

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

MODELAGEM FÍSICA E MATEMÁTICA DOS PROCESSOS DE EXTRAÇÃO
DE ÓLEO DE SOJA EM FLUXOS CONTRACORRENTE CRUZADOS

por

GILMAR DE OLIVEIRA VELOSO

Tese para a obtenção do
Título de Doutor

Porto Alegre, Abril de 2003.

MODELAGEM FÍSICA E MATEMÁTICA DOS PROCESSOS DE EXTRAÇÃO
DE ÓLEO DE SOJA EM FLUXOS CONTRACORRENTE CRUZADOS

por

Gilmar de Oliveira Veloso
Mestre em matemática aplicada

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de transporte

Orientador: Prof. Dr. Horácio A. Vielmo

Co-orientador: Prof. Dr. Viktor G. Krioukov

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Júlio César Ruiz Claeysen

Prof. Dr. Talita Furlanetto Mendes

Prof. Dr. Oleg Khatchatourian

Prof. Dr. Jun Sérgio Ono Fonseca
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, Abril de 2003.

AGRADECIMENTOS

Ao Doutor Viktor G. Krioukov, pela orientação sempre disponível, pelo desafio proposto, estímulo e confiança.

Ao Doutor Horácio A. Vielmo, pela orientação disponível, pelo desafio proposto, estímulo e confiança.

A mestre Raíza Ischakova, pela orientação prestada.

Ao colega Gilberto Carlos Thomas, pelo companheirismo, estímulo e apoio.

Aos professores do curso de Pós Graduação, que possibilitaram a socialização de significativos conhecimentos na área de engenharia mecânica.

Aos colegas do curso pelo carinho e amizade.

Ao PROMEC pelos serviços prestados.

Ao Departamento de Física, Estatística e Matemática da UNIJUI - FIDENE pelos serviços prestados, pela compreensão, apoio e ajuda prestada.

Ao Grupo Zaffari pela atenção e informações que nos passaram.

A minha esposa, amigos e familiares que dispensaram apoio moral, paciência e muito amor.

RESUMO

Este trabalho visa desenvolver um modelo físico e matemático geral para os processos de extração sólido-líquido em fluxos contracorrente cruzados (CCC) que são utilizados na indústria de alimentos. Levam-se em consideração os processos principais (o transporte de massa entre as fases, difusão e convecção) envolvidos por todo o campo de extração, com uma abordagem bidimensional evolutiva, incluindo as zonas de carregamento, drenagem e as bandejas acumuladoras.

O modelo matemático é formado por equações diferenciais parciais que determinam a alteração das concentrações nas fases poro e “bulk” em todo o campo de extração e equações diferenciais ordinárias (que refletem as evoluções das concentrações médias nas bandejas). As condições de contorno estabelecem as ligações entre os fluxos CCC da micela e matéria-prima e consideram, também, a influência das zonas de drenagem e carregamento.

O algoritmo de resolução utiliza o método de linhas que transforma as equações diferenciais parciais em equações diferenciais ordinárias, que são resolvidas pelo método de Runge-Kutta.

Na etapa de validação do modelo foram estabelecidos os parâmetros da malha e o passo de integração, a verificação do código com a lei de conservação da espécie e um único estado estacionário. Também foram realizadas a comparação com os dados experimentais coletados no extrator real e com o método de estágios ideais, a análise da influência de propriedades da matéria-prima nas características principais do modelo, e estabelecidos os dados iniciais do regime básico (regime de operação).

Foram realizadas pesquisas numéricas para determinar: os regimes estacionário e transiente, a variação da constante de equilíbrio entre as fases, a variação do número de seções, a alteração da vazão de matéria-prima nas características de um extrator industrial e, também foram realizadas as simulações comparativas para diferentes tipos de matéria-prima (flocos laminados e flocos expandidos) usados amplamente na indústria. Além dessas pesquisas, o modelo também permite simular diferentes tipos de solventes.

O estudo da capacidade de produção do extrator revelou que é necessário ter cuidado com o aumento da vazão da matéria-prima, pois um pequeno aumento desta pode causar grandes perdas de óleo tornando alto o custo da produção.

Mesmo que ainda seja necessário abastecer o modelo com mais dados experimentais, principalmente da matéria-prima, os resultados obtidos estão em concordância com os fenômenos físico-químicos envolvidos no processo, com a lei de conservação de espécies químicas e com os resultados experimentais.

ABSTRACT

This work aims at developing a general physical and mathematical model for countercurrent crossed (CCC) flows processes used in the food industry. The main processes involved in the entire extraction field (mass transport between phases, diffusion and convection) are taken into consideration with the use of an evolutionary two-dimensional approach, including loading zones, drainage and the influence of the accumulative trays.

The mathematical model is formulated by partial differential equations that determine the concentrations alteration in pore and bulk phases for the whole extraction field, and by ordinary differential equations (which simulate the evolutions of the medium concentrations in the trays). The boundary conditions establish the connections between the miscella and the raw material CCC flows, and also considers the influence of the drainage and loading zones.

