

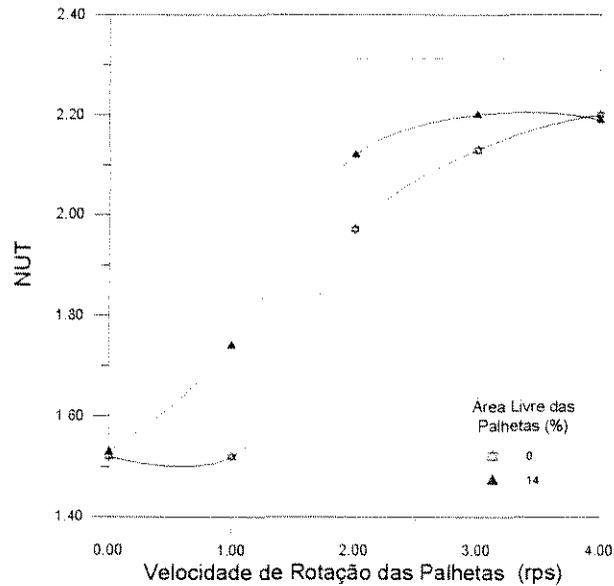


Figura VI.14 - Gráfico do NUT pela Velocidade de Rotação das Palhetas para 5,5 ml/s de Vazão Total de Alimentação e Razão entre as Vazões de 6

VI. 4. 3 - A vazão total de alimentação

Observando a figura VI.15, verifica-se o aumento do NUT com o aumento da vazão total de alimentação para velocidades de rotação das palhetas acima de 2 rps e o comportamento inverso para velocidades menores (abaixo de 2 rps).

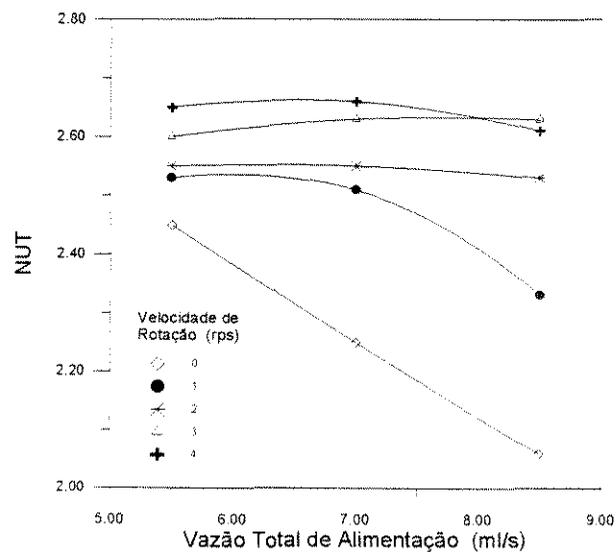


Figura VI.15 - Gráfico do NUT pela Vazão Total de Alimentação para 14% de Área Livre das Palhetas e Razão entre as vazões de 9

O aumento nos valores de NUT são pequenos, embora a sua queda para velocidades baixas (entre 0 e 1 rps) seja mais acentuada.

Como para a eficiência de Murphree, um dos motivos que causam esse comportamento a baixas velocidades de rotação das palhetas é o aumento da vazão total que torna o tempo de contato entre as fases menor e com isso a eficiência de transferência de massa diminui também, o que pode ser verificado pelo decréscimo do NUT.

Para a velocidade de rotação das palhetas de 4 rps, com a vazão total de alimentação igual a 8,5 ml/s, houve uma pequena diminuição no valor de NUT, como houve no valor da eficiência de Murphree. Isso ocorre devido aos fatores já comentados para a eficiência de Murphree, que são o “ *backmixing* ” e o aumento da resistência ao escoamento imposta pelas palhetas, associados com a excessiva turbulência que ocorre devido ao aumento da vazão, o que prejudica o escoamento no interior da coluna.

VI. 4. 4 - A área livre das palhetas

Através das figuras VI.14 e VI.16, nota-se o aumento do NUT com o aumento da área livre das palhetas.

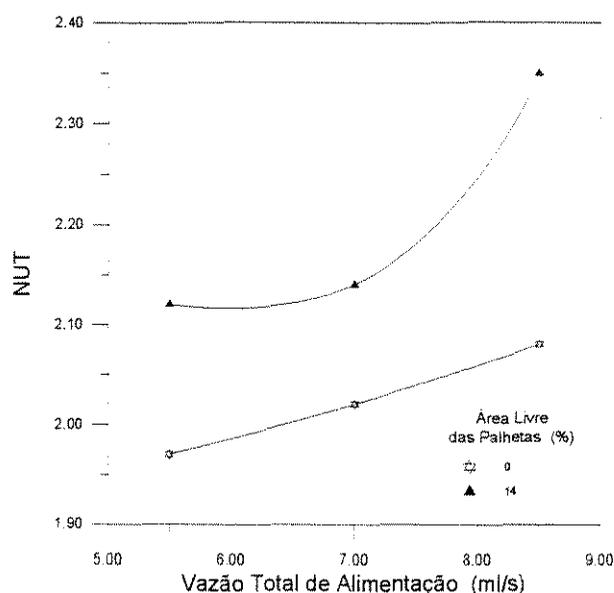


Figura VI.16 - Gráfico do NUT pela Vazão Total de Alimentação para Razão entre as Vazões igual a 6 e Velocidade de Rotação das Palhetas igual a 2 rps

Este aumento ocorre devido ao aumento da turbulência e da superfície de contato entre as fases que são provocados pelo aumento da área livre das palhetas.

Pode ser observado que o aumento de NUT devido ao aumento da área livre das palhetas não é elevado.

Os valores de NUT para as melhores condições de transferência de massa estão em torno de 2,65.

Para os valores de NUT, como para a eficiência de separação, o índice de recuperação do soluto e NET, são muito importantes as propriedades físicas e químicas do sistema ternário em estudo, além das condições de operação da coluna.

VI. 5 - NET (Número de Estágios Teóricos) e Eficiência Global

Uma outra forma de medir a eficiência é através do número de estágios teóricos (NET) que são requeridos para que uma certa extração seja obtida, o qual é calculado pela equação IV.14. A medida que relaciona o número de estágios teóricos com o número de estágios reais é dada pela equação IV.35, chamada de eficiência global.

O número de estágios teóricos (NET) não é um método adequado para o estudo deste tipo de coluna porque considera que em cada estágio ocorra a mistura e a decantação completa das fases, o que na realidade não ocorre neste equipamento, cuja operação é contínua (diferencial). Essa forma de operação da coluna é comprovada pelos resultados experimentais. Para o cálculo da eficiência global, considerou-se que a coluna era composta por três estágios, formados pelas três seções de mistura, cada uma com um conjunto de palhetas para promover a mistura. Os resultados para essa forma de representação da eficiência não se mostraram adequados, apresentando comportamento satisfatório, mas valores numéricos muito baixos em comparação às outras formas de representar a eficiência.

Um outro fator que compromete os resultados obtidos por esse modo de representar a eficiência (NET) é a forma de calculá-lo. Nos cálculos, considera-se que a distribuição do soluto entre as fases seja representada por uma reta na faixa de concentração considerada, o que neste caso não ocorre.

É interessante salientar que de acordo com a dedução da equação de eficiência de Murphree, considera-se que a coluna opere como sendo um estágio de equilíbrio. E para este caso, os resultados foram coerentes e comportaram-se do modo esperado. Esse fato, portanto, comprova que a coluna opera de modo diferencial, comportando-se como um único estágio onde ocorre a mistura e separação das fases.

A seguir, nas figuras VI.17 até VI.20, serão mostrados alguns gráficos que demonstram o comportamento da eficiência global obtida pelas equações (IV.14 e IV.35), para colunas diferenciais, em especial para este caso : coluna de extração agitada por palhetas rotativas.

Os resultados para a eficiência global e para o NET encontram-se no apêndice D, nas tabelas D.10.1 até D.10.5.

VI.5.1 - A velocidade de rotação das palhetas

Nas figuras VI.17 e VI.18, nota-se que o comportamento da eficiência global é semelhante ao das outras formas de expressar a eficiência, comentados anteriormente. A diferença está nos valores numéricos da eficiência global, que neste caso varia entre 20% e 30%. Esses valores estão bem abaixo dos encontrados pelos outros métodos de obter-se a eficiência.

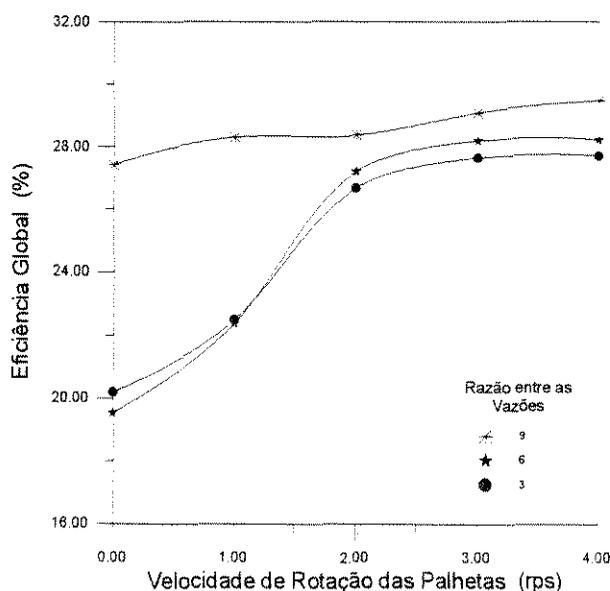


Figura VI.17 - Gráfico da Eficiência Global pela Velocidade de Rotação das Palhetas para 14% de Área Livre das Palhetas e 5,5 ml/s de Vazão Total de Alimentação

Nestes gráficos, não foram apresentados os dados referentes à razão entre as vazões igual a 1, porque esses valores tiveram um aumento muito acentuado, prejudicando a visualização no gráfico. Esses valores podem ser vistos nas tabelas.

VI.5.2 - Razão entre as vazões de alimentação

Na figura VI.17, pode ser visto que a eficiência global aumenta com o aumento da razão entre as vazões, como para os outros casos.

Os motivos para este comportamento são os mesmos comentados para as outras formas de representar a eficiência, apresentadas anteriormente.

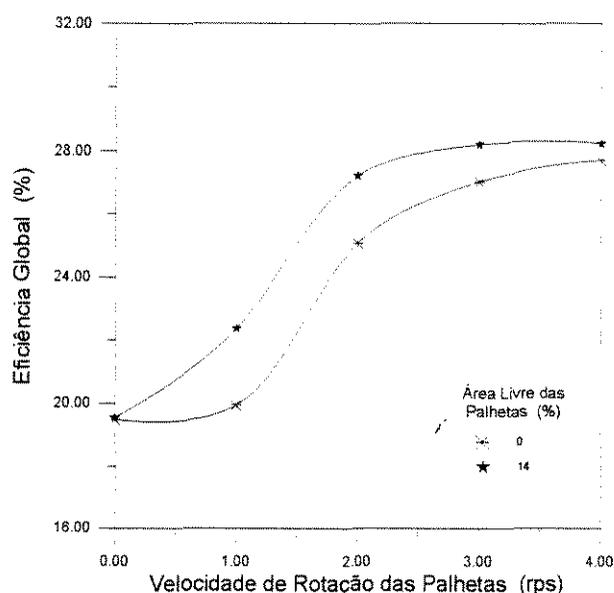


Figura VI.18 - Gráfico da Eficiência Global pela Velocidade de Rotação das Palhetas para Razão entre as Vazões de Alimentação igual a 6 e 5,5 ml/s de Vazão Total de Alimentação

VI.5.3 - A vazão total de alimentação

Na figura VI.19, pode ser visto o comportamento da eficiência global em relação à vazão total. O comportamento é semelhante aos outros casos.

Como a eficiência global está relacionada ao equilíbrio, através do NET, é esperado que o comportamento desta seja semelhante ao da eficiência de Murphree e do NUT. O que demonstra que ela não é adequada para a análise deste tipo de coluna é o fato dos valores serem muito baixos.

VI.5.4 - A área livre das palhetas

Nas figuras VI.18 e VI.20, pode ser visto o comportamento da eficiência global com relação à área livre das palhetas. A eficiência aumenta com o aumento da área livre das palhetas, como era esperado.

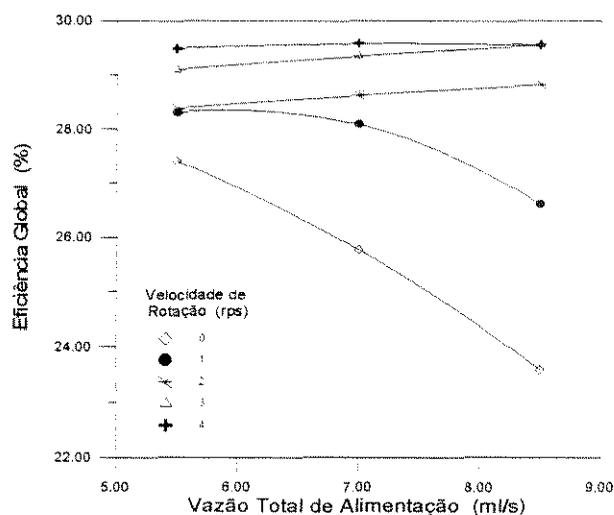


Figura VI.19 - Gráfico da Eficiência Global pela Vazão Total de Alimentação para 14% de Área Livre das Palhetas e Razão entre as Vazões igual a 9

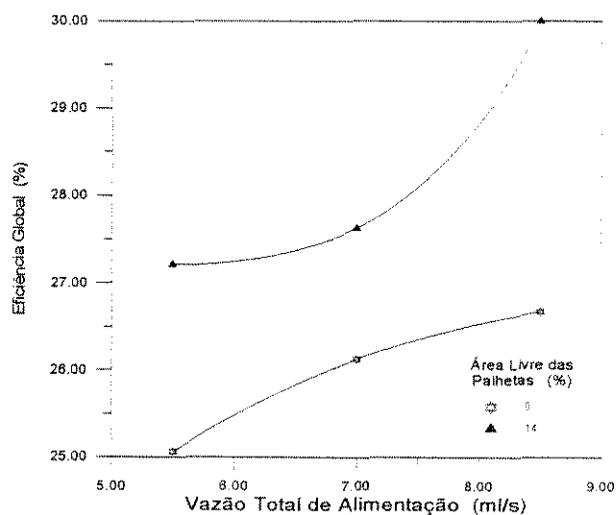


Figura VI.20 - Gráfico da Eficiência Global pela Vazão Total de Alimentação para Velocidade de Rotação igual a 2 rps e Razão entre as Vazões igual a 6

VI. 6 - Modelagem matemática para a Eficiência de Murphree

Após realizada a análise da influência de cada parâmetro operacional e geométrico sobre a eficiência de separação, realizou-se um estudo que possibilitou a obtenção de uma equação empírica que descreve o comportamento da eficiência em relação a estes parâmetros, a partir da correlação dos dados experimentais. Esta correlação foi obtida para a eficiência de separação dada pela equação (II.1), por esta ser mais empregada em projetos e estudos.

Com este fim, realizou-se uma análise dimensional dos parâmetros estudados através do Teorema Π de Buckingham e usando a regressão linear multivariável dos dados experimentais. Esses métodos são apresentados no anexo I e apêndice C, respectivamente.