The resolution algorithm uses the method of lines, which transforms the partial differential equations into ordinary differential equations, solved by the Runge-Kutta method.

For the model validation, the mesh and the integration step parameters were studied. The code was verified with respect to the species conservation law for a single steady state. In addition, the comparison of the solution with the experimental data collected in real extractor and with the ideal stages method, the analysis of the influence of the raw material properties in the characteristics of the model, and the influence of the initial data on the basic regime (operational regime) were accomplished.

Numerical experiments were performed to determine: the stationary and transient regimes, the variation of the equilibrium constant between phases, the variation of the number of sections, and the alteration of industrial extractor characteristics as a function of the raw material flow. In addition, comparative simulations for different raw material types (laminated and expanded flakes) that are widely used in industry were realized. The model also allowed the simulation of different types of solvents.

The study of the extractor production capacity revealed that it is necessary to be careful with the increase of the raw material flow, because even a small increase can cause great oil losses, rising the production cost.

Even though it is necessary to supply the model with more experimental data, especially regarding the raw material, the obtained results were in agreement with the physical-chemical phenomena involved in the process, with the chemical species conservation law and with the experimental results.

ÍNDICE

1. Introdução.....	1
1.1 Escopo da tese.....	2
1.2 Apresentação do problema e metas a serem cumpridas.....	3
1.3 Revisão bibliográfica.....	5
1.3.1 Fluxos em meios porosos.....	5
1.3.2 Fluxos cruzados.....	9
1.3.2.1 Características gerais dos fluxos cruzados e seu modelamento.....	9
1.3.2.2 Simulação dos processos em fluxos cruzados em um secador de arroz.....	9
1.3.2.3 Modelo matemático do fluxo cruzado contínuo em secador comercial.....	11
1.3.2.4 Modelagem dos processos em pilha térmica de óxido sólido.....	14
1.3.3 Fluxos contracorrentes.....	15
1.3.3.1 Características gerais dos fluxos contracorrentes.....	15
1.3.3.2 Simulação de uma coluna de absorção utilizando o método de volumes finitos.....	16
1.3.3.3 Estimação do estado distribuído de um trocador de calor de fluxo contracorrente.....	18
1.3.3.4 Modelagem em secadores de milho de fluxo misto.....	21
1.3.4 Fluxos contracorrente cruzados.....	23
1.3.4.1 Aplicação e características dos fluxos contracorrente cruzados.....	23
1.3.4.2 Método de estágios ideais.....	24
1.3.4.3 Simulação de um processo cíclico de extração de café.....	26
1.3.5 Descrição sucinta de alguns métodos numéricos.....	28
1.3.5.1 Método de linhas	28
1.3.5.2 Um método híbrido.....	30
1.3.5.3 Método dos Volumes Finitos.....	33
1.4 Aportes teóricos.....	37
1.4.1 Tipos de extração e fatores que influenciam na sua efetividade.....	37
1.4.2 Componentes envolvidos na extração.....	40
1.4.2.1 Solventes em geral.....	40
1.4.2.2 Matéria-prima.....	42
1.4.2.3 Espécie, micela e suas características.....	42
1.4.3 Difusão e dispersão em líquidos.....	43
1.4.3.1 Difusão.....	44
1.4.3.2 Dispersão.....	45
1.4.3.3 Transferência de massa.....	49

1.4.4 Porosidade e tortuosidade.....	51
1.4.4.1 Porosidades efetiva e de cavidade.....	51
1.4.4.2 Tortuosidade do meio poroso.....	53
1.4.5 Consideração sobre cinética de extração.....	55
2. Modelagem dos processos de extração em fluxos contracorrente cruzados.....	60
2.1 Descrição dos processos em extrator de leito horizontal e criação do modelo físico	60
2.2 Dedução das equações do modelo matemático para uma seção.....	65
2.2.1 Equação da continuidade do óleo na fase “bulk”.....	67
2.2.2 Equação da continuidade do óleo na fase poro.....	69
2.2.3 Condições iniciais e de contorno para o problema de uma seção.....	72
2.3 Modelo matemático para os processos em fluxos contracorrente cruzados.....	73
2.3.1 Seções de percolação.....	73
2.3.2 Modelagem da drenagem	74
2.3.3 Modelagem do carregamento.....	76
2.3.4 Equações para variação das concentrações nas bandejas.....	79
2.3.5 Modelo matemático acoplado.....	81
3 Algoritmo, aplicativo e suas verificações.....	84
3.1 Algoritmo de cálculo.....	84
3.2 Verificação do esquema numérico escolhido para o “problema de uma seção”.....	89
3.3 Verificação do modelo acoplado pelos critérios “internos”.....	92
3.3.1 Influência dos tamanhos da malha e do passo de integração.....	93
3.3.2 Estabelecimento de um estado estacionário único.....	97
3.3.3 Conservação da espécie no extrator.....	98
3.4 Comparação com dados experimentais e estabelecimento de um regime básico.....	99
3.4.1 Coleta de dados experimentais e determinação dos parâmetros operacionais.....	100
3.4.2 Cálculo das concentrações nas bandejas pelo método de estágios ideais.....	107
3.4.3 Comparação dos resultados teóricos com experimentais e estabelecimento do “regime básico”.....	109
3.5 Influência de propriedades da matéria-prima nas características principais do modelo.....	110
4. Simulações numéricas.....	114
4.1 Descrição do regime estacionário.....	114
4.2 Descrição do estado transiente.....	115

4.3	Variação da constante de equilíbrio.....	121
4.4	Variação do número de seções m_s	123
4.5	Alteração da vazão de matéria-prima.....	126
4.6	Flocos expandidos e laminados. Comparação das características de extração.....	128
5.	Conclusão e contribuições.....	133
	Referências Bibliográficas.....	137

LISTA DE SÍMBOLOS

- a_p - superfície de contato entre as fases poro e “bulk” [m^2/m^3]
- C - concentração volumétrica de espécie na fase “bulk”
- C^p - concentração volumétrica de espécie na fase poro
- C_s - concentração volumétrica de espécie na micela, na saída do extrator
- C_{en} - concentração volumétrica da micela na fase “bulk”, na entrada da matéria-prima
- C_{en}^p - concentração volumétrica da micela em fase poro, na entrada da matéria-prima
- C_{in} - concentração volumétrica média de espécie no solvente, no campo de extração
- C_{in}^p - concentração volumétrica média de espécie na fase poro, no campo de extração
- C_{in}^N - concentração volumétrica de óleo na fase sólida
- C_{es} - concentração volumétrica de óleo puro que ocupa o espaço ($\varepsilon_p - \varepsilon_m$)
- \bar{C}_2 - concentração volumétrica média de espécie na micela, na saída do extrator
- \bar{C}_m - concentração volumétrica média de espécie na m-ésima bandeja
- C_D - concentração volumétrica de espécie na zona de drenagem
- C^N - concentração volumétrica de óleo na matéria-prima, na entrada do extrator
- c_w - coeficiente de arraste da micela, de uma seção para outra
- D_{AB} - coeficiente de difusividade [m^2/s]
- d_p - diâmetro médio da partícula [m]
- E_S - coeficiente de dispersão [m^2/s]
- E_d - coeficiente mássico de equilíbrio do soluto entre as fases sólido e poro
- E_d^v - coeficiente volumétrico de equilíbrio do soluto entre as fases sólido e poro
- F_{ol} - vazão volumétrica de espécie perdida no extrator (saída do farelo) [m^3/s]
- F_{ol}^p - vazão volumétrica de espécie perdida na fase poro do farelo [m^3/s]
- F_{ol}^N - vazão volumétrica de espécie perdida na fase sólida [m^3/s]
- g_i - frações mássicas de espécie na micela, nas bandejas
- g_s - fração mássica de micela forte
- g_{es} - fração mássica de espécie
- g_{in} - fração mássica inicial de espécie em solvente, na entrada do extrator
- g_{so} - fração mássica de hexano
- g_f^{es} - fração mássica de espécie no farelo

g_f^{so} - fração mássica de solvente no farelo
 g_s^{so} - fração mássica de solvente na micela concentrada, na saída da matéria-prima
 g^N - fração mássica de espécie na fase sólida da matéria-prima, na entrada do extrator
 g_p - fração mássica de solvente na micela, na entrada do extrator
 H - largura do leito [m]
 k_f - coeficiente de transferência de massa entre as fase poro e “bulk” [m/s]
 L_r - altura do leito [m]
 M_n - vazão mássica de matéria-prima na entrada do extrator [kg/s]
 M_s - vazão mássica de matéria sólida sem óleo no extrator [kg/s]
 M_i^h - vazão mássica de óleo na micela entre os estágios $i \rightarrow i + 1$ [kg/s]
 M_i^s - vazão mássica de óleo (na matéria-prima) entre estágios: $i \rightarrow i - 1$ [kg/s]
 M_{mis}^u - vazão mássica da micela concentrada na entrada da destilaria [kg/s]
 M_{ol}^u - vazão mássica de óleo na saída da micela concentrada (forte) [kg/s]
 M_{so}^u - vazão mássica de hexano na saída da micela concentrada (forte) [kg/s]
 $M_{n,ol}^s$ - vazão mássica da matéria-prima esgotada, sem hexano e com óleo perdido [kg/s]
 M_{so}^{DT} - vazão mássica de hexano, na saída da matéria-prima [kg/s]
 M_{so}^{Σ} - vazão mássica total de hexano no extrator [kg/s]
 m_s - número de seções do extrator
 n - número de células na direção vertical
 N_l - número de camadas verticais da 1ª seção
 N_h - número de células na direção horizontal de uma seção típica
 N_T - fração mássica inicial de espécie na matéria-prima
 P_{ol} - coeficiente teórico das perdas de espécie
 Q - vazão volumétrica [m^3/s]
 Q_{so} - vazão volumétrica de solvente puro no extrator [m^3/s]
 Q_{es} - vazão volumétrica da espécie no extrator [m^3/s]
 Q_+^{es} - vazão volumétrica de espécie na entrada do extrator [m^3/s]
 Q_D - vazão volumétrica de micela na zona de drenagem [m^3/s]
 Q_{es}^D - vazão volumétrica de espécie dentro de Q_D [m^3/s]
 Q_{Σ} - vazão volumétrica total de micela dentro do extrator [m^3/s]
 Q_P - vazão volumétrica de preenchimento, na zona de carregamento [m^3/s]