VI.6.1 - Obtenção do modelo matemático

A correlação para a Eficiência de Separação, a partir dos dados experimentais e da teoria apresentada no anexo I e no apêndice C, é função dos seguintes parâmetros :

$$E^* (\%) = f (L, N, \rho_C, \mu_C, V_C, V_d, Al, g, Q_T, t_{op}, v)$$

onde :

t_{op} = tempo de operação da coluna (s) - (ou tempo necessário para o sistema atingir o estado estacionário)

Q_T = vazão total de entrada das fases na coluna (cm^3/s);

g = aceleração da gravidade (cm / s^2);

L = comprimento da região de extração (cm);

N = velocidade de agitação das palhetas (rotações por segundo - rps);

ρ_C = massa específica da fase contínua (g/cm^3);

v = volume da coluna (cm^3);

μ_C = viscosidade da fase contínua ($\text{g}/\text{cm s}$);

V_C = vazão da fase contínua (ml/s);

V_d = vazão da fase dispersa (ml/s);

A_l = área livre das palhetas (%).

Sendo que para o caso em estudo, tem-se :

$$\rho_C = 0,9961 \text{ g/cm}^3, \quad \mu_C = 875,75 \times 10^{-5} \text{ g/cm s}, \quad v = 2093,56 \text{ cm}^3,$$

$g = 981 \text{ cm/s}^2$ e $L = 85 \text{ cm}$; esses valores são constantes.

Após a análise dimensional dos parâmetros, obteve-se cinco grupos adimensionais, sendo que a seguinte expressão adimensional foi obtida :

$$E^* = C_0 [F_1^{C_1} \cdot F_2^{C_2} \cdot F_3^{C_3} \cdot F_4^{C_4} \cdot F_5^{C_5}]$$

onde :

E^* : é a variável dependente = Π_1

F_1 : número de Reynolds de agitação = $\Pi_2 = L^2 \cdot N \cdot \rho_C / \mu_C$

F_2 : razão entre as vazões das fases contínua e dispersa (solvente / alimentação) = $\Pi_3 = V_C / V_d$

F_3 : área livre das palhetas = $\Pi_4 = A_l$

F_4 : o inverso do número de Froude = $\Pi_5 = N^2 \cdot L / g$

F_5 : relação entre a vazão e o tempo de operação da coluna e o volume da coluna = $\Pi_5 = Q_T \cdot t_{op} / v$

A seguir, fez-se a linearização do modelo apresentado acima através de transformações convenientes e após este procedimento, aplicou-se a regressão linear multivariável para se obter os coeficientes correspondentes aos expoentes C_N . Esses coeficientes foram determinados com base nos dados experimentais obtidos segundo o método dos mínimos quadrados apresentado no anexo 1.

Obteve-se os seguintes valores para as constantes do modelo desenvolvido:

$$C_0 = 102,1252$$

$$C_1 = -0,0323$$

$$C_2 = 0,1984$$

$$C_3 = 0,0008$$

$$C_4 = 0,0191$$

$$C_5 = - 0,0449$$

A equação do modelo é a mostrada abaixo :

$$E^* = 102,1252 \left[\left(\frac{L^2 N \rho_C}{\mu_C} \right)^{-0,0323} \cdot \left(\frac{V_C}{V_d} \right)^{0,1984} \cdot (Al)^{0,0008} \cdot \left(\frac{N^2 L}{g} \right)^{0,0191} \cdot \left(\frac{Q_T I_{op}}{v} \right)^{-0,0449} \right]$$

A comparação dos resultados experimentais com os calculados pelo modelo estão apresentados na tabela C.1 do apêndice C e na figura VI.21 que se encontra a seguir.

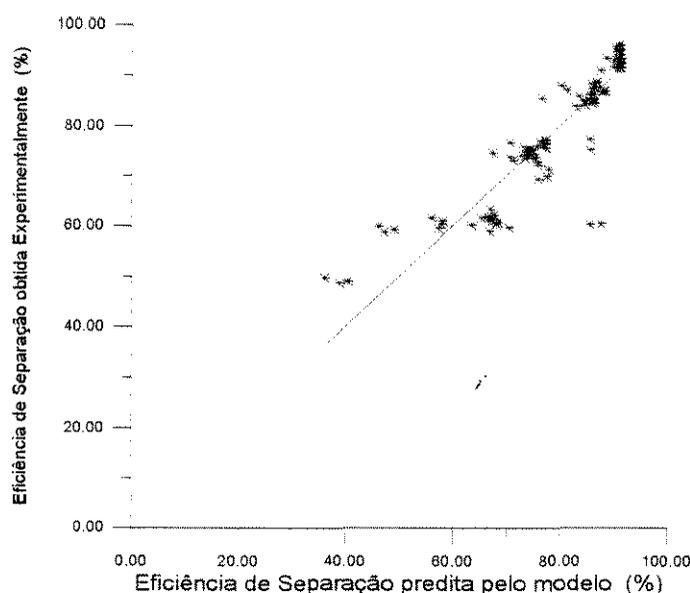


Figura VI.21 - Comparação entre os valores da eficiência de separação calculados pelo modelo e obtidos experimentalmente

Analisando-se a figura VI.21, pode-se concluir que há uma tendência ao alinhamento dos resultados calculados e experimentais, portanto o modelo ajusta satisfatoriamente os dados experimentais. O coeficiente de determinação da reta, que passa pela origem, da figura acima é 0,994914.

Observando-se a equação do modelo obtida através da análise dimensional, verifica-se que a área livre das palhetas exerce pouca influência sobre a Eficiência de Separação, o que é notado pelo valor do índice C_3 , referente a este parâmetro, que é de 0,0008. Este comportamento é observado nos resultados experimentais obtidos, onde ocorreu um aumento muito pequeno da Eficiência de Separação com o uso das palhetas com 14% de área livre.

Para o caso em que não há velocidade de rotação e área livre das palhetas, as predições estão mais sujeitas a erros. Deve-se, portanto, fazer a ressalva de que nesses casos a predição da Eficiência de Separação através do modelo matemático desenvolvido não é precisa. Esse modelo é adequado para situações onde haja agitação na coluna e área livre das palhetas, sendo que a ausência de agitação aumenta mais o erro do que a ausência da área livre das palhetas.

CAPÍTULO VII

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

VII.1 - Introdução

Nos capítulos anteriores, realizou-se uma revisão da teoria sobre a extração líquido-líquido, focalizando-se principalmente, a transferência de massa, além de uma revisão dos trabalhos publicados. Foram apresentados, também, os procedimentos experimentais e os resultados obtidos, os quais foram analisados.

Neste capítulo, serão apresentadas as conclusões finais sobre o trabalho realizado e resultados obtidos, além de sugestões para trabalhos futuros.

VII.2 - Conclusões

Após realizado o trabalho, pode-se concluir que este é um equipamento que merece mais estudo, por demonstrar ter condições de operar de maneira bastante eficiente em condições adequadas.

Algumas conclusões que podem ser feitas são :

1- A agitação melhora bastante a eficiência de separação, principalmente com velocidades até 3 rps; acima deste valor, nota-se um aumento na eficiência, mas este é muito pequeno.

2- A área livre das palhetas exerce um efeito positivo na eficiência de separação, embora este seja pouco acentuado, da ordem de 1 a 2%.

3- Pode-se notar que no interior da coluna ocorrem vários fenômenos contrários à transferência de massa, entre eles, o “backmixing” (retorno axial da fase dispersa); nota-se que as palhetas impõem uma certa resistência ao escoamento, o que prejudica a transferência de massa.

4- Quanto maior for a razão solvente/alimentação, maior será a eficiência do equipamento. Os melhores resultados de eficiência foram obtidos com a razão igual a 9. Observou-se que em certas condições, a razão igual a 3 apresenta uma queda muito brusca da eficiência. A razão solvente/alimentação igual a 1 apresenta eficiências muito baixas para baixas velocidades de rotação das palhetas e comportamento instável para elevadas velocidades de rotação das palhetas, não sendo uma escolha adequada para a maioria das operações da coluna. Com esta razão, a tendência de ocorrer a inundação na coluna é maior do que com as outras razões.

5- O aumento da vazão total das fases aumenta a eficiência para velocidades de rotação acima de 2 rps. Para velocidades mais baixas, ocorre o contrário, devido à diminuição do tempo de residência na coluna com o aumento da vazão. Com velocidades mais elevadas, este efeito é equilibrado pelo aumento da turbulência, o que aumenta o tempo de residência na coluna e demais fatores já comentados no capítulo VI.

6- Quanto às formas de avaliar a coluna, pode-se concluir que o índice de recuperação do soluto e a eficiência de Murphree fornecem resultados coerentes tanto quantitativamente quanto qualitativamente. Os valores do número de unidades de transferência também comportam-se de maneira coerente com as duas outras formas de se expressar a eficiência, sendo que segundo Treybal [5], para processos contínuos e de escoamento contracorrente, o número de unidades de transferência é uma das formas mais adequadas de se expressar a eficiência. Quanto à eficiência global, qualitativamente, ela apresenta um comportamento satisfatório, mas quantitativamente, ela apresenta valores muito inferiores aos obtidos pelos outros métodos. Sabe-se que na definição do número de estágios teóricos, que faz parte da equação da eficiência global, considera-se que há a mistura e decantação total das fases em cada estágio, o que neste tipo de coluna, não acontece, já que esta é uma coluna de contato contínuo. Outro fator contrário ao uso desta equação, é que na equação usada para o cálculo do número de estágios teóricos, considera-se que a distribuição do soluto entre as fases ocorra de modo que o gráfico seja uma reta, na faixa de concentrações estudada e isto não ocorre no caso analisado, para este sistema ternário.

7- Obteve-se um modelo matemático que fornece resultados razoavelmente adequados para a eficiência de separação (Murphree). Optou-se por encontrar o modelo para esta eficiência por esta ser amplamente empregada e ser mais adequada para fins de comparação e projeto do que as demais formas de representar a eficiência.

Por fim, pode-se concluir que para o sistema ternário água-ácido acético-butanol, nas condições de operação usadas, a coluna apresenta eficiências bastante elevadas, chegando a aproximadamente 90%, em condições adequadas, como por exemplo : razão entre as vazões igual a 9; vazão total das fases igual a 8,5 ml/s; área livre das palhetas igual a 14% e velocidade de rotação das palhetas entre 3 e 4 rps.

VII.3 - Sugestões

Algumas sugestões para trabalhos futuros são :

1- Estudo da coluna com outros sistemas ternários.

2- Estudo deste tipo de coluna em escala piloto.

3- Estudo da transferência de massa, através da obtenção dos coeficientes de transferência de massa individuais ou globais.

4- Análise do tamanho de gotas obtido neste tipo de coluna, já que a transferência de massa ocorre entre as gotas da fase dispersa e a fase contínua e sabe-se que o comportamento das gotas é de fundamental importância na transferência de massa.

5- Variação de outros parâmetros geométricos, tais quais : número de palhetas e largura das mesmas, visto que as palhetas impõem uma certa resistência ao escoamento.

6- Realizar uma otimização dos parâmetros operacionais envolvidos no processo de extração neste tipo de coluna.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1- Hanson, C.. "Solvent Extraction ...", *Chemical Engineering*, August 26: 77-98; 1968.

2- Coleb, J., In Hanson, C.. *Recent Advances in Liquid-Liquid Extraction*, New York : Pergamon Press; 1971.

3- Hanson, C.. *Recent Advances in Liquid-Liquid Extraction*, New York : Pergamon Press Ltd; 1971.

4-Humphrey, J.L.; Rocha, J.A.; Fair, J.R.." The essentials of extraction", *Chemical Engineering*, September 17 : 76 - 95; 1984.

5- Treybal, R.E.. *Liquid Extraction*, 2^a ed., New York : McGraw-Hill; 1963.

6- Hanson, C.."Recent Research in Solvent Extraction", *Chemical Engineering*, September 9 : 135 - 142; 1968.

7- Dickey, D.S.; Hemrajani, R.R.. " Recipes for fluid mixing", *Chemical Engineering*, March : 82 - 89; 1992.

8- Rod, V.. "Calculating mass transfer with longitudinal mixing", *British Chemical Engineering*, 2 (6) : 483 - 487 ; 1966. ,

9- Reman, G.H.. "A new efficient extraction apparatus : the rotating disc contactor", *Proceedings Third World Petroleum Congress - Section III* : 121-131; 1951.

10- Murphree, E.V.. "Rectifying Column Calculations - With Particular Reference to N Component Mixtures", *Industrial and Engineering Chemistry*, 17 (7): 747-750 ; 1925.

11- Smoot, L.D.; Babb, A.L.. "Mass Transfer Studies in a Pulsed Extraction Column", *I & EC Fundamentals*, 1 (2) : 93 - 103; 1962.

12- Iannou . "Mass Transfer and Power Consumption in Reciprocating Plate Extractors", *Ind. Eng. Chem. Process Dev.* , 15 (3) : 469 - 471 ; 1976.

13- Khemangkorn, V.; Molinier, J.; Angelino, H.."Influence os Mass Transfer Direction on Efficiency of a Pulsed Perforated Plate Column", *Chemical Engineering Science*, 33: 501-508; 1978.

- 14- Laddha, G.S.; Degaleesan, T.E.; Kannappan, R.. "Hydrodynamics and Mass Transport in Rotary Disk Contactors", *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 56: 137-150 ; 1978.
- 15- Kawase, Y.. "Dispersed-Phase Holdup and Mass Transfer in a Rotating Disc Contactor with Perforated Skirts", *J. Chem. Tech. Biotechnol.*, 48 : 247-260 ; 1990.
- 16- Korchinsky, W.J.; Loke, C.T.; Cruz-Pinto, J.J.C.. "Optimisation of drop size in countercurrent flow liquid-liquid extraction columns", *Chem. Eng. Sci.*, 37 : 781-786; 1982.
- 17- Chartes, R.H.; Korchinsky, W.J.. "Modelling of liquid-liquid extraction columns: predicting the influence of drop size distribution", *Trans. Instn. Chem. Eng.*, 53 : 247-254 ; 1975.
- 18- Korchinky, W.J.; Al-Husseini, R.. "Liquid-liquid extraction column (rotating disc contactor) - model parameters from drop size distribution and solute concentration measurements", *J. Chem. Tech. Biotechnol.* , 36 : 395 - 409 ; 1986.
- 19- Coimbra, J.S.R.. "Análise da eficiência de extração em colunas de discos rotativos na purificação do ácido láctico", Tese de mestrado, UNICAMP, Campinas - SP; 1991.
- 20- Perazolli, L.A.. "Estudo da eficiência de separação em uma coluna de discos rotativos perfurados", Tese de mestrado, UNICAMP, Campinas - SP ; 1991.
- 21- Duarte, M.M.L.; Malmay, G.; Molinier, J.. "Estudo hidrodinâmico em uma coluna pulsada de discos e coroas", In : *Congresso Brasileiro de Eng. Química, Revista Brasileira de Engenharia*, 9 (1) : 109-118; 1992.
- 22- Lo, T.C.; Baird, M.H.I.; Hanson, C.. *Handbook of Solvent Extraction*. John Wiley & Sons ; 1982.
- 23- Coulson, J.M.; Richardson, J.F.. *Tecnologia Química*, vol.1, Lisboa : Fundação Colouste Gulbenkian ; 1974.
- 24- Whitman, W.G.. "The two-film Theory of Absorption", *Chem. and Met. Eng.* , 29 : 147 ; 1923.

- 25- Higbie, R.. "The rate of absorption of pure gas into a still liquid during short periods of exposure", *Trans. Am. Instit. Chem. Eng.* , 31 : 365 ; 1935.
- 26- Danckwerts, P.V.. "Significance of liquid film coefficients in gas absorption", *Ind. Eng. Chem.* , 43 : 1460 ; 1951.
- 27- Toor, H.L.; Marchells, J.M.. "Film penetration model for mass and heat transfer", *Am. Inst. Chem. Eng. J.*, 4 : 97; 1958.
- 28- Treybal, R.E.. *Mass Transfer Operations*, 2^a ed., McGraw-Hill, New York ; 1968.
- 29- McCabe, W.L.; Thiele, E.W.. *Ind. Eng. Chem.* , 17 : 605 ; 1925.
- 30- Prausnitz, J.; Anderson, T.; Grens, E.; Eckert, C.; Hsieh, R.; O'Connell, J.. "Computer Calculations for Multicomponent Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibria", Prentice-Hall, New Jersey ; 1980.
- 31- Fredenslund, A.; Gmehling, I.; Rasmussen, P.. "Vapor-Liquid Equilibria Using UNIFAC", Elsevier, Amsterdam; 1977.
- 32- Sorensen, J.M. et al . "Liquid-Liquid Equilibrium Data : Their Retrieval, Correlation and Prediction, Part III : Prediction", *Fluid - Phase Equilibria*, 4 : 151-163 ; 1980.
- 33- King, C.J.. *Separation Process* , McGraw-Hill, New York ; 1971.
- 34- Abrams, D.S.; Prausnitz, J.M.. "Statistical Thermodynamics of Liquid Mixtures : A New Expression for the Excess Gibbs Energy of Partly or Completely Miscible Systems", *AIChE J.*, 21 : 116 ; 1975.
- 35- Guggenheim, E.A.. *Thermodynamics*, North-Holland Publishing Co; 1952.
- 36- Sandler, S.I.. *Chemical and Engineering Thermodynamics*, 2^a ed., John Wiley & Sons ; 1989.
- 37- Skrzec, A.E.; Murphy, N.F.. "Acetic Acid in Water, with 1-Butanol, Methyl ethyl Ketone, Furfural, Cyclohexanol and Nitromethane", *Industrial and Engineering Chemistry*, 46 (10) : 2245-2247 ; 1954.

- 38- Edwards, A.L.. *Multiple regression and the analysis of variance and covariance*, University of Washington, W. H. Freeman and Company, San Francisco; 1979.
- 39- Couderc, J.P.. *Analyse dimensionnelle*, Toulouse : INP / Institut du Génie Chimique.
- 40- McCabe, W.L.; Smith, J.C.; Harriot, P.. *Unit Operations of Chemical Engineering*, 4^a ed, New York, McGraw-Hill ; 1985.
- 41- Lo, T.C.; Baird, M.H.I.. In : *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*, vol. 9, 3^a ed., New York : John wiley ; 1980.
- 42- Sorensen, J.M.; Arlt, W.. “Liquid-Liquid Equilibrium - Ternary Systems” , *DECHEMA* - Vol. V - Parte 2 : 226-227.
- 43- Pereira, A.J.G.. “Purificação do ácido láctico através de extração líquido-líquido” , Tese de Doutorado , Faculdade de Engenharia de Alimentos, UNICAMP , Campinas - SP ; 1991.
- 44- Moura, E.F.. “Estudo Hidrodinâmico e Operacional no Extrator Morris utilizando o Sistema Água-Ácido Acético-Metilisobutilcetona” , Dissertação de Mestrado, UFRN , Natal / RN ; 1994.
- 45- Ruggiero, M.A.G. ; Lopes, V.L. da R.. “Cálculo Numérico - Aspectos teóricos e computacionais” , São Paulo : Editora McGraw-Hill ; 1988.
- 46- Perry, R.H.; Chilton, C.H. In : *Chemical Engineers Handbook*, 5^a ed., New York : McGraw-Hill ; 1983.
- 47- Kirk-Othmer. *Concise Encyclopedia of Chemical Technology*, 3^a ed., New York : John Wiley & Sons ; 1985.
- 48- Korchinsky, W.J.. “Liquid-Liquid Extraction Column Modelling : Is the Forward Mixing Influence Necessary ? ”, *Trans. IChemE* , vol. 70 , Part A : 333-345 ; 1992.
- 49- Pratt, H.R.C.. “ A Simplified Analytical Design Method for Differential Extractors with Backmixing. I. Linear Equilibrium Relationship” , *Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.* , 14 (1) ; 1975.

50- Esquivel, M.M.; Bernardo-Gil, M.G.. “Liquid-Liquid Equilibria for the Systems Water- Alcohols - Acetic Acid” , *Fluid Phase Equilibria* , 57 : 307-316; 1990.

51- Fan, Z.; Oloidi, J.O.; Slater, M.J.. “Liquid-Liquid Extraction Column Design Data acquisition from Short Columns” , *Chem. Eng. Res. Des.* , 65 : 243-250; 1987.

52- Welty, J.R.; Wicks, C.E.; Wilson, R.E.. *Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer* , 3^a ed. , John Wiley & Sons ; 1984.

53- Baccan, N. et al.. *Química Analítica Quantitativa Elementar* , 2^a ed., Editora da UNICAMP, Campinas - SP ; 1979.

APÊNDICES

APÊNDICE A

*CURVAS DE CALIBRAÇÃO
DOS ROTÂMETROS*

Apêndice A - Curvas de Calibração dos Rotômetros

Neste apêndice serão apresentadas as curvas de calibração dos rotômetros usados para determinar as vazões de água e butanol, lembrando-se que na corrente de butanol também estava presente o ácido acético. Essas curvas foram obtidas experimentalmente e fazem parte dos primeiros procedimentos experimentais. Também são apresentadas as equações correspondentes a cada curva e o coeficiente de determinação das mesmas.

A.1 - Curva de Calibração do Rotômetro para o butanol

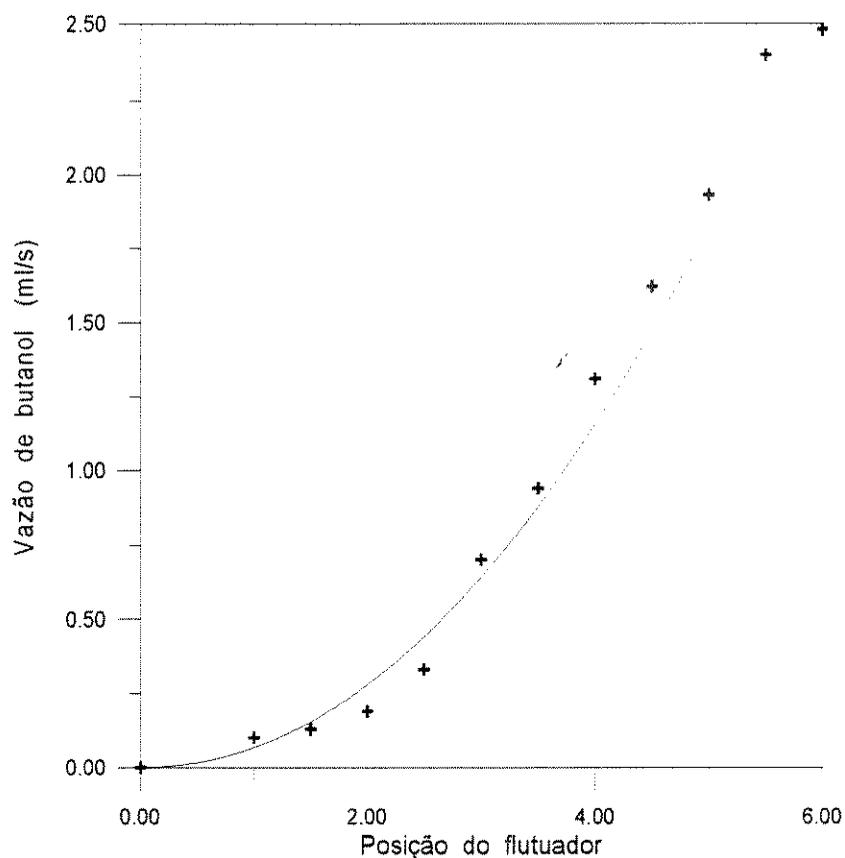


Figura A.1 - Curva de calibração do rotômetro para o butanol

A equação obtida para essa curva foi :

$$\log(y) = 2,05317 \cdot \log(x) - 2,70178$$

O coeficiente de determinação desta curva foi : 0,966984.

A.2 - Curva de Calibração do Rotômetro para a água

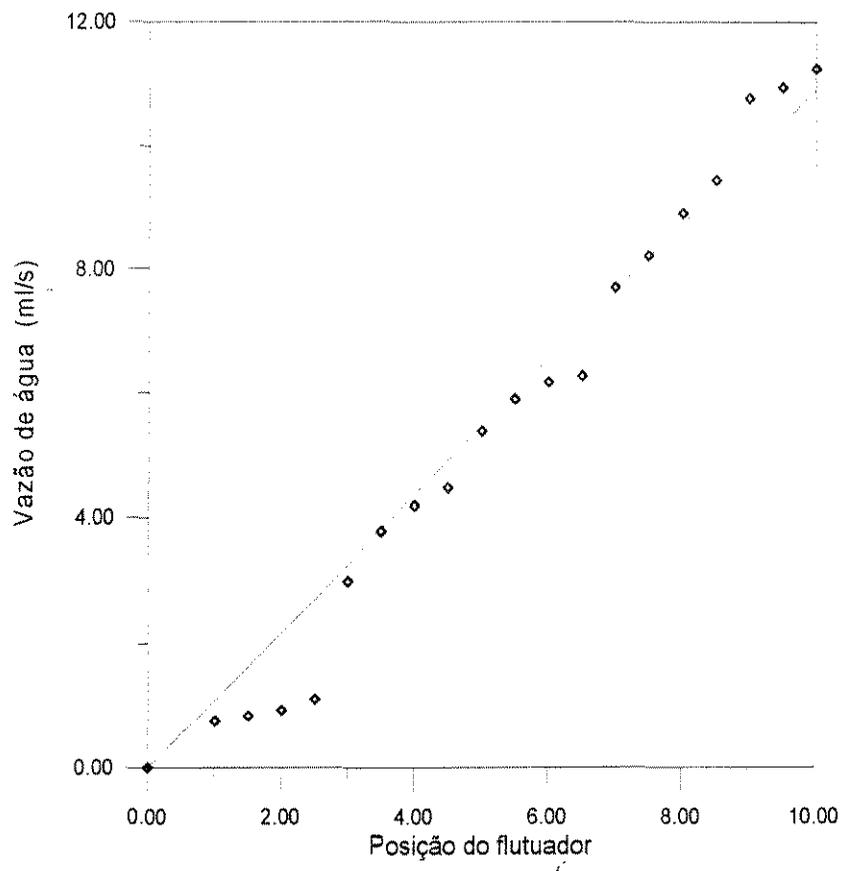


Figura A.2 - Curva de calibração do rotômetro para a água

A equação obtida para esta reta foi :

$$y = 1,0914 \cdot x$$

O coeficiente de determinação desta reta foi de 0,991274.

APÊNDICE B

***RESULTADOS REFERENTES AO
EQUILÍBRIO DE FASES***

Neste apêndice serão apresentados dados referentes ao cálculo do equilíbrio de fases.

Primeiramente, serão apresentados valores de concentrações no equilíbrio de fases a 26,7°C (linhas de amarração) para o sistema ternário: butanol-ácido acético-água e os valores dos parâmetros da equação UNIQUAC de predição. Esses valores foram obtidos no DECHEMA [42], nesta referência foi citado como fonte o artigo de Skrzec e Murphy [37].

Depois, serão apresentados os resultados relativos às concentrações de equilíbrio para o sistema ternário em estudo, obtidos com o uso de um programa de computador e a tabela usada na construção da curva de distribuição.

B.1 - Parâmetros do modelo UNIQUAC

Fontes : Skrzec e Murphy [37] e

Sorensen e Arlt [42].

Tabela B.1- Parâmetros para o modelo UNIQUAC

Componentes		Parâmetros UNIQUAC	
I	J	$A_{ij} (\tau)$	$A_{ji} (\tau)$
1	2	155,34	- 211,40
1	3	- 30,037	311,03
2	3	- 30,340	- 170,32

Outros parâmetros :

$$R1 = 3,4543$$

$$R2 = 2,2024$$

$$R3 = 0,9200$$

$$Q1 = 3,0520$$

$$Q2 = 2,0720$$

$$Q3 = 1,4000$$

Sendo que :

Os parâmetros são fornecidos em Kelvin.

Os componentes do sistema tipo I são : 1 - Butanol

2 - Ácido Acético

3 - Água

A temperatura para a qual os valores são válidos : 26,7°C.

Os desvios médios entre as concentrações molares calculadas e as experimentais para o modelo UNIQUAC são de aproximadamente 0,16.

B.2 - Linhas de amarração experimentais em porcentagens molares

Fontes : Skrzec e Murphy [37] e

Sorensen e Arlt [36].

Tabela B.2 - Linhas de amarração experimentais

Fase Leve			Fase Pesada		
(1)	(2)	(3)	(1)	(2)	(3)
48,522	0,0	51,478	1,878	0,0	98,122
46,514	1,054	52,432	1,863	0,281	97,856
44,932	1,832	53,237	1,862	0,585	97,553
43,186	2,657	54,157	1,868	0,851	97,281
41,333	3,482	55,186	1,902	1,187	96,911
39,524	4,221	56,255	1,983	1,436	96,581
35,232	5,679	59,089	2,333	2,139	95,529
31,017	6,822	62,161	2,712	2,830	94,457

B.3 - Linhas de amarração obtidas pelo programa

Tabela B.3 - Linhas de amarração obtidas pelo programa

Fase Leve			Fase Pesada		
(1)	(2)	(3)	(1)	(2)	(3)
47,256	0,884	51,860	1,542	0,255	98,204
46,811	1,071	52,118	1,561	0,311	98,126
48,124	0,518	51,357	1,505	0,146	98,349
43,031	2,988	53,981	5,981	1,845	90,602
40,434	3,595	55,971	1,903	1,216	96,882
37,730	4,581	57,689	2,093	1,658	96,249
47,086	3,270	49,644	7,984	2,345	84,950
43,489	2,421	54,090	0,1724	0,761	97,513
46,920	3,258	49,822	7,733	2,299	85,384
45,955	1,425	52,621	1,600	0,422	97,977

Comparando-se os valores das tabelas B.2 e B.3, pode-se verificar que o programa fornece valores bastante confiáveis, já que os valores das concentrações em ambas as tabelas são relativamente próximos.

B.4 - Valores usados na construção da curva de distribuição

Para a construção da curva de distribuição, usou-se os valores da concentração molar de ácido acético (componente 2) nas fases leve (refinado) e pesada (extrato). Na tabela B.3, os valores estão em porcentagem, mas nos gráficos e na tabela B.4, usou-se os valores das frações molares.

Tabela B.4 - Concentração de ácido acético no equilíbrio (valores calculados)

Fração molar de ácido acético na fase leve	Fração molar de ácido acético na fase pesada	Fração molar de ácido acético na fase leve	Fração molar de ácido acético na fase pesada
0,00732	0,00209	0,00884	0,00255
0,00888	0,00256	0,01071	0,00311
0,01425	0,00422	0,00518	0,00146
0,01742	0,00524	0,02988	0,01845
0,00733	0,00209	0,00888	0,00256
0,00906	0,00261	0,0327	0,02345
0,01437	0,00427	0,00896	0,00258
0,02862	0,01964	0,00405	0,00114
0,00743	0,00212	0,00524	0,00148
0,00914	0,00263	0,00520	0,00147
0,01429	0,00424	0,02425	0,01023
0,02417	0,01505	0,03258	0,02299

APÊNDICE C

*MODELAGEM MATEMÁTICA PARA
A EFICIÊNCIA DE SEPARAÇÃO*

Apêndice C - Modelagem Matemática para a Eficiência de Separação

Neste anexo serão apresentados os procedimentos e a teoria envolvida na modelagem matemática da eficiência de separação.

Optou-se por realizar a modelagem matemática apenas para essa eficiência por esta ser uma maneira clássica de se avaliar processos envolvendo a transferência de massa e esta ter apresentado um comportamento coerente com a teoria nas análises realizadas.

Neste apêndice também será apresentada a tabela com os resultados obtidos com o modelo matemático e os resultados medidos experimentalmente, além dos erros entre eles.