- Q_s - vazão volumétrica de micela forte, na saída do extrator [m^3/s]
- Q_{so}^{DT} - vazão volumétrica de hexano no farelo branco, na saída da matéria-prima [m^3/s]
- $Q_{n,ol}^s$ - vazão volumétrica de óleo no farelo branco, na saída da matéria-prima [m^3/s]
- Re - número de Reynolds
- Sc - número de Schmidt
- Sh - número de Sherwood
- u - velocidade horizontal da matéria-prima movida pelo transportador [m/s]
- u_h - velocidade da micela na direção horizontal [m/s]
- V_m - velocidade vertical da micela nas seções de percolação [m/s]
- V_S - velocidade relativa entre a micela e o meio poroso [m/s]
- \bar{V}_b - volume médio de espécie nas bandejas [m^3]
- X_C - Coordenada da ultima seção de percolação (entrada de hexano) [m]
- X_n - Coordenada da última seção de percolação (entrada de hexano) [m]
- X_S - largura de uma seção [m]
- X_I - espessura da primeira seção de percolação [m]
- X_f - espessura da última seção de percolação (entrada de hexano) [m]
- X_D - espessura da seção de drenagem [m]
- x - coordenada horizontal do leito [m]
- z - coordenada vertical do leito [m]
- μ - viscosidade da fase “bulk” [$Pa \cdot s$]
- ρ - massa específica média da micela [kg/m^3]
- ρ_n - massa específica da matéria-prima [kg/m^3]
- ρ_{es} - massa específica da espécie [kg/m^3]
- ρ_{so} - massa específica do solvente [kg/m^3]
- ρ_{sj} - massa específica da soja [kg/m^3]
- $\bar{\rho}_s$ - densidade da micela, na saída do extrator [kg/m^3]
- ε_b - porosidade do leito (fase “bulk”)
- ε_p - porosidade interna da partícula (fase poro)
- ε_m - fração do volume da fase poro que é preenchida por micela, no início do carregamento
- Δ - variação das variáveis
- τ_p - tempo total de integração [s]
- τ - tempo [s]

Índices inferiores

- b* - “bulk”
- D* - drenagem
- en* - entrada do extrator
- es* - espécie ou produto
- he* - hexano
- in* - início do processo de extração, no campo de extração
- n* - matéria-prima ou refinado
- N* - parte sólida da matéria-prima
- o* - instante de tempo zero
- ol* - óleo
- p* - poro
- P* - preenchimento na zona de carregamento
- s* - saída do extrator
- so* - solvente ou extrato

LISTA DE FIGURAS

1.1 - Sistemas bicomponentes em leito fixo.....	7
1.2 - Esquema principal dos processos em leito fixo [Majumdar, 1995].....	8
1.3 - Esquema dos fluxos co-correntes.....	8
1.4 - Esquema dos fluxos cruzados.....	9
1.5 - Secador de arroz em fluxo cruzado.....	10
1.6 - Configuração geral de um secador em fluxo cruzado.....	12
1.7 - Representação de um secador de fluxo cruzado por uma série de estágios.....	13
1.8 - Descrição esquemática de uma pilha plana SOFC para fluxo cruzado.....	14
1.9 - Perfil de temperatura, corrente elétrica, espécies H ₂ e CH ₄ em fluxo cruzado.....	15
1.10 - Esquema dos fluxos contracorrentes em uma coluna de absorção gás-líquido.....	16
1.11 - Esquema dos fluxos contracorrentes em instalação experimental.....	16
1.12 - Condições de contorno para uma coluna de absorção em fluxos contracorrentes.....	18
1.13 - Conjunto experimental de Estel et al., 2000.....	19
1.14 - Secadores de fluxos mistos.....	21
1.15 - Esquema dos fluxos contracorrente cruzados.....	23
1.16 - Extração contínua por fluxos contracorrente de <i>i</i> estágios teóricos.....	25
1.17 - Esquema operacional da extração de café.....	27
1.18 - Esquema de uma parede aquecida dividida por <i>n</i> camadas.....	29
1.19 - Malha para o problema unidimensional de condução de calor.....	34
1.20 - Malha bidimensional para o problema de condução de calor.....	36
1.21 - Esquema de extração líquido-líquido.....	38
1.22 - Esquema de extração sólido-líquido por lixiviação.....	39
1.23 - Esquema de difusão mútua das substâncias A e B.....	44
1.24 - Dispersão axial em meios porosos.....	48
1.25 - Representação dos poros.....	52
1.26 - Vias para passagem do líquido através de meios porosos diferentes.....	53
1.27 - Esquema da passagem do líquido através de canais diferentes.....	54
1.28 - Esquema dos fluxos da espécie num fragmento elementar do campo de extração.....	56
1.29 - Transferência de massa em uma partícula esférica.....	57
1.30 - Curvas de extração.....	58
2.1 - Esquema dos processos e dos dispositivos de um extrator horizontal.....	61