C.1 - A Análise Dimensional

Medir uma grandeza é compará-la a outra grandeza da mesma espécie, escolhida como unidade. Existe um grande número de sistemas de unidades diferentes, sendo que o mais usado é o Sistema Internacional (SI), que tem como algumas unidades fundamentais : o metro, o quilograma, o segundo e o ampère.

É importante manter a homogeneidade dimensional, princípio enunciado a seguir : “ toda relação que descreve o comportamento de um sistema físico, deve ser composta por termos com mesmas dimensões”. Este é um princípio fundamental que serviu de base para outro princípio, descrito por Buckingham.

A Teoria de Buckingham (Teorema II) diz que toda equação dimensionalmente homogênea, comportando N variáveis, pode ser reduzida a uma relação entre P grupos adimensionais. A série dos P grupos é completa se cada grupo adimensional for independente dos outros e se todos os outros grupos adimensionalmente possíveis forem idênticos a um produto de potências de um certo número de p grupos da série [39] .

O número de grupos sem dimensões p é inferior ao número inicial de variáveis N . A diferença $M = N - p$ representa o número de condições impostas para o princípio da homogeneidade dimensional; M é igual ao número máximo de variáveis que não podem formar, entre elas, um grupo adimensional.

Para uma situação física na qual o parâmetro dependente é uma função de $N-1$ parâmetros independentes, pode-se expressar a relação entre as variáveis em forma funcional como :

$$q_1 = f(q_2, q_3, \dots, q_N)$$

onde q_1 é o parâmetro dependente e q_2, q_3, \dots, q_N são os $N - 1$ parâmetros independentes. Matematicamente, pode-se expressar a relação funcional na forma equivalente

$$g(q_1, q_2, q_3, \dots, q_N) = 0$$

onde g é uma função não especificada, diferente de f e N é o número de parâmetros (grandezas físicas). Estes N parâmetros podem ser agrupados em $N - M$ razões adimensionais independentes, ou parâmetros Π , expressos sob a forma :

$$p = \Pi_1 + \Pi_2$$

ou seja

$$G(\Pi_1, \Pi_2, \dots, \Pi_{N-M}) = 0$$

ou ainda

$$\Pi_1 = G [\Pi_2, \Pi_3, \dots, \Pi_{N-M}]$$

onde M é, usualmente, igual ao menor número de grandezas independentes necessárias para especificar as dimensões de todos os parâmetros q_1, q_2, \dots, q_N . A relação funcional entre os parâmetros Π adimensionais e independentes deve ser determinada experimentalmente.

C.2 - Obtenção do modelo matemático

A correlação para a eficiência de separação, a partir dos dados experimentais e da teoria apresentada anteriormente, foi obtida, sendo que esta é função dos seguintes parâmetros :

$$E^* (\%) = f(L, N, \rho_C, \mu_C, V_C, V_d, Al, g, Q_T, t_{op}, v)$$

onde :

t_{op} = tempo de operação da coluna (s);

Q_T = vazão total de entrada das fases na coluna (cm^3 / s);

g = aceleração da gravidade (cm / s^2);

L = comprimento da região de extração do extrator (cm);

N = velocidade de rotação das palhetas (rotações por segundo - rps);

ρ_C = massa específica da fase contínua (g / cm^3);

v = volume da coluna (cm^3);

μ_C = viscosidade da fase contínua ($\text{g} / \text{cm s}$);

V_C = vazão da fase contínua (ml / s);

V_d = vazão da fase dispersa (ml / s);

Al = área livre das palhetas ($\%$).

Após a análise dimensional dos parâmetros, obteve-se cinco grupos adimensionais, sendo que a seguinte expressão adimensional foi obtida :

$$E^* = C_0 [F_1^{C1} \cdot F_2^{C2} \cdot F_3^{C3} \cdot F_4^{C4} \cdot F_5^{C5}]$$

onde :

E^* : é a variável dependente = Π_1

F_1 : número de Reynolds de agitação = $\Pi_2 = L^2 \cdot N \cdot \rho_C / \mu_C$

F_2 : Razão entre as vazões das fases contínua e dispersa (solvente / alimentação) = $\Pi_3 = V_C / V_d$

F_3 : área livre das palhetas = $\Pi_4 = Al$

F_4 : o inverso do número de Froude = $\Pi_5 = N^2 \cdot L / g$

F_5 : relação entre a vazão e o tempo de operação da coluna e o volume da coluna = $\Pi_6 = Q_T \cdot t_{op} / v$

Com este modelo obteve-se algumas predições para os valores da eficiência de separação para esta coluna e este sistema, em condições usadas experimentalmente, para a seguir poder-se avaliar a precisão do modelo.

Na tabela C.1, encontram-se os resultados da eficiência calculada pelo modelo ($E^* \text{ calc}$) e medida experimentalmente ($E^* \text{ exp}$), para as condições de operação da coluna.

Tabela C.1 - Tabela das eficiências de separação calculadas pelo modelo e medidas experimentalmente

$E^* \text{ exp}$ (%)	$E^* \text{ calc}$ (%)	erro (%)	$E^* \text{ exp}$ (%)	$E^* \text{ calc}$ (%)	erro (%)
89,35	76,64	-14,22	89,46	78,81	-11,90
75,79	72,17	-4,78	75,8	72,72	-4,06
65,41	61,63	-5,78	67,11	63,37	-5,57
36,11	49,56	37,25	36,46	50,96	39,77
87,64	75,81	-13,50	87,94	77,96	-11,35
77,56	69,95	-9,81	40,59	50,41	24,19
66,76	60,97	-8,67	85,49	77,28	-9,60
40,44	49,03	21,24	77,86	71,31	-8,41
85,66	75,15	-12,27	67,73	62,15	-8,24
75,95	69,35	-8,69	38,68	49,97	29,19
68,15	60,44	-11,31	90,17	95,32	5,71
38,84	48,6	25,13	80,13	87,95	9,76
89,98	92,69	3,01	70,69	76,65	8,43
76,52	85,53	11,77	56,15	61,64	9,78
67,47	74,54	10,48	89,95	98,61	9,63
46,27	59,94	29,54	81,14	87	7,22
89,72	91,69	2,20	73,18	75,82	3,61
78,83	84,61	7,33	58,17	60,97	4,81
70,7	73,74	4,30	88,55	93,47	5,56
49,2	59,3	20,53	85,34	86,25	1,07
87,37	90,9	4,04	73,73	75,16	1,94
82,78	83,87	1,32	57,97	60,44	4,26
71,26	73,1	2,58	90,23	95,71	6,07
47,36	58,78	24,11	85,74	88,31	3,00
90,35	93,07	3,01	76,15	76,96	1,06
83,49	85,88	2,86	66,61	61,89	-7,09

Tabela C.1 - Tabela das eficiências de separação calculadas pelo modelo e medidas experimentalmente (continuação)

E* exp (%)	E* calc (%)	erro (%)	E* exp (%)	E* calc (%)	erro (%)
73,16	74,84	2,30	90,36	94,68	4,78
63,62	60,19	-5,39	85,69	87,36	1,95
90,55	92,07	1,68	75,76	76,13	0,49
84,19	84,95	0,90	67,6	61,22	-9,44
72,76	74,04	1,76	90,36	93,85	3,86
57,44	59,54	3,66	87,84	86,6	-1,41
90,55	91,27	0,80	74,3	75,47	1,57
84,59	84,22	-0,44	68,46	60,69	-11,35
73,57	73,4	-0,23	90,75	95,94	5,72
66,93	59,02	-11,82	86,68	88,52	2,12
90,89	93,3	2,65	77,24	77,15	-0,12
85,55	86,08	0,62	85,31	62,04	-27,28
74,22	75,02	1,08	90,89	94,9	4,41
85,66	60,33	-29,57	86,15	87,57	1,65
91,09	92,29	1,32	76,77	76,32	-0,59
85,4	85,16	-0,28	71,87	61,37	-14,61
73,98	74,22	0,32	90,89	94,08	3,51
70,59	59,68	-15,46	87,99	86,81	-1,34
90,99	91,49	0,55	77,24	75,65	-2,06
85,83	84,42	-1,64	73,3	60,84	-17,00
74,92	73,57	-1,80	91,03	96,1	5,57
91,29	93,45	2,37	86,7	88,67	2,27
86,2	86,23	0,03	77,32	77,28	-0,05
74,92	75,15	0,31	87,23	62,14	-28,76
87,72	60,43	-31,11	91,05	95,06	4,40
91,12	92,45	1,46	86,29	87,72	1,66
86,33	85,3	-1,19	76,85	76,45	-0,52
74,57	74,34	-0,31	90,89	94,24	3,69
91,12	91,65	0,58	88,3	86,95	-1,53
86,4	84,56	-2,13	77,32	75,78	-1,99
75,39	73,7	-2,24			

APÊNDICE D

TABELAS COM OS RESULTADOS

EXPERIMENTAIS

Apêndice D - Tabelas com os resultados experimentais

Neste apêndice encontram-se as tabelas com os resultados experimentais e as tabelas com os valores calculados para os vários modos de se expressar a eficiência de uma coluna de extração líquido-líquido.

Tabela D.1.1 - Vazões de alimentação e saída das fases para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 0 rps

Vazão de água na alimentação (ml/s)	Vazão de butanol na alimentação (ml/s)	Vazão de água no fundo (ml/s)	Vazão de butanol no topo (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
4,90	0,54	4,80	0,64	0
4,67	0,75	4,62	0,80	0
4,08	1,34	4,00	1,42	0
2,78	2,37	2,75	2,40	0
6,32	0,70	6,24	0,78	0
6,08	1,02	6,00	1,10	0
5,26	1,78	5,17	1,87	0
3,49	3,54	3,40	3,63	0
7,62	0,86	7,60	0,88	0
7,26	1,24	7,20	1,30	0
6,32	2,10	6,30	2,12	0
4,20	4,23	4,20	4,23	0

Tabela D.1.2 - Vazões de alimentação e saída das fases para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 1 rps

Vazão de água na alimentação (ml/s)	Vazão de butanol na alimentação (ml/s)	Vazão de água no fundo (ml/s)	Vazão de butanol no topo (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
4,90	0,54	4,80	0,64	1
4,67	0,75	4,57	0,85	1
4,08	1,34	4,00	1,42	1
2,78	2,37	2,80	2,35	1
6,32	0,70	6,30	0,72	1
6,08	1,02	6,00	1,10	1
5,26	1,78	5,23	1,81	1
3,49	3,54	3,50	3,53	1
7,62	0,86	7,60	0,88	1
7,26	1,24	7,20	1,30	1
6,32	2,10	6,30	2,12	1
4,20	4,23	4,20	4,23	1

Tabela D.1.3 - Vazões de alimentação e saída das fases para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 2 rps

Vazão de água na alimentação (ml/s)	Vazão de butanol na alimentação (ml/s)	Vazão de água no fundo (ml/s)	Vazão de butanol no topo (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
4,90	0,54	4,90	0,54	2
4,67	0,75	4,60	0,82	2
4,08	1,34	4,00	1,42	2
2,78	2,37	4,75	0,40	2
6,32	0,70	6,30	0,72	2
6,08	1,02	6,00	1,10	2
5,26	1,78	5,20	1,84	2
3,49	3,54	3,40	3,63	2
7,62	0,86	7,57	0,91	2
7,26	1,24	7,20	1,30	2
6,32	2,10	6,30	2,12	2
4,20	4,23	4,10	4,33	2

Tabela D.1.4 - Vazões de alimentação e saída das fases para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 3 rps

Vazão de água na alimentação (ml/s)	Vazão de butanol na alimentação (ml/s)	Vazão de água no fundo (ml/s)	Vazão de butanol no topo (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
4,90	0,54	4,80	0,64	3
4,67	0,75	4,70	0,72	3
4,08	1,34	4,00	1,42	3
2,78	2,37	2,80	2,35	3
6,32	0,70	6,28	0,74	3
6,08	1,02	6,05	1,05	3
5,26	1,78	5,20	1,84	3
3,49	3,54	3,44	3,59	3
7,62	0,86	7,60	0,88	3
7,26	1,24	7,20	1,30	3
6,32	2,10	6,30	2,12	3

Tabela D.1.5 - Vazões de alimentação e saída das fases para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 4 rps

Vazão de água na alimentação (ml/s)	Vazão de butanol na alimentação (ml/s)	Vazão de água no fundo (ml/s)	Vazão de butanol no topo (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
4,90	0,54	4,90	0,54	4
4,67	0,75	4,70	0,72	4
4,08	1,34	3,98	1,44	4
2,78	2,37	2,70	2,45	4
6,32	0,70	6,30	0,72	4
6,08	1,02	6,00	1,10	4
5,26	1,78	5,22	1,82	4
7,62	0,86	7,60	0,88	4
7,26	1,24	7,20	1,30	4
6,32	2,10	6,30	2,12	4

Tabela D.2.1 - Vazões de alimentação e saída das fases para a configuração com área livre das palhetas de 14% e velocidade de rotação das palhetas igual a 0 rps

Vazão de água na alimentação (ml/s)	Vazão de butanol na alimentação (ml/s)	Vazão de água no fundo (ml/s)	Vazão de butanol no topo (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
4,90	0,54	4,80	0,64	0
4,67	0,75	4,70	0,72	0
4,08	1,34	4,00	1,42	0
2,78	2,37	2,70	2,45	0
6,32	0,70	6,31	0,71	0
6,08	1,02	6,10	1,00	0
5,26	1,78	5,22	1,82	0
3,49	3,54	3,40	3,63	0
7,62	0,86	7,60	0,88	0
7,26	1,24	7,23	1,27	0
6,32	2,10	6,30	2,12	0
4,20	4,23	4,20	4,23	0

Tabela D.2.2 - Vazões de alimentação e saída das fases para a configuração com área livre das palhetas de 14% e velocidade de rotação das palhetas igual a 1 rps

Vazão de água na alimentação (ml/s)	Vazão de butanol na alimentação (ml/s)	Vazão de água no fundo (ml/s)	Vazão de butanol no topo (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
4,90	0,54	4,84	0,60	1
4,67	0,75	4,60	0,82	1
4,08	1,34	4,01	1,41	1
2,78	2,37	2,80	2,35	1
6,32	0,70	6,28	0,74	1
6,08	1,02	6,00	1,10	1
5,26	1,78	5,20	1,84	1
3,49	3,54	3,40	3,63	1
7,62	0,86	7,60	0,88	1
7,26	1,24	7,20	1,30	1
6,32	2,10	6,30	2,12	1
4,20	4,23	4,20	4,23	1

Tabela D.2.3 - Vazões de alimentação e saída das fases para a configuração com área livre das palhetas de 14% e velocidade de rotação das palhetas igual a 2 rps

Vazão de água na alimentação (ml/s)	Vazão de butanol na alimentação (ml/s)	Vazão de água no fundo (ml/s)	Vazão de butanol no topo (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
4,90	0,54	4,80	0,64	2
4,67	0,75	4,60	0,82	2
4,08	1,34	4,00	1,42	2
2,78	2,37	2,80	2,35	2
6,32	0,70	6,30	0,72	2
6,08	1,02	6,00	1,10	2
5,26	1,78	5,30	1,74	2
3,49	3,54	3,40	3,63	2
7,62	0,86	7,60	0,88	2
7,26	1,24	7,30	1,20	2
6,32	2,10	6,30	2,12	2
4,20	4,23	4,20	4,23	2

Tabela D.2.4 - Vazões de alimentação e saída das fases para a configuração com área livre das palhetas de 14% e velocidade de rotação das palhetas igual a 3 rps