2.2	- Esquema de transferência de massa entre as fases sólida, poro e “bulk”	62
2.3	- Distribuição das concentrações pela seção de percolação.....	63
2.4	- Esquema principal dos fluxos no extrator.....	64
2.5	- Esquema de uma seção de extração com fluxos dos componentes.....	66
2.6	- Esquema de divisão do campo de extração numa seção.....	66
2.7	- Esquema dos fluxos no elemento (i,j)	68
2.8	- Esquema dimensional de um extrator horizontal.....	73
2.9	- Esquema da drenagem e dos fluxos na última seção.....	75
2.10	- Esquema do carregamento.....	77
2.11	- Esquema do preenchimento de uma partícula.....	77
3.1	- Esquema da numeração das células, das incógnitas C_{ij} e das seções, no campo de extração.....	85
3.2	- Esquema da numeração das incógnitas Y_k na malha do campo de extração.....	86
3.3	- Esquema do domínio de integração.....	88
3.4	- Esquema dos fluxos para uma seção, com $i = 1..n$ e $j = 1..p$	90
3.5	- Distribuição das concentrações C de óleo na fase “bulk” para vários momentos do tempo.....	91
3.6	- Distribuição das concentrações C^p de óleo na fase poro para vários momentos do tempo.....	91
3.7	- Regiões de estabilidade absoluta para os métodos de Euler e R-K.....	97
3.8	- Esquema do campo de extração com pontos de coleta e os tamanhos medidos.....	100
3.9	- Esquema de estágios ideais para fluxos CCC.....	108
3.10	- Comparação dos dados experimentais com os resultados numéricos.....	110
4.1	- a) Campo de extração em regime estacionário ($t = 19950s$) – fase “bulk”.....	115
	b) Campo de extração em regime estacionário ($t = 19950s$) - fase poro.....	115
4.2	- a) Campo de extração em regime transiente ($t = 36s$) – fase “bulk”.....	116
	b) Campo de extração em regime transiente ($t = 36s$) – fase poro.....	116
4.3	- a) Campo de extração em regime transiente ($t = 360s$) – fase “bulk”.....	117
	b) Campo de extração em regime transiente ($t = 360s$) – fase poro.....	117
4.4	- a) Campo de extração em regime transiente ($t = 1200s$) – fase “bulk”.....	119
	b) Campo de extração em regime transiente ($t = 1200s$) – fase poro.....	119
4.5	- a) Campo de extração em regime transiente ($t = 2520s$) – fase “bulk”.....	120
	b) Campo de extração em regime transiente ($t = 2520s$) – fase poro.....	120

4.6 - Distribuição das \bar{C}_m em função de m para diferentes valores de E_d^V	122
4.7 - Alteração de C_s e de Q_s em função de E_d^V	122
4.8 - Alteração de C_{en}^p e as perdas de óleo P_{ol} em função de E_d^V	123
4.9 - Evolução das concentrações C_s em função do número de seções.....	124
4.10 - Variação da concentração C_s e das perdas de óleo P_{ol} em função de m_s	124
4.11 - Alteração das concentrações médias das bandejas \bar{C}_m em função de m_s	125
4.12 - Variação de C_{en}^p , \bar{C}_2 e Q_s em função do número de seções	125
4.13 - Evolução da concentração C_s para diferentes velocidades u	126
4.14 - Evolução da concentração C_D para diferentes velocidades u	127
4.15 - Alteração de C_s , C_{en}^p , e P_{ol} em função da velocidade u	127
4.16 - Variação das concentrações médias \bar{C}_m em função da velocidade u	128
4.17 - Evolução das concentrações C_s na saída do extrator para flocos laminados e expandidos.....	130
4.18 - Evolução das perdas de óleo P_{ol} no extrator para flocos laminados e expandidos.....	130
4.19 - Distribuições \bar{C}_m nas bandejas.....	131