Vazão de água na alimentação (ml/s)	Vazão de butanol na alimentação (ml/s)	Vazão de água no fundo (ml/s)	Vazão de butanol no topo (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
4,90	0,54	4,90	0,54	3
4,67	0,75	4,70	0,72	3
4,08	1,34	4,10	1,32	3
2,78	2,37	2,70	2,45	3
6,32	0,70	6,30	0,72	3
6,08	1,02	6,10	1,00	3
5,26	1,78	5,20	1,84	3
3,49	3,54	3,50	3,53	3
7,62	0,86	7,55	0,93	3
7,26	1,24	7,30	1,20	3
6,32	2,10	6,30	2,12	3
4,20	4,23	4,25	4,18	3

Tabela D.2.5 - Vazões de alimentação e saída das fases para a configuração com área livre das palhetas de 14% e velocidade de rotação das palhetas igual a 4 rps

Vazão de água na alimentação (ml/s)	Vazão de butanol na alimentação (ml/s)	Vazão de água no fundo (ml/s)	Vazão de butanol no topo (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
4,90	0,54	4,90	0,54	4
4,67	0,75	4,60	0,82	4
4,08	1,34	4,00	1,42	4
2,78	2,37	2,80	2,35	4
6,32	0,70	6,30	0,72	4
6,08	1,02	6,00	1,10	4
5,26	1,78	5,20	1,84	4
7,62	0,86	7,70	0,78	4
7,26	1,24	7,30	1,20	4
6,32	2,10	6,30	2,12	4

Tabela D.3.1 - Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 0 rps

Conc. de ácido acético na aliment.	Conc. de ácido acético no topo	Conc. de ácido acético no fundo	Erro no balanço de massa (%)	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,02472	0,00297	0,00288	17,74	9	5,5	0
0,02472	0,00625	0,00317	5,89	6	5,5	0
0,03049	0,01076	0,00609	-2,94	3	5,5	0
0,03049	0,01958	0,00697	-8,45	1	5,5	0
0,02472	0,00338	0,00238	1,11	9	7,0	0
0,02472	0,00583	0,00258	-13,19	6	7,0	0
0,03049	0,01035	0,00551	-11,85	3	7,0	0
0,04655	0,02777	0,01835	-0,96	1	7,0	0
0,02472	0,00386	0,00184	-18,34	9	8,5	0
0,02472	0,00621	0,00246	-15,90	6	8,5	0
0,03049	0,00993	0,00588	-9,30	3	8,5	0
0,03938	0,02415	0,01575	1,03	1	8,5	0

Tabela D.3.2 - Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 1 rps

Conc. de ácido acético na aliment.	Conc. de ácido acético no topo	Conc. de ácido acético no fundo	Erro no balanço de massa (%)	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,02472	0,00281	0,00205	-12,83	9	5,5	1
0,02472	0,00608	0,00217	-18,59	6	5,5	1
0,03049	0,01013	0,00602	-5,83	3	5,5	1
0,03049	0,01651	0,00716	-18,55	1	5,5	1
0,02472	0,00287	0,00247	1,83	9	7,0	1
0,02472	0,00552	0,00288	-7,35	6	7,0	1
0,03049	0,00916	0,00618	-9,88	3	7,0	1
0,04655	0,02371	0,02144	-3,67	1	7,0	1
0,02472	0,00344	0,00227	-4,45	9	8,5	1
0,02472	0,00456	0,00345	0,47	6	8,5	1
0,03049	0,00899	0,00740	2,61	3	8,5	1
0,03938	0,02083	0,01703	-4,17	1	8,5	1

Tabela D.3.3 - Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 2 rps

Conc. de ácido acético na aliment.	Conc. de ácido acético no topo	Conc. de ácido acético no fundo	Erro no balanço de massa (%)	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,02472	0,00272	0,00215	-10,13	9	5,5	2
0,03049	0,00533	0,00441	7,85	6	5,5	2
0,03049	0,00842	0,00848	12,33	3	5,5	2
0,03049	0,01129	0,01273	-10,04	1	5,5	2
0,02472	0,00268	0,00285	15,02	9	7,0	2
0,02472	0,00422	0,00365	5,16	6	7,0	2
0,03049	0,00855	0,00781	3,77	3	7,0	2
0,03938	0,01690	0,02030	-6,48	1	7,0	2
0,02472	0,00268	0,00285	12,87	9	8,5	2
0,02472	0,00412	0,00427	17,78	6	8,5	2
0,03049	0,00830	0,00840	10,10	3	8,5	2
0,03049	0,01030	0,02403	10,95	1	8,5	2

Tabela D.3.4 - Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 3 rps

Conc. de ácido acético na aliment.	Conc. de ácido acético no topo	Conc. de ácido acético no fundo	Erro no balanço de massa (%)	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,02472	0,00259	0,00235	-2,93	9	5,5	3
0,03049	0,00471	0,00452	7,66	6	5,5	3
0,03049	0,00811	0,00921	18,36	3	5,5	3
0,03049	0,00468	0,01799	-15,06	1	5,5	3
0,02472	0,00255	0,00292	16,86	9	7,0	3
0,02472	0,00393	0,00350	0,41	6	7,0	3
0,03049	0,00818	0,00909	14,86	3	7,0	3
0,03938	0,01178	0,02422	-9,90	1	7,0	3
0,02472	0,00257	0,00305	19,78	9	8,5	3
0,02472	0,00382	0,00420	14,97	6	8,5	3
0,03049	0,00790	0,00917	16,42	3	8,5	3

Tabela D.3.5 - Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 4 rps

Conc. de ácido acético na aliment.	Conc. de ácido acético no topo	Conc. de ácido acético no fundo	Erro no balanço de massa (%)	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,02472	0,00250	0,00225	-7,37	9	5,5	4
0,03049	0,00451	0,00502	17,32	6	5,5	4
0,03049	0,00790	0,00910	16,46	3	5,5	4
0,03049	0,00406	0,02211	-3,61	1	5,5	4
0,02472	0,00254	0,00293	17,23	9	7,0	4
0,02472	0,00370	0,00379	6,36	6	7,0	4
0,03049	0,00801	0,00964	19,55	3	7,0	4
0,02472	0,00253	0,00302	18,31	9	8,5	4
0,02472	0,00368	0,00443	19,59	6	8,5	4
0,03049	0,00776	0,00951	19,27	3	8,5	4

Tabela D.4.1 - Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna para a configuração com área livre das palhetas de 14% e velocidade de rotação das palhetas igual a 0 rps

Conc. de ácido acético na aliment.	Conc. de ácido acético no topo	Conc. de ácido acético no fundo	Erro no balanço de massa (%)	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03003	0,00349	0,00338	13,69	9	5,5	0
0,03003	0,00753	0,00410	9,58	6	5,5	0
0,01081	0,00381	0,00192	-9,58	3	5,5	0
0,05326	0,03383	0,01494	2,38	1	5,5	0
0,03003	0,00394	0,00240	-14,58	9	7,0	0
0,01081	0,02485	0,01435	1,95	6	7,0	0
0,01081	0,03596	0,02288	-3,93	3	7,0	0
0,05326	0,03164	0,02422	4,60	1	7,0	0
0,03003	0,00467	0,00295	2,66	9	8,5	0
0,01081	0,00269	0,00138	-0,10	6	8,5	0
0,05326	0,01731	0,01163	-1,66	3	8,5	0
0,05326	0,03265	0,02334	4,83	1	8,5	0

Tabela D.4.2 - Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna para a configuração com área livre das palhetas de 14% e velocidade de rotação das palhetas igual a 1 rps

Conc. de ácido acético na aliment.	Conc. de ácido acético no topo	Conc. de ácido acético no fundo	Erro no balanço de massa (%)	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03003	0,00328	0,00336	12,45	9	5,5	1
0,03003	0,00624	0,00367	-2,33	6	5,5	1
0,01081	0,00344	0,00208	-9,08	3	5,5	1
0,05326	0,02341	0,01909	-14,06	1	5,5	1
0,03003	0,00335	0,00342	13,98	9	7,0	1
0,03003	0,00595	0,00441	7,77	6	7,0	1
0,01081	0,00318	0,00248	-2,61	3	7,0	1
0,05326	0,02235	0,02391	-13,85	1	7,0	1
0,03003	0,00376	0,00300	0,99	9	8,5	1
0,01081	0,00192	0,00169	9,13	6	8,5	1
0,05326	0,01415	0,01033	-15,02	3	8,5	1
0,05326	0,02245	0,02039	-19,83	1	8,5	1

Tabela D.4.3 - Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna para a configuração com área livre das palhetas de 14% e velocidade de rotação das palhetas igual a 2 rps

Conc. de ácido acético na aliment.	Conc. de ácido acético no topo	Conc. de ácido acético no fundo	Erro no balanço de massa (%)	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03003	0,00327	0,00352	17,20	9	5,5	2
0,03003	0,00459	0,00391	-3,38	6	5,5	2
0,01081	0,00287	0,00283	6,29	3	5,5	2
0,05326	0,01790	0,02355	-14,44	1	5,5	2
0,03003	0,00323	0,00312	4,68	9	7,0	2
0,03003	0,00461	0,00446	3,94	6	7,0	2
0,01081	0,00291	0,00294	7,29	3	7,0	2
0,05326	0,01738	0,02890	-14,42	1	7,0	2
0,03003	0,00323	0,00287	-4,48	9	8,5	2
0,01081	0,00166	0,00172	8,33	6	8,5	2
0,05326	0,01385	0,01268	-2,30	3	8,5	2
0,05326	0,01693	0,03088	-10,64	1	8,5	2

Tabela D.4.4 - Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna para a configuração com área livre das palhetas de 14% e velocidade de rotação das palhetas igual a 3 rps

Conc. de ácido acético na aliment.	Conc. de ácido acético no topo	Conc. de ácido acético no fundo	Erro no balanço de massa (%)	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03003	0,00311	0,00314	5,17	9	5,5	3
0,03003	0,00432	0,00405	-1,73	6	5,5	3
0,01081	0,00275	0,00292	7,85	3	5,5	3
0,05326	0,00808	0,03066	-18,73	1	5,5	3
0,03003	0,00307	0,00343	13,42	9	7,0	3
0,03003	0,00447	0,00466	7,47	6	7,0	3
0,01081	0,00281	0,00305	9,28	3	7,0	3
0,05326	0,01513	0,03282	-10,75	1	7,0	3
0,03003	0,00307	0,00357	15,45	9	8,5	3
0,01081	0,00164	0,00172	8,40	6	8,5	3
0,01081	0,00276	0,00296	8,01	3	8,5	3
0,05326	0,01438	0,03056	-15,66	1	8,5	3

Tabela D.4.5 - Frações mássicas de ácido acético no topo e no fundo da coluna para a configuração com área livre das palhetas de 14% e velocidade de rotação das palhetas igual a 4 rps

Conc. de ácido acético na aliment.	Conc. de ácido acético no topo	Conc. de ácido acético no fundo	Erro no balanço de massa (%)	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03003	0,00303	0,00341	13,03	9	5,5	4
0,03003	0,00430	0,00376	-7,55	6	5,5	4
0,01081	0,00275	0,00307	11,57	3	5,5	4
0,05326	0,00706	0,03173	-16,47	1	5,5	4
0,03003	0,00303	0,00364	19,37	9	7,0	4
0,03003	0,00443	0,00449	3,79	6	7,0	4
0,01081	0,00280	0,00299	7,43	3	7,0	4
0,03003	0,00307	0,00309	1,25	9	8,5	4
0,01081	0,00161	0,00189	17,31	6	8,5	4
0,01081	0,00275	0,00296	7,83	3	8,5	4

Tabela D.5.1 - Frações molares de ácido acético na coluna para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 0 rps

Entrada de ác. acético no fundo	Saída de ác. acético no topo	Saída de ác. acético no fundo	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03034	0,00366	0,00086	9	5,5	0
0,03034	0,00771	0,00095	6	5,5	0
0,03737	0,01324	0,00183	3	5,5	0
0,03737	0,02405	0,00210	1	5,5	0
0,03034	0,00417	0,00071	9	7,0	0
0,03034	0,00718	0,00077	6	7,0	0
0,03737	0,01274	0,00166	3	7,0	0
0,05684	0,03405	0,00557	1	7,0	0
0,03034	0,00476	0,00055	9	8,5	0
0,03034	0,00766	0,00074	6	8,5	0
0,03737	0,01223	0,00177	3	8,5	0
0,04816	0,02964	0,00477	1	8,5	0

Tabela D.5.2 - Frações molares de ácido acético na coluna para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 1 rps

Entrada de ác. acético no fundo	Saída de ác. acético no topo	Saída de ác. acético no fundo	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03034	0,00347	0,00062	9	5,5	1
0,03034	0,00749	0,00065	6	5,5	1
0,03737	0,01248	0,00181	3	5,5	1
0,03737	0,02030	0,00216	1	5,5	1
0,03034	0,00355	0,00074	9	7,0	1
0,03034	0,00680	0,00087	6	7,0	1
0,03737	0,01129	0,00186	3	7,0	1
0,05684	0,02911	0,00652	1	7,0	1
0,03034	0,00425	0,00068	9	8,5	1
0,03034	0,00562	0,00104	6	8,5	1
0,03737	0,01108	0,00223	3	8,5	1
0,04816	0,02558	0,00517	1	8,5	1

Tabela D.5.3 - Frações molares de ácido acético na coluna para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 2 rps

Entrada de ác. acético no fundo	Saída de ác. acético no topo	Saída de ác. acético no fundo	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03034	0,00336	0,00064	9	5,5	2
0,03737	0,00657	0,00133	6	5,5	2
0,03737	0,01038	0,00256	3	5,5	2
0,03737	0,01390	0,00385	1	5,5	2
0,03034	0,00330	0,00086	9	7,0	2
0,03034	0,00520	0,00110	6	7,0	2
0,03737	0,01053	0,00235	3	7,0	2
0,04816	0,02077	0,00617	1	7,0	2
0,03034	0,00330	0,00086	9	8,5	2
0,03034	0,00508	0,00128	6	8,5	2
0,03737	0,01023	0,00253	3	8,5	2
0,03737	0,01268	0,00733	1	8,5	2

Tabela D.5.4 - Frações molares de ácido acético na coluna para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 3 rps

Entrada de ác. acético no fundo	Saída de ác. acético no topo	Saída de ác. acético no fundo	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03034	0,00320	0,00071	9	5,5	3
0,03737	0,00581	0,00136	6	5,5	3
0,03737	0,00999	0,00278	3	5,5	3
0,03737	0,00577	0,00546	1	5,5	3
0,03034	0,00314	0,00088	9	7,0	3
0,03034	0,00484	0,00105	6	7,0	3
0,03737	0,01008	0,00274	3	7,0	3
0,04816	0,01450	0,00739	1	7,0	3
0,03034	0,00317	0,00092	9	8,5	3
0,03034	0,00471	0,00126	6	8,5	3
0,03737	0,00973	0,00277	3	8,5	3

Tabela D.5.5 - Frações molares de ácido acético na coluna para a configuração com área livre das palhetas de 0% e velocidade de rotação das palhetas igual a 4 rps

Entrada de ác. acético no fundo	Saída de ác. acético no topo	Saída de ác. acético no fundo	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03034	0,00308	0,00067	9	5,5	4
0,03737	0,00557	0,00151	6	5,5	4
0,03737	0,00973	0,00274	3	5,5	4
0,03737	0,00501	0,00673	1	5,5	4
0,03034	0,00313	0,00088	9	7,0	4
0,03034	0,00456	0,00114	6	7,0	4
0,03737	0,00986	0,00291	3	7,0	4
0,03034	0,00313	0,00091	9	8,5	4
0,03034	0,00454	0,00133	6	8,5	4
0,03737	0,00956	0,00287	3	8,5	4

Tabela D.6.1 - Frações molares de ácido acético na coluna para a configuração com área livre das palhetas de 14 % e velocidade de rotação das palhetas igual a 0 rps

Entrada de ác. acético no fundo	Saída de ác. acético no topo	Saída de ác. acético no fundo	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03681	0,00431	0,00101	9	5,5	0
0,03681	0,00927	0,00123	6	5,5	0
0,01331	0,00470	0,00058	3	5,5	0
0,06493	0,04143	0,00453	1	5,5	0
0,03681	0,00486	0,00072	9	7,0	0
0,01301	0,03049	0,00435	6	7,0	0
0,01301	0,4401	0,00697	3	7,0	0
0,06493	0,03877	0,00739	1	7,0	0
0,03681	0,00575	0,00089	9	8,5	0
0,01331	0,00332	0,00041	6	8,5	0
0,06493	0,02128	0,00352	3	8,5	0
0,06493	0,04000	0,00711	1	8,5	0

Tabela D.6.2 - Frações molares de ácido acético na coluna para a configuração com área livre das palhetas de 14 % e velocidade de rotação das palhetas igual a 1 rps

Entrada de ác. acético no fundo	Saída de ác. acético no topo	Saída de ác. acético no fundo	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03681	0,00405	0,00101	9	5,5	1
0,03681	0,00770	0,00110	6	5,5	1
0,01331	0,00424	0,00062	3	5,5	1
0,06493	0,02874	0,00580	1	5,5	1
0,03681	0,00413	0,00103	9	7,0	1
0,03681	0,00733	0,00133	6	7,0	1
0,01331	0,00392	0,00074	3	7,0	1
0,06493	0,02744	0,00729	1	7,0	1
0,03681	0,00464	0,00090	9	8,5	1
0,01331	0,00236	0,00051	6	8,5	1
0,06493	0,01741	0,00312	3	8,5	1
0,06493	0,02757	0,00620	1	8,5	1

Tabela D.6.3 - Frações molares de ácido acético na coluna para a configuração com área livre das palhetas de 14 % e velocidade de rotação das palhetas igual a 2 rps

Entrada de ác. acético no fundo	Saída de ác. acético no topo	Saída de ác. acético no fundo	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03681	0,00403	0,00106	9	5,5	2
0,03681	0,00566	0,00118	6	5,5	2
0,01331	0,00354	0,00085	3	5,5	2
0,06493	0,02200	0,00718	1	5,5	2
0,03681	0,00398	0,00094	9	7,0	2
0,03681	0,00568	0,00134	6	7,0	2
0,01331	0,00359	0,00088	3	7,0	2
0,06493	0,02136	0,00884	1	7,0	2
0,03681	0,00398	0,00086	9	8,5	2
0,01331	0,00204	0,00052	6	8,5	2
0,06493	0,01704	0,00384	3	8,5	2
0,06493	0,02081	0,00946	1	8,5	2

Tabela D.6.4 - Frações molares de ácido acético na coluna para a configuração com área livre das palhetas de 14 % e velocidade de rotação das palhetas igual a 3 rps

Entrada de ác. acético no fundo	Saída de ác. acético no topo	Saída de ác. acético no fundo	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03681	0,00384	0,00094	9	5,5	3
0,03681	0,00532	0,00122	6	5,5	3
0,01331	0,00340	0,00088	3	5,5	3
0,06493	0,00995	0,00939	1	5,5	3
0,03681	0,00379	0,00103	9	7,0	3
0,03681	0,00551	0,00140	6	7,0	3
0,01331	0,00346	0,00092	3	7,0	3
0,06493	0,01861	0,01007	1	7,0	3
0,03681	0,00379	0,00107	9	8,5	3
0,01331	0,00202	0,00052	6	8,5	3
0,01331	0,00340	0,00089	3	8,5	3
0,06493	0,01769	0,00936	1	8,5	3

Tabela D.6.5 - Frações molares de ácido acético na coluna para a configuração com área livre das palhetas de 14 % e velocidade de rotação das palhetas igual a 4 rps

Entrada de ác. acético no fundo	Saída de ác. acético no topo	Saída de ác. acético no fundo	Razão entre as Vazões de Aliment.	Vazão Total de Aliment. (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)
0,03681	0,00374	0,00102	9	5,5	4
0,03681	0,00531	0,00113	6	5,5	4
0,01331	0,00339	0,00092	3	5,5	4
0,06493	0,00871	0,00973	1	5,5	4
0,03681	0,00373	0,00109	9	7,0	4
0,03681	0,00546	0,00135	6	7,0	4
0,01331	0,00345	0,00090	3	7,0	4
0,03681	0,00379	0,00093	9	8,5	4
0,01331	0,00198	0,00057	6	8,5	4
0,01331	0,00339	0,00089	3	8,5	4

Tabela D.7.1- Valores do Índice de Recuperação do Sóluto para ambas as configurações (área livre das palhetas de 0% e 14%) e parâmetros de operação para a velocidade de rotação das palhetas igual a 0 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Índice de Recuperação do Sóluto (%) - Área Livre = 0%	Índice de Recuperação do Sóluto (%) - Área Livre=14%
9	5,5	0	88,00	88,37
6	5,5	0	74,70	74,94
3	5,5	0	64,72	64,72
1	5,5	0	35,79	36,48
9	7,0	0	86,32	86,87
6	7,0	0	76,43	77,02
3	7,0	0	66,06	66,74
1	7,0	0	40,34	40,59
9	8,5	0	84,39	84,46
6	8,5	0	74,86	75,13
3	8,5	0	67,42	67,50
1	8,5	0	38,68	38,69

Tabela D.7.2- Valores do Índice de Recuperação do Sóluto para ambas as configurações (área livre das palhetas de 0% e 14%) e parâmetros de operação para a velocidade de rotação das palhetas igual a 1 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Índice de Recuperação do Sóluto (%) - Área Livre = 0%	Índice de Recuperação do Sóluto (%) - Área Livre=14%
9	5,5	1	88,62	89,08
6	5,5	1	75,40	79,21
3	5,5	1	66,76	68,19
1	5,5	1	45,84	56,04
9	7,0	1	88,37	88,85
6	7,0	1	77,69	80,19
3	7,0	1	69,94	70,60
1	7,0	1	49,06	58,03
9	8,5	1	86,07	87,48
6	8,5	1	81,55	82,27
3	8,5	1	70,51	73,43
1	8,5	1	47,11	57,84

Tabela D.7.3- Valores do Índice de Recuperação do Sóluto para ambas as configurações (área livre das palhetas de 0% e 14%) e parâmetros de operação para a velocidade de rotação das palhetas igual a 2 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Índice de Recuperação do Sóluto (%) - Área Livre = 0%	Índice de Recuperação do Sóluto (%) - Área Livre=14%
9	5,5	2	88,98	89,12
6	5,5	2	82,53	84,73
3	5,5	2	72,38	73,46
1	5,5	2	62,98	66,40
9	7,0	2	89,16	89,25
6	7,0	2	82,92	84,65
3	7,0	2	71,96	73,05
1	7,0	2	57,09	67,37
9	8,5	2	89,16	89,25
6	8,5	2	83,33	84,68
3	8,5	2	72,78	74,00
1	8,5	2	66,23	68,22

Tabela D.7.4- Valores do Índice de Recuperação do Sóluto para ambas as configurações (área livre das palhetas de 0% e 14%) e parâmetros de operação para a velocidade de rotação das palhetas igual a 3 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Índice de Recuperação do Sóluto (%) - Área Livre = 0%	Índice de Recuperação do Sóluto (%) - Área Livre=14%
9	5,5	3	89,51	89,65
6	5,5	3	84,54	85,62
3	5,5	3	73,40	74,53
1	5,5	3	84,65	84,83
9	7,0	3	89,70	89,77
6	7,0	3	84,11	85,12
3	7,0	3	73,18	74,01
1	7,0	3	70,09	71,59
9	8,5	3	89,60	89,77
6	8,5	3	84,54	84,87
3	8,5	3	74,09	74,48
1	8,5	3	inundação	72,99

Tabela D.7.5- Valores do Índice de Recuperação do Soluto para ambas as configurações (área livre das palhetas de 0% e 14%) e parâmetros de operação para a velocidade de rotação das palhetas igual a 4 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Índice de Recuperação do Soluto (%) - Área Livre = 0%	Índice de Recuperação do Soluto (%) - Área Livre=14%
9	5,5	4	89,89	89,91
6	5,5	4	85,19	85,67
3	5,5	4	74,10	74,59
1	5,5	4	86,69	86,74
9	7,0	4	89,74	89,92
6	7,0	4	85,03	85,25
3	7,0	4	73,74	74,12
1	7,0	4	inundação	inundação
9	8,5	4	89,75	89,78
6	8,5	4	85,12	85,13
3	8,5	4	74,56	74,61
1	8,5	4	inundação	inundação

Tabela D.8.1 - Valores da Eficiência de Murphree e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas igual a 0 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Eficiência de Murphree (%) Área Livre = 0%	Eficiência de Murphree (%) Área Livre=14%
9	5,5	0	89,35	89,46
6	5,5	0	75,79	75,80
3	5,5	0	65,41	67,11
1	5,5	0	36,11	36,46
9	7,0	0	87,64	87,94
6	7,0	0	77,56	77,58
3	7,0	0	66,76	67,05
1	7,0	0	40,44	40,59
9	8,5	0	85,66	85,49
6	8,5	0	75,95	77,86
3	8,5	0	88,15	67,73
1	8,5	0	38,84	38,68

Tabela D.8.2 - Valores da Eficiência de Murphree e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas igual a 1 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Eficiência de Murphree (%) Área Livre = 0%	Eficiência de Murphree (%) Área Livre=14%
9	5,5	1	89,98	90,17
6	5,5	1	76,52	80,13
3	5,5	1	67,47	70,69
1	5,5	1	46,27	56,15
9	7,0	1	89,72	89,95
6	7,0	1	78,83	81,14
3	7,0	1	70,70	73,18
1	7,0	1	49,20	58,17
9	8,5	1	87,37	88,55
6	8,5	1	82,78	85,34
3	8,5	1	71,26	73,73
1	8,5	1	47,36	57,97

Tabela D.8.3 - Valores da Eficiência de Murphree e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas igual a 2 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Eficiência de Murphree (%) Área Livre = 0%	Eficiência de Murphree (%) Área Livre=14%
9	5,5	2	90,35	90,23
6	5,5	2	83,49	85,74
3	5,5	2	73,16	76,15
1	5,5	2	63,62	66,61
9	7,0	2	90,55	90,36
6	7,0	2	84,19	85,69
3	7,0	2	72,76	75,76
1	7,0	2	57,44	67,60
9	8,5	2	90,55	90,36
6	8,5	2	84,59	87,84
3	8,5	2	73,57	74,30
1	8,5	2	66,93	68,46

Tabela D.8.4 - Valores da Eficiência de Murphree e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas igual a 3 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Eficiência de Murphree (%) Área Livre = 0%	Eficiência de Murphree (%) Área Livre=14%
9	5,5	3	90,89	90,75
6	5,5	3	85,55	86,68
3	5,5	3	74,22	77,24
1	5,5	3	85,66	85,31
9	7,0	3	91,09	90,89
6	7,0	3	85,40	86,15
3	7,0	3	73,98	76,77
1	7,0	3	70,59	71,87
9	8,5	3	90,99	90,89
6	8,5	3	85,83	87,99
3	8,5	3	74,92	77,24
1	8,5	3	inundação	73,30

Tabela D.8.5 - Valores da Eficiência de Murphree e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas igual a 4 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Eficiência de Murphree (%) Área Livre = 0%	Eficiência de Murphree (%) Área Livre=14%
9	5,5	4	91,29	91,03
6	5,5	4	86,20	86,70
3	5,5	4	74,92	77,32
1	5,5	4	87,72	87,23
9	7,0	4	91,12	91,05
6	7,0	4	86,33	86,29
3	7,0	4	74,57	76,85
1	7,0	4	inundação	inundação
9	8,5	4	91,12	90,89
6	8,5	4	86,40	88,30
3	8,5	4	75,39	77,32
1	8,5	4	inundação	inundação

Tabela D.9.1 - Valores do Número de Unidades de Transferência e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas igual a 0 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Número de unidades de transferência (NUT)	
			Área Livre = 0%	Área Livre=14%
9	5,5	0	2,44	2,45
6	5,5	0	1,52	1,53
3	5,5	0	1,18	1,22
1	5,5	0	0,50	0,52
9	7,0	0	2,24	2,25
6	7,0	0	1,59	1,58
3	7,0	0	1,21	1,22
1	7,0	0	0,64	0,65
9	8,5	0	2,05	2,06
6	8,5	0	1,51	1,62
3	8,5	0	1,27	1,27
1	8,5	0	0,61	0,61

Tabela D.9.2 - Valores do Número de Unidades de Transferência e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas igual a 1 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Número de unidades de transferência (NUT)	
			Área Livre = 0%	Área Livre=14%
9	5,5	1	2,47	2,53
6	5,5	1	1,52	1,74
3	5,5	1	1,25	1,36
1	5,5	1	0,70	1,00
9	7,0	1	2,46	2,51
6	7,0	1	1,66	1,82
3	7,0	1	1,37	1,50
1	7,0	1	0,87	1,11
9	8,5	1	2,21	2,33
6	8,5	1	1,92	2,12
3	8,5	1	1,42	1,49
1	8,5	1	0,81	1,06

Tabela D.9.3 - Valores do Número de Unidades de Transferência e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas igual a 2 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Número de unidades de transferência (NUT)	
			Área Livre = 0%	Área Livre=14%
9	5,5	2	2,52	2,55
6	5,5	2	1,97	2,12
3	5,5	2	1,54	1,67
1	5,5	2	1,28	1,40
9	7,0	2	2,59	2,55
6	7,0	2	2,02	2,14
3	7,0	2	1,50	1,66
1	7,0	2	1,15	1,52
9	8,5	2	2,59	2,53
6	8,5	2	2,08	2,35
3	8,5	2	1,55	1,55
1	8,5	2	1,88	1,59

Tabela D.9.4 - Valores do Número de Unidades de Transferência e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas igual a 3 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Número de unidades de transferência (NUT)	
			Área Livre = 0%	Área Livre=14%
9	5,5	3	2,60	2,60
6	5,5	3	2,13	2,20
3	5,5	3	1,61	1,73
1	5,5	3	2,95	2,78
9	7,0	3	2,66	2,63
6	7,0	3	2,11	2,18
3	7,0	3	1,59	1,72
1	7,0	3	1,79	1,80
9	8,5	3	2,66	2,63
6	8,5	3	2,18	2,36
3	8,5	3	1,64	1,74
1	8,5	3	inundação	1,84

Tabela D.9.5 - Valores do Número de Unidades de Transferência e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas igual a 4 rps

Razão entre as Vazões de Alimentação	Vazão Total de Alimentação (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Número de unidades de Transferência (NUT) Área Livre = 0%	Número de unidades de transferência (NUT) Área Livre=14%
9	5,5	4	2,65	2,65
6	5,5	4	2,20	2,19
3	5,5	4	1,64	1,75
1	5,5	4	3,67	3,05
9	7,0	4	2,67	2,66
6	7,0	4	2,20	2,19
3	7,0	4	1,64	1,72
1	7,0	4	inundação	inundação
9	8,5	4	2,67	2,61
6	8,5	4	2,24	2,42
3	8,5	4	1,65	1,74
1	8,5	4	inundação	inundação

Tabela D.10.1 - Valores do Número de Estágios Teóricos, Eficiência Global e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas de 0 rps