ÍNDICE DE TABELAS

1.1 - Potencial de extração em condições de laboratório.....	41
1.2 - Valores de coeficientes de difusão em diluição de líquidos orgânicos.....	45
1.3 - Coeficientes de transferência de massa.....	50
3.1 - Significados da grandeza ϕ , para os fragmentos da fronteira, na equação (3.7).....	88
3.2 - Dados iniciais para o problema de uma seção.....	90
3.3 - Comparação dos valores das concentrações C obtidas, pelo método de linhas e Volumes Finitos.....	92
3.4 - Influência dos parâmetros N_h , n e h na estabilidade dos cálculos ($E_S = 10^{-6} m^2/s$).....	94
3.5 - Limites na estabilidade dos cálculos para diferentes E_S	95
3.6 - Comparação dos estados estacionários obtidos para os regimes: industrial, suave e forte ($n = 20$, $N_h = 20$, $h = 2s$).....	98
3.7 - Dados experimentais coletados no extrator “De Smet”.....	102
3.8 - Resultados obtidos pelo método de estágios ideais.....	109
3.9 - Dados iniciais do regime básico utilizados no modelo.....	110
3.10 - Sensibilidade do modelo às propriedades da matéria-prima.....	111
3.11 - Características da extração para diferentes valores de E_S	113
4.1 - Dados iniciais alterados para flocos laminados.....	129
4.2 - Características da extração para diferentes tipos de matéria-prima.....	131

1. INTRODUÇÃO

Na natureza e na indústria, existe uma grande variedade de fluxos líquidos através dos meios porosos: difusão da água subterrânea, secagem de grãos por ar, movimento dos gases em tubos cromatográficos, etc. Os modelos matemáticos destes processos, baseados nas leis fundamentais do movimento e da difusão, prevêm as distribuições espaciais das características dos fluxos (modelos detalhados), o que contribui essencialmente na resolução dos problemas práticos e científicos. Analisando a bibliografia, nota-se que, na indústria de alimentos, os extratores que operam em fluxos contracorrente cruzados (fabricação do açúcar, óleo de soja, óleo de girassol, café, etc.) são utilizados há mais de 20 anos. Observa-se, também, que são publicados numerosos modelos detalhados sobre os fluxos contracorrentes (combustão do carvão, processos químicos em reatores catalíticos, secagem de grão, etc) sobre os fluxos cruzados (secagem de grãos de soja, separação das substâncias, filtração pela membrana, etc). Entretanto, os fluxos contracorrente cruzados (CCC), que possuem características particulares, e são de importância substancial para os extratores industriais contemporâneos, por enquanto, ainda não foram simulados detalhadamente. O único modelo encontrado é o método dos estágios ideais que não considera as características reais dos extratores.

Neste trabalho, desenvolve-se um novo modelo físico e matemático de processos em fluxos contracorrente cruzados com distribuições espaciais 2D evolutivo, aplicado a um extrator horizontal de óleo vegetal. A primeira etapa da modelagem matemática dos processos neste extrator foi realizada no período compreendido entre os anos 1998-2000, e foi apresentado como dissertação de mestrado [Veloso et al., 1999]. Nesta etapa foram elaborados:

- o modelo físico dos processos no campo de extração;
- o modelo matemático e algoritmo de cálculo destes processos;
- um submodelo simples de carregamento;
- foram realizadas algumas simulações numéricas.

Ao mesmo tempo:

- faltava um submodelo de drenagem e previsão das perdas de óleo;
- foi necessário melhorar o submodelo de carregamento;
- faltava a verificação do modelo (satisfação das leis de conservação, determinar zonas de estabilidade dos cálculos, coleta dos dados experimentais e fazer a comparação com os mesmos).

Por isso as pesquisas sobre a modelagem de extratores industriais foram continuadas e os resultados são apresentados nesta tese.

1.1 Escopo da tese

No capítulo 1, é feita uma análise dos fluxos que envolvem transferência de massa em meios porosos, considerando as diferentes formas de movimento dos líquidos e dos meios porosos. No item 1.2, é feita a apresentação do problema e metas a serem cumpridas e, no item 1.3, é feita a revisão bibliográfica. Em particular: no item 1.3.1, apresentam-se os fluxos em meios porosos; no item 1.3.2, estão descritas as características gerais dos fluxos cruzados e seu modelamento; no item 1.3.3, as características gerais dos fluxos contracorrentes; no item 1.3.4, é feita uma análise do estado da modelagem matemática de fluxos contracorrente cruzados que, de alguma maneira estão, direta ou indiretamente, ligados com o tema da pesquisa. Também foi realizada, no item 1.3.5, uma breve descrição de alguns métodos numéricos utilizados para a resolução de equações diferenciais (método de linhas, um método híbrido e método de volumes finitos). No item 1.4 é dado um embasamento teórico sobre a transferência de massa, iniciando por uma descrição dos tipos de extração (item 1.4.1): extração líquido-líquido e sólido-líquido. No item 1.4.2 são descritos os conceitos e características principais dos conceitos envolvidos nos processos de extração, tais como: de solvente, de matéria-prima e de espécie (óleo). No item 1.4.3, é feita uma análise dos principais processos envolvidos na extração: difusão, dispersão e transferência de massa por convecção. No item 1.4.4 apresentam-se as características importantes que influenciam na extração: a porosidade e a tortuosidade. Para finalizar o capítulo, faz-se as considerações sobre a cinética da extração (item 1.4.5).

No capítulo 2 foram descritos os processos num extrator horizontal, fenômenos e hipóteses do modelo físico (item 2.1). Foi desenvolvido um modelo matemático para uma seção de percolação, incluindo as equações para alteração das concentrações nas fases “bulk” e poro, condições iniciais e de contorno (item 2.2). No item 2.3, foi desenvolvido o modelo matemático acoplado para os processos em fluxos contracorrente cruzados, incluindo os submodelos das seções de percolação, da drenagem, do carregamento, de variação das concentrações nas bandejas e, condições iniciais e de contorno que ligam todos os submodelos.

No capítulo 3, faz-se uma descrição do algoritmo de cálculo (item 3.1) e, no item 3.2, é realizada a verificação dos resultados obtidos pelo algoritmo, apresentando: a verificação do esquema numérico escolhido (método de linhas), analisando-o no “problema de uma seção” e comparando os seus resultados com os obtidos num software em volumes finitos. No item 3.3, é realizada a verificação do modelo acoplado pelos critérios “internos”, tais como: influência do tamanho da malha e do passo de integração, estabelecimento de um regime estacionário e comparação com a lei da conservação de espécie. No item 3.4, foi realizada a comparação dos

resultados obtidos pelo modelo com os dados experimentais bem como o estabelecimento de um regime básico. Este item consiste: de uma breve descrição do processo de coleta dos dados e determinação dos parâmetros operacionais; cálculo de concentrações nas bandejas pelo método de estágios ideais e, comparação dos resultados teóricos com experimentais e o estabelecimento de um “regime básico”. No item 3.5 foi analisada a influência do condicionamento da matéria-prima nas características principais do modelo.

No capítulo 4 são descritas as propriedades do regime estacionário e transiente, respectivamente (itens 4.1 e 4.2). São apresentadas as análises da influência da constante de equilíbrio (item 4.3) e do número de seções do extrator (item 4.4). A influência da alteração da vazão de matéria-prima é apresentada o item 4.5 e, no item 4.6, é apresentada uma análise da influência do condicionamento da matéria-prima (flocos laminados e expandidos) nas características do processo.

1.2 Apresentação do problema e metas a serem cumpridas

A análise dos fluxos de transferência de massa em meios porosos tem sido um ramo de grande interesse na engenharia nas últimas décadas, devido às inúmeras aplicações industriais em processos químicos e ambientais. Estes processos estão organizados pelos fluxos: co-correntes, cruzados, contracorrentes e contracorrente cruzados. Observa-se que há muitos modelos para simulações dos diversos fluxos mas, para os processos que envolvem os fluxos CCC, são poucos, principalmente, com distribuições espaciais das características dentro do fluxo.

Os fluxos CCC são utilizados, principalmente, em processos de extração de óleo vegetal de sementes oleaginosas. Os processos de extração contínua por solvente são orientados para a fabricação de alimentos (açúcar, óleo, café, etc.) e são realizados em instalações de grande porte, tais como Rotocell, Crown Model e De Smet. Neste sentido, torna-se importante a implantação da modelagem matemática contemporânea para desenvolver um modelo e código para simular os processos de extração nos fluxos CCC. Com isso, pode-se determinar as suas características e reduzir gastos consideráveis para o projeto, melhoramento e funcionamento destas instalações.

O leito fixo [Majumdar et al., 1995] é um dos primeiros exemplos de aplicação da modelagem matemática em processos de extração contínua. Além do leito fixo, há trabalhos de cunho experimental que vêm ao encontro da presente proposta de tese. Alguns são diretamente ligados à extração de óleo [Abraham et al., 1988; Bewaji et al., 1996; Chien et al., 1990; Karnofsky, 1986] e outros, indiretamente ligados [Bistolfi et al., 1996; Estel et al., 2000;

Johansson et al., 2000; Lasseran et al., 1993; Marrone et al., 1998; Qi et al., 1996; Rumsey et al., 2001; Silva et al., 1997; Wang et al., 1999; Wronski et al., 1998], mas que possuem algumas semelhanças com processos de extração, tais como fórmulas, análise de resultados, gráficos, dados, etc. Outras informações foram obtidas diretamente das indústrias (informações do funcionamento dos extratores, dados geométricos, dados de concentração de micela e matéria-prima, etc.) que estão se mostrando interessadas em escolher melhores regimes de funcionamento, otimizar as características da matéria-prima, etc.

Considerando o contexto acima, é apresentado o problema deste trabalho, da seguinte maneira:

1. Desenvolver o modelo físico-matemático de processos em fluxos contracorrente cruzados orientados para os extratores industriais que utilizam solvente, com distribuições espaciais das características.
2. Com base no modelo físico-matemático, elaborar um algoritmo de cálculo e o código do aplicativo correspondente para esse processo.
3. Aplicando o modelo para algum extrator existente, verificar o modelo e comparar com os dados experimentais coletados numa empresa.
4. Baseado no código elaborado, realizar as simulações numéricas para determinar e pesquisar as características do processo num extrator real.