Razão entre as Vazões de Entrada	Vazão Total de Entrada (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Número de Estágios Teóricos (NET) Al = 0%	Eficiência Global (%) Al = 0%	Número de Estágios Teóricos (NET) Al = 14%	Eficiência Global (%) Al = 14%
9	5,5	0	0,82	27,29	0,82	27,42
6	5,5	0	0,58	19,49	0,59	19,54
3	5,5	0	0,59	19,53	0,61	20,19
1	5,5	0	0,30	10,01	0,19	6,20
9	7,0	0	0,76	25,36	0,77	25,77
6	7,0	0	0,63	20,95	0,26	18,53
3	7,0	0	0,62	20,63	0,34	21,28
1	7,0	0	0,28	9,40	0,25	8,21
9	8,5	0	0,71	23,68	0,71	23,59
6	8,5	0	0,60	20,06	0,63	20,91
3	8,5	0	0,64	21,28	0,56	18,71
1	8,5	0	0,30	10,15	0,22	7,41

Tabela D.10.2 - Valores do Número de Estágios Teóricos, Eficiência Global e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas de 1 rps

Razão entre as Vazões de Entrada	Vazão Total de Entrada (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Número de Estágios Teóricos (NET) Al = 0%	Eficiência Global (%) Al = 0%	Número de Estágios Teóricos (NET) Al = 14%	Eficiência Global (%) Al = 14%
9	5,5	1	0,84	28,09	0,85	28,32
6	5,5	1	0,60	19,94	0,67	22,36
3	5,5	1	0,62	20,74	0,67	22,48
1	5,5	1	0,48	15,94	0,50	16,83
9	7,0	1	0,83	27,70	0,84	28,09
6	7,0	1	0,65	21,80	0,71	23,53
3	7,0	1	0,70	23,18	0,74	24,64
1	7,0	1	0,44	14,64	0,61	20,49
9	8,5	1	0,76	25,29	0,80	26,60
6	8,5	1	0,75	25,00	0,81	27,09
3	8,5	1	0,70	23,35	0,73	24,30
1	8,5	1	0,46	15,43	0,61	20,19

Tabela D.10.3 - Valores do Número de Estágios Teóricos, Eficiência Global e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas de 2 rps

Razão entre as Vazões de Entrada	Vazão Total de Entrada (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Número de Estágios Teóricos (NET) Al = 0%	Eficiência Global (%) Al = 0%	Número de Estágios Teóricos (NET) Al = 14%	Eficiência Global (%) Al = 14%
9	5,5	2	0,86	28,57	0,85	28,39
6	5,5	2	0,75	25,06	0,82	27,20
3	5,5	2	0,74	24,59	0,80	26,67
1	5,5	2	0,98	32,55	0,87	29,07
9	7,0	2	0,86	28,79	0,86	28,63
6	7,0	2	0,78	26,12	0,83	27,62
3	7,0	2	0,74	24,67	0,80	26,74
1	7,0	2	0,76	25,33	1,04	34,65
9	8,5	2	0,87	29,03	0,86	28,82
6	8,5	2	0,80	26,67	0,90	30,00
3	8,5	2	0,75	25,05	0,75	24,91
1	8,5	2	1,26	41,93	1,09	36,23

Tabela D.10.4 - Valores do Número de Estágios Teóricos, Eficiência Global e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas de 3 rps

Razão entre as Vazões de Entrada	Vazão Total de Entrada (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Número de Estágios Teóricos (NET) Al = 0%	Eficiência Global (%) Al = 0%	Número de Estágios Teóricos (NET) Al = 14%	Eficiência Global (%) Al = 14%
9	5,5	3	0,88	29,31	0,87	29,10
6	5,5	3	0,81	27,01	0,85	28,20
3	5,5	3	0,76	25,40	0,83	27,64
1	5,5	3	2,29	76,33	2,24	74,75
9	7,0	3	0,89	29,54	0,88	29,35
6	7,0	3	0,82	27,31	0,84	28,12
3	7,0	3	0,77	25,62	0,83	27,65
1	7,0	3	1,45	48,48	1,34	44,72
9	8,5	3	0,89	29,65	0,89	29,55
6	8,5	3	0,84	27,94	0,91	30,21
3	8,5	3	0,78	26,12	0,83	27,81
1	8,5	3	inundação	inundação	1,46	48,53

Tabela D.10.5 - Valores do Número de Estágios Teóricos, Eficiência Global e parâmetros de operação para as duas configurações da coluna (área livre das palhetas de 0% e 14%) para a velocidade de rotação das palhetas de 4 rps

Razão entre as Vazões de Entrada	Vazão Total de Entrada (ml/s)	Velocidade de Rotação das Palhetas (rps)	Número de Estágios Teóricos (NET) Al = 0%	Eficiência Global (%) Al = 0%	Número de Estágios Teóricos (NET) Al = 14%	Eficiência Global (%) Al = 14%
9	5,5	4	0,90	29,90	0,88	29,49
6	5,5	4	0,83	27,69	0,85	28,23
3	5,5	4	0,78	25,97	0,83	27,71
1	5,5	4	2,56	85,32	2,47	82,37
9	7,0	4	0,89	29,59	0,89	29,58
6	7,0	4	0,85	28,31	0,85	28,27
3	7,0	4	0,78	26,10	0,83	27,72
1	7,0	4	inundação	inundação	inundação	inundação
9	8,5	4	0,90	29,84	0,89	29,55
6	8,5	4	0,86	28,56	0,92	30,63
3	8,5	4	0,80	26,50	0,84	27,88
1	8,5	4	inundação	inundação	inundação	inundação

ANEXOS

ANEXO 1

REGRESSÃO LINEAR MULTIVARIÁVEL

Anexo 1 - REGRESSÃO LINEAR MULTIVARIÁVEL

1.1. INTRODUÇÃO

Neste apêndice serão apresentados os princípios básicos da regressão linear multivariável, que foi o método utilizado para a obtenção das constantes do modelo matemático que descreve o comportamento da eficiência de separação.

1.2. REGRESSÃO LINEAR MULTIVARIÁVEL

Neste apêndice será examinado o coeficiente de correlação entre uma variável de interesse primário, Y, e uma soma linear ponderada de um número de variáveis X. Esse coeficiente de correlação é chamado de um *coeficiente de correlação múltiplo* e é normalmente indicado por R. Os princípios básicos são os mesmos que para uma variável X única, mas ao invés de uma equação de regressão envolvendo uma variável X única, tem-se uma equação de regressão múltipla

$$Y' = a + b_1 X_1 + b_2 X_2 + \dots + b_k X_k \quad (A.1.1)$$

Desta equação, deseja-se encontrar os valores de a, b_1, b_2, \dots, b_k que resultarão no maior coeficiente de correlação positivo possível entre os valores observados de Y e os valores preditos Y'.

Conforme o número de variáveis X aumenta, os cálculos envolvidos na obtenção dos valores de b_1, b_2, \dots, b_k tornam-se complexos, embora eles possam ser obtidos facilmente por meio de um computador. Os princípios da regressão e correlação múltiplas encontram-se na referência [38].

1.2.1. As Equações dos Mínimos Quadrados para "a" e os Coeficientes de Regressão

Com k diferentes variáveis X, a equação de regressão múltipla é a equação (A.1.1) apresentada anteriormente.

Como no caso de uma variável X única, a soma total dos quadrados para a variável Y pode ser dividida em dois componentes ortogonais, ou seja

$$SS_{tot} = \sum (Y' - \bar{Y})^2 + \sum (Y - Y')^2 \quad (A.1.2)$$

Deseja-se encontrar os valores de a, b_1, b_2, \dots, b_k que minimizarão a soma dos quadrados residual, $\sum (Y - Y')^2$. O valor de a requerido é dado por

$$a = \bar{Y} - b_1 \bar{X}_1 - b_2 \bar{X}_2 - \dots - b_k \bar{X}_k \quad (\text{A.1.3})$$

Substituindo esse valor de a na equação (A.1.1), tem-se

$$Y' = \bar{Y} + b_1 (X_1 - \bar{X}_1) + b_2 (X_2 - \bar{X}_2) + \dots + b_k (X_k - \bar{X}_k) \quad (\text{A.1.4})$$

Então, se $\Sigma(Y - Y')^2$ deve ser minimizada, os valores de b devem satisfazer as seguintes equações :

$$\begin{aligned} b_1 \sum x_1^2 + b_2 \sum x_1 x_2 + \dots + b_k \sum x_1 x_k &= \sum x_1 y \\ b_1 \sum x_2 x_1 + b_2 \sum x_2^2 + \dots + b_k \sum x_2 x_k &= \sum x_2 y \end{aligned} \quad (\text{A.1.5})$$

$$b_1 \sum x_k x_1 + b_2 \sum x_k x_2 + \dots + b_k \sum x_k^2 = \sum x_k y$$

Onde : $x_k = (X_k - \bar{X}_k)$

ANEXO 2

*REPRESENTAÇÃO DO EQUILÍBRIO
(SISTEMAS TERNÁRIOS)*

Representação do equilíbrio (Sistemas Ternários)

O sistema de extração mais simples é composto de três componentes : o soluto (B), o solvente (S) e o diluente (A). Eles formam um sistema ternário, que pode ser representado por diagramas triangulares que possibilitam a visualização de zonas monofásicas e multifásicas.

Num diagrama ternário, as “tie-lines” ou linhas de amarração são as retas que ligam dois pontos sobre a curva de solubilidade (equilíbrio) e representam a presença de duas fases coexistentes em equilíbrio. Esses pontos extremos representam as composições em cada fase [5].

Como estabelecido por Treybal, se todos os três componentes de uma mistura ternária misturados em todas as proporções formarem soluções homogêneas, o sistema não tem importância para os processos de extração líquido-líquido.

Treybal sugere a seguinte classificação de sistemas ternários parcialmente miscíveis :

Tipo I - Contém um par binário parcialmente miscível. Também chamado de “sistema fechado”.

Tipo II - Contém dois pares binários parcialmente miscíveis. Também chamado de “sistema aberto”.

Tipo III - Contém três pares binários parcialmente miscíveis.

Tipo IV - Contém uma fase sólida.

O sistema de interesse neste trabalho é o sistema Tipo I, que será comentado a seguir.

2.1 - Sistemas Tipo I

Os sistemas Tipo I são os mais importantes para processos de extração líquido-líquido e compreendem cerca de 75% dos sistemas ternários, cujos dados experimentais estão disponíveis.

Na figura A.2.1 encontra-se uma representação de diagramas ternários para os vários tipos de sistemas ternários.

Para a representação do sistema Tipo I, os pares A-B e B-S são miscíveis em todas as proporções a dada temperatura; o binário A-S é parcialmente miscível. A área no interior da curva representa a mistura de duas fases em equilíbrio.

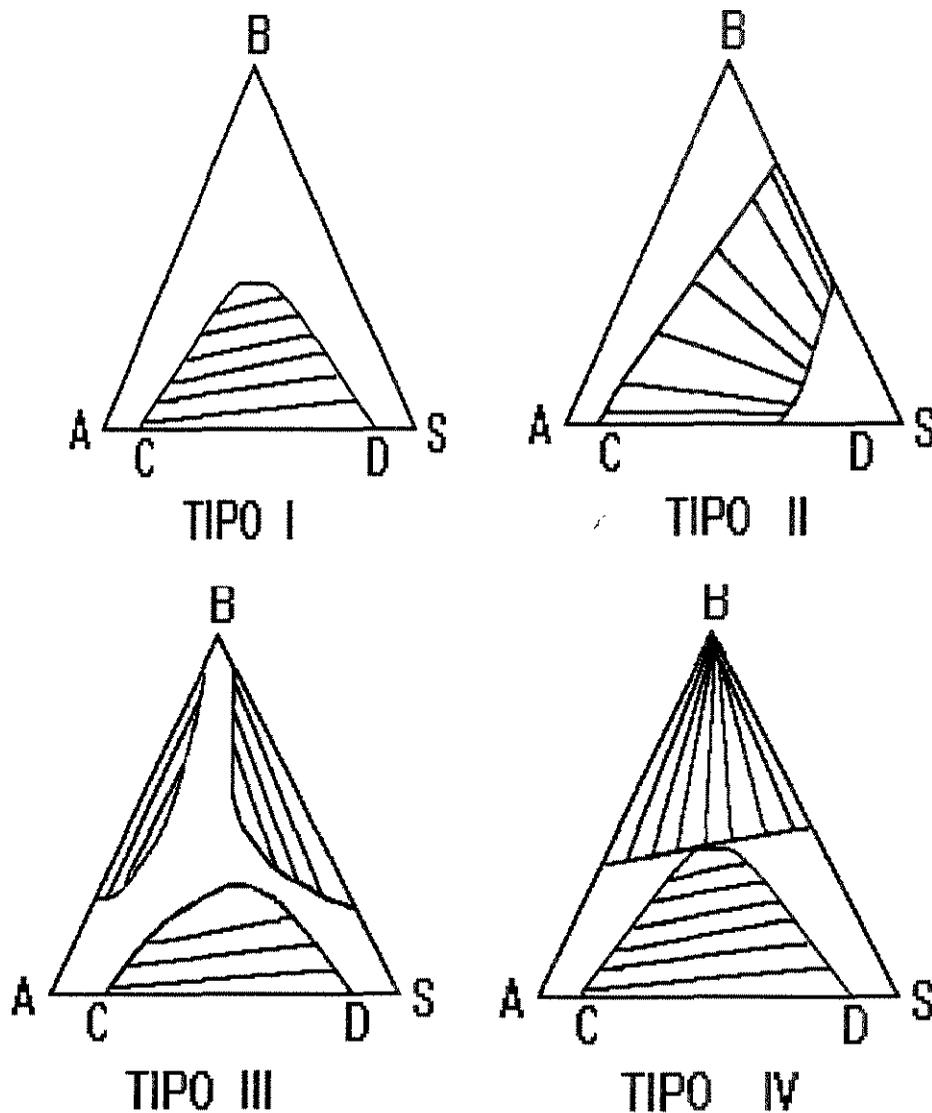


Figura A.2.1 - Representação de cada tipo de sistema ternário

ANEXO 3

SELETIVIDADE

E

CURVAS DE DISTRIBUIÇÃO

3.1 - Curvas de distribuição

Uma outra maneira de correlacionar os dados de equilíbrio líquido-líquido obtidos, além dos sistemas ternários, é a curva de distribuição que tem a forma apresentada na figura A.3.1. Essa curva é construída a partir da determinação do soluto em cada fase no equilíbrio. A inclinação dessa curva é o coeficiente de distribuição. Este coeficiente pode variar de acordo com as propriedades físicas e indica a seletividade mais favorável de um solvente, ou seja, quanto mais elevado o coeficiente de distribuição maior será a capacidade do solvente em extrair o soluto.

O coeficiente de distribuição é definido como a razão da fração molar (ou mássica) de soluto na fase rica em solvente com a fração molar (ou mássica) na fase rica em diluente. O coeficiente de distribuição para o componente (B) pode ser definido como :

$$m_B = \frac{x_{BS}}{x_{BA}} \quad (\text{A.3.1})$$

onde : x_{BS} é a concentração de B na fase rica em solvente (S) e x_{BA} é a concentração de B na fase rica em diluente (A).

O gráfico, usando-se coordenadas retangulares, resulta numa curva, para um sistema Tipo I. A curva pode passar através de um máximo e retorna para a reta de 45° num ponto que corresponde ao “plait point”, que é onde a região de miscibilidade completa começa [22].

3.2 - Seletividade

A seletividade é uma das principais propriedades consideradas na escolha do solvente para um processo de extração, indicando a capacidade do solvente em extrair um componente de uma determinada solução. Para o processo de extração ser satisfatório, a seletividade (β) deve ser maior que a unidade.

A seletividade de um solvente é definida como :

$$\beta = \frac{(X_B/X_A)_E}{(X_B/X_A)_R} \quad (\text{A.3.2})$$

onde : A é o inerte ou diluente, B é o soluto, E e R são as fases extrato e refinado, respectivamente e X é a fração mássica ou molar dos componentes.