As metas a serem cumpridas neste trabalho são:

1. Criar um modelo físico dos processos de extração para fluxos CCC.
2. Criar um modelo matemático do campo de extração, considerando as particularidades do funcionamento de um extrator típico.
3. Modelar as zonas de drenagem, carregamento e partes essenciais do extrator.
4. Elaborar um algoritmo dos processos em fluxos CCC.
5. Criar um código do aplicativo com base no modelo matemático e no algoritmo desenvolvido.
6. Verificar o modelo usando: as leis de conservação, critérios matemáticos de convergência e, comparação, por fragmentos, com resultados obtidos em pesquisas numéricas de outros autores.
7. Comparar os resultados obtidos com os dados experimentais coletados em alguma empresa e, o estabelecimento dos parâmetros do modelo matemático para simulações numéricas.
8. Determinar as características de um extrator real através de simulações numéricas.

1.3 Revisão bibliográfica

1.3.1 Fluxos em meios porosos

A análise da transferência de massa em meios porosos tem sido um ramo de grande interesse na engenharia nas últimas décadas devido às inúmeras aplicações industriais em processos químicos e ambientais. Algumas das aplicações envolvem o processamento de alimentos, conforme mostrado em Lee et al., 1986, o uso de leitos fixos na indústria química [Bott et al., 2000; Higler et al., 1999; Huang et al., 2001; Krupiczka et al., 1997; Ramanand et al., 1996; Wang et al., 1995; Zamponi et al., 1996], o armazenamento e a secagem de grãos [Lasseran et al., 1993; Borges et al., 2001; Qi et al., 1996; Rumsey et al., 2001; Wang et al., 1999], a engenharia de reservatórios petrolíferos, a dissolução de agentes contaminantes em solo aquoso [Hossain et al., 1999; Jinglian et al., 1998; Lafolie et al., 1993], e a extração de óleos vegetais [Bewaji et al., 1996; Chien et al., 1990], etc.

As equações que modelam o fluxo nestas e noutras situações são obtidas combinando a lei de Darcy (a nível microscópico, em escala de 10^{-4} a 10^{-3} m) e o balanço de massa (a nível macroscópico, em escala de 10^2 a 10^3 m) em cada uma das fases. As forças gravitacionais, viscosas e capilares provocam o movimento.

A modelagem de fluxos de transferência de massa é difícil por causa da forte dependência hidrodinâmica nas interfaces partícula-fluido devido à estrutura do leito, efeitos multifásicos, etc.; há questões delicadas tais como a diferença de escalas microscópicas e macroscópicas. A formulação matemática das leis de conservação consiste em um sistema acoplado de equações diferenciais [Hossain et al., 1999; Alves et al., 2001; Jinglian et al., 1998; Kreiss et al., 1992; Styne, 1995], geralmente com termos de transporte por difusão e convecção, não-lineares e que devem ser resolvidas, na sua maioria, em um domínio irregular sujeitas a diversos tipos de condições iniciais e de contorno. As soluções analíticas se restringem a problemas extremamente simples e, por isso, as soluções numéricas são as preferidas. O estudo experimental é importante e deve ser feito, sempre que possível, visando validar as soluções e obter dados. O avanço tecnológico dos computadores ocorrido nas últimas décadas, tem permitido a sofisticação das abordagens que aplicam técnicas numéricas para a solução do modelo matemático proposto.

Os quatro mecanismos principais que provocam o transporte de espécies químicas em meios porosos são as forças viscosas, as gravitacionais, os efeitos da difusão e as forças capilares. Os agentes que provocam os três primeiros mecanismos são a pressão, a densidade e a

variação de concentração. As forças capilares são causadas pela diferença de pressão nas fronteiras entre as fases.

Para construir as equações diferenciais que, combinadas com a lei de Darcy e condições de contorno, modelam o fluxo em meios porosos, são usados os princípios de conservação de massa e de energia. Em problemas práticos de mecânica dos fluidos em meios porosos, a mudança de escala é amplamente usada e, por isso, a técnica de adimensionalização é útil. Isto alivia a dependência do sistema de unidades, e os parâmetros que aparecem na equação são números adimensionais: o número de Reynolds, de Sherwood, de Schmidt, de Peclet, entre outros.

Referindo-se à aproximação contínua para a dinâmica de fluidos em meios porosos, é necessário introduzir parâmetros médios macroscópicos, ou coeficientes para adaptar o fenômeno observado para possibilitar fazer a passagem do nível contínuo microscópico para o macroscópico. Tais parâmetros são a porosidade, a permeabilidade, a dispersividade, entre outros. Estes parâmetros são introduzidos devido à inabilidade para resolver o problema a nível microscópico. Sendo assim, estes parâmetros devem ser determinados experimentalmente, conforme descrito em [Adrover et al., 1996; Benadda, 1996; Guo et al., 2001; Rees et al., 2000].

A pesquisa de modelos matemáticos para fluidos em meios porosos que sejam precisos e de rápida execução computacional, nas últimas décadas, teve grande avanço, e, combinado