O poder de extração de um solvente pode também ser determinado pelo coeficiente de atividade à diluição infinita, para o soluto (B) e inerte (A) no solvente (S) :

$$\beta_{BA}^{\circ} = \frac{\gamma_{AS}^{\circ}}{\gamma_{BS}^{\circ}} \quad (\text{A.3.3})$$

onde : γ° é o coeficiente de atividade líquido-vapor à diluição infinita do constituinte com o solvente.

Esta equação fornece um valor limitado do fator de separação. Valores dos coeficientes de atividade à diluição infinita podem ser obtidos ou estimados por métodos disponíveis na literatura [5].

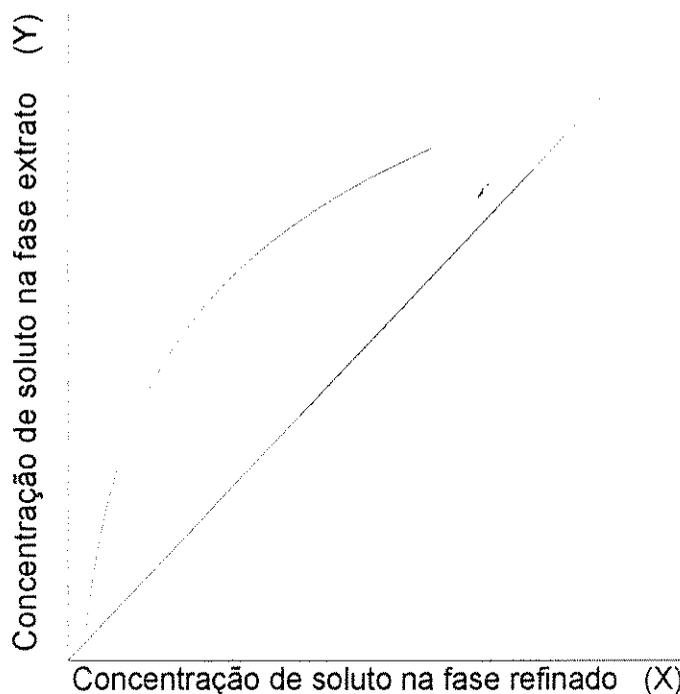


Figura A.3.1 - Representação da curva de distribuição do soluto entre dois líquidos parcialmente miscíveis

ANEXO 4

BALANÇO MATERIAL

BALANÇO MATERIAL

Os balanços de massa envolvidos num processo de extração líquido-líquido são apresentados abaixo.

Para um caso simples de extração de um soluto em um diluente que é imiscível num certo solvente, pode-se usar o coeficiente de distribuição (m):

$$m = \frac{Y}{X} = \frac{\text{massa de soluto massa de solvente - extrato}}{\text{massa de soluto massa de diluente - refinado}} \quad (\text{A.4.1})$$

O fator de extração também pode ser usado :

$$\varepsilon = m \frac{S}{F} \quad (\text{A.4.2})$$

onde : S é o fluxo mássico do solvente, F é o fluxo mássico da alimentação (soluto + diluente), X e Y são as frações mássicas de soluto no refinado e no extrato, respectivamente. Segundo Treybal [5], o fator de extração deve estar situado entre 1,2 e 2,0 para a extração ser economicamente viável.

Para um processo de extração contracorrente, o balanço de massa para o soluto é :

$$X_f F + Y_2 S = X_2 R + Y_1 E \quad (\text{A.4.3})$$

onde : X_f é a fração mássica de soluto na alimentação, o subíndice 2 é a posição referente ao topo da coluna e o subíndice 1 é a posição referente ao fundo da coluna, Y é a fração mássica de soluto na fase rica em solvente, X é a fração mássica de soluto na fase rica em diluente, F é a vazão mássica de alimentação, S é a vazão mássica de solvente, E é a vazão mássica de extrato e R é a vazão mássica de refinado.

ANEXO 5

*CRITÉRIOS DE ESCOLHA
DE SOLVENTES*

Anexo 5 - Critérios de escolha de solventes

Seleção de solventes :

Para a extração convencional, o requerimento da imiscibilidade é freqüentemente satisfeito pela combinação de um solvente aquoso com uma alimentação orgânica, ou vice-versa.

Os vários critérios de seleção de solventes são :

- Seletividade - Um alto valor do fator de separação permite que poucos estágios de equilíbrio sejam usados.
- Razão de equilíbrio - Um alto valor desta indica alta capacidade de solvente para o soluto e permite baixas razões solvente/alimentação.
- Densidade e viscosidade - Uma grande diferença entre as densidades permite alta capacidade no equipamento. Uma alta viscosidade leva a dificuldades de bombeamento, dispersão e taxa de transferência de massa.
- Insolubilidade do solvente no diluente.
- Recuperabilidade do solvente.
- Tensão interfacial - Baixa tensão interfacial auxilia a dispersão das fases e melhora a eficiência de contato e transferência de massa.
- Disponibilidade e custo.
- Outros critérios - Toxicidade e inflamabilidade do solvente. Estabilidade, corrosividade e compatibilidade.

ANEXO 6

MÉTODO DE McCABE-THIELE

PARA CÁLCULO DE NET

E CÁLCULO DE NUT

Anexo 6 - Cálculo do Número de Estágios Teóricos pelo Método de McCabe-Thiele e Cálculo do Número de Unidades de Transferência

6.1 - Diagrama de McCabe e Thiele

O número de estágios teóricos pode ser determinado pelo método de McCabe e Thiele, o qual utiliza a curva de equilíbrio (curva de distribuição), obtida pela projeção das linhas de equilíbrio e uma curva de operação, como é visto na figura A.6.1.

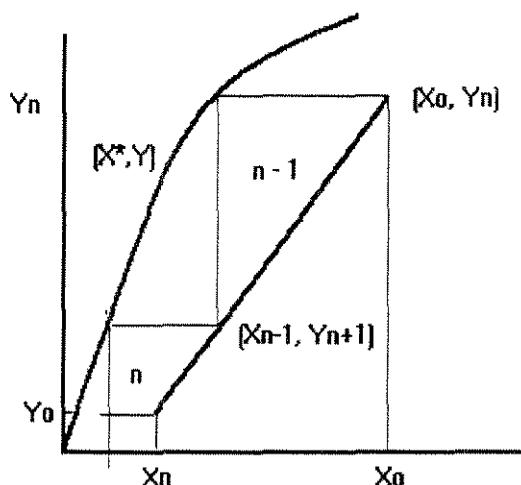


Figura A.6.1 - Diagrama hipotético de McCabe-Thiele

Na construção do diagrama, os estágios são representados por patamares, determinados por retas traçadas a partir do ponto de alimentação (X_0, Y_n), indo de encontro à curva de equilíbrio e retas verticais, a partir dos pontos de encontro no equilíbrio, partindo de (X_0^*, Y_n) . Segue-se esse procedimento até que o ponto (X_n, Y_0) seja encontrado. O número de patamares encontrados é denominado de estimativa do número de estágios teóricos (NET).

6.2 - Métodos de determinação do NUT

A determinação do NUT_j pode ser realizada pelo método gráfico de integração da equação (II.2), que pode ser representada das seguintes formas :

$$NUT_E = \int_{Y_0}^{Y_1} \frac{dY}{Y^* - Y} \quad (\text{II.2.A})$$

$$NUT_R = \int_{X_0}^{X_1} \frac{dX}{X - X^*} \quad (\text{II.2.B})$$

O método gráfico de integração das equações é mostrado na figura A.6.2.

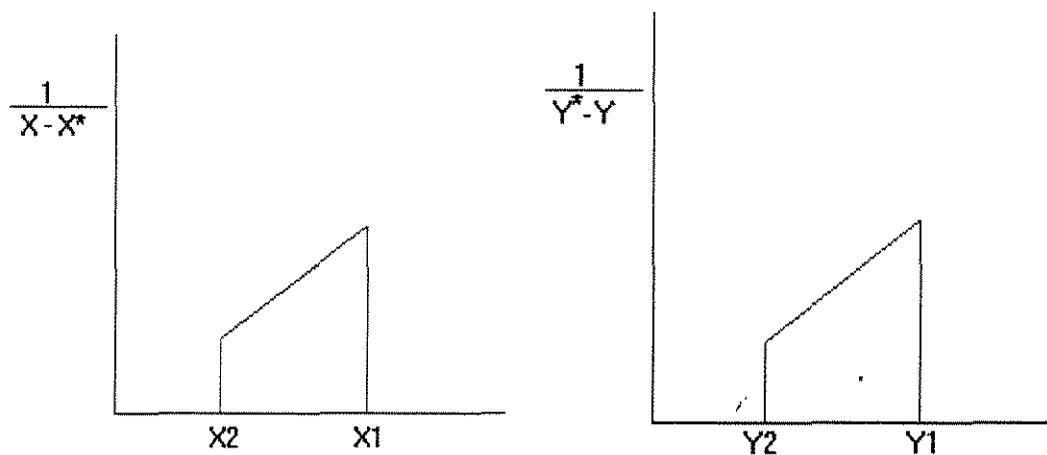


Figura A.6.2 - Método gráfico para determinação do NUT_j

Esses gráficos são construídos através de dados das curvas de operação e equilíbrio. Para os diferentes pontos da curva de operação, obtêm-se os gradientes de concentração ($Y^* - Y$) e ($X - X^*$), assim como os valores das concentrações Y , Y^* e X , X^* .

Para soluções diluídas é preferível utilizar o método analítico de determinação do NUT. Neste caso, segue-se as leis de distribuição, onde $Y = mX^*$. O balanço de massa é dado por :

$$E (Y - Y_1) = R (X - X_1) \quad (\text{A.6.1})$$

$$X^* = (R/mE). (X - X_1) + (Y_1/m) \quad (\text{A.6.2})$$

$$\text{O fator de extração } \varepsilon \text{ é definido como : } \varepsilon = m \cdot S/F \quad (\text{A.6.3})$$

As expressões analíticas são :

$$NTU_E = \frac{\ln \left[\left(\frac{Y_0 - mX_1}{Y_1 - mX_1} \right) (1 - \varepsilon) + \varepsilon \right]}{\varepsilon - 1} \quad (\text{A.6.4})$$

$$NUT_R = \frac{\ln \left[\left(\frac{X_0 - \frac{Y_1}{m}}{X_1 - \frac{Y_1}{m}} \right) \left(1 - \frac{1}{\varepsilon} \right) + \frac{1}{\varepsilon} \right]}{1 - \frac{1}{\varepsilon}} \quad (\text{A.6.5})$$

$$AUT = H / NUT \quad (\text{A.6.6})$$

ANEXO 7

*PROPRIEDADES FÍSICAS E QUÍMICAS
DOS COMPONENTES DO SISTEMA
TERNÁRIO*

Anexo 7 - Propriedades físicas e químicas dos componentes do sistema ternário

Tabela A.7.1 - Propriedades Físicas e Químicas dos Componentes do Sistema Ternário

	ÁCIDO ACÉTICO	BUTANOL		ÁGUA
		1-BUTANOL	n-BUTANOL	
FÓRMULA	CH ₃ COOH	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ OH	CH ₃ CH ₂ CHOHCH ₃	H ₂ O
PESO MOLECULAR	60,05	74,12	74,12	18,016
DENSIDADE (g/cm ³)	1,0492 (20°C)	0,8097 (20°C)	0,8069 (20°C)	1 (20°C)
ÍNDICE DE REFRAÇÃO	1,3716 (20°C)	1,3993 (20°C)	1,3972 (20°C)	1,333 (20°C)
PONTO DE FUSÃO (°C)	16,63	- 88,60	- 114,70	0,00
PONTO DE EBULIÇÃO (°C)	117,9	117,7	99,5	100,0
PONTO DE FLASH (°C)	40	35	26	—
SOLUBILIDADE EM 100 PARTES DE SOLVENTE	miscível em água, álcool, éter, CCl ₄	7,4 em água, miscível em álcool, éter	12,5 em água, miscível em álcool, éter	—

Fontes : Perry, R.H.; Chilton, C.H. . In : Chemical Engineers Handbook. 5 ed. New York : McGraw-Hill, 1983.

Kirk - Othmer. Concise Encyclopedia of Chemical Technology. 3 ed., New York : Wiley & Sons, 1985.

ANEXO 8

MÉTODO NUMÉRICO DE INTEGRAÇÃO

Anexo 8 - Método Numérico de Integração

8.1 - Introdução

Neste anexo será apresentado o método numérico de integração usado para o cálculo da integral, a partir da qual obteve-se o valor do número de unidades de transferência (NUT).

8.2 - Método Numérico - Regra dos Trapézios Repetida

Sabe-se que se $f(x)$ é uma função contínua em $[a,b]$, então, esta função tem uma primitiva neste intervalo, ou seja, existe $F(x)$ tal que $F'(x) = f(x)$; assim $\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a)$. No entanto, pode não ser fácil expressar esta função primitiva por meio de combinações finitas de funções elementares. Ou ainda o caso em que $f(x)$ é conhecida apenas na forma tabelar num intervalo $[a,b]$.

Uma forma de se obter uma aproximação para a integral de $f(x)$ num intervalo $[a,b]$, como nos casos acima, é através dos métodos numéricos.

A idéia básica da integração numérica é a substituição da função $f(x)$ por um polinômio que a aproxime razoavelmente no intervalo $[a,b]$. Assim, o problema seria resolvido pela integração trivial de polinômios [45].

Dentre as formas de integração se encontra a Regra dos Trapézios Repetida, que será comentada a seguir.

1. Regra dos Trapézios

Se usar-se a fórmula de Lagrange para expressar o polinômio $p_1(x)$ que interpola $f(x)$ em x_0 e x_1 tem-se :

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_{a=x_0}^{b=x_1} p_1(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{(x-x_1)}{-h} f(x_0) + \frac{(x-x_0)}{h} f(x_1) \right\} dx = I_T$$

Assim, $I_T = \frac{h}{2} \{f(x_0) + f(x_1)\}$, que é a área do trapézio de altura $h = x_1 - x_0$ e bases $f(x_0)$ e $f(x_1)$.

2. Regra dos Trapézios Repetida

Foi verificado que se o intervalo de integração for grande, a fórmula dos Trapézios fornece resultados imprecisos. O que pode ser feito neste caso, é a subdivisão do intervalo de integração e aplicar a regra dos Trapézios repetidas vezes [45]. Chamando x_i os pontos de subdivisão de $[a,b]$, x_i tais que $x_{i+1} - x_i = h$ e $i = 0, 1, \dots, m-1$ tem-se :

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{m-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{m-1} \frac{h}{2} \{f(x_i) + f(x_{i+1})\}$$

Assim, a Regra dos Trapézios Repetida é dada pela equação abaixo :

$$I_{TR} = \frac{h}{2} \{f(x_0) + 2[f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_{m-1})] + f(x_m)\}$$

ABSTRACT :

In order to get equipments more efficient for liquid-liquid extraction operations, it was developed the mechanically agitated by rotating blades extraction column, being an inedited work, seeing that they weren't found in literature proceedings and papers which have described extraction equipments like this.

For the study of efficiency in this equipment, it was accomplished experiments with the ternary system water-acetic acid- buthanol, where it was varied operational and geometric characteristics, like: free area of blades, overall feed flowrate, solvent/feed flowrate ratio and blades rotation speed.

The results were analysed using four ways of expressing the efficiency: solute recovery fraction, Murphree efficiency, number of mass transfer units (NUT) e number of theoretical stages (NET). It was checked that they are appropriate to the study of this column, except the number of theoretical stages (NET) that didn't provide satisfactory results. This confirmed that the column operation is continuous, seeing that the number of theoretical stages is an appropriate method of evaluation for columns that operate in stages.

It was also proposed a correlation, obtained from the dimensional analysis, for the separation efficiency.

In this work, it was verified that in this equipment high efficiencies can be reached. It was obtained efficiencies as 90%, in the better column operation adjustments. The correlation described the experiments with relatively small errors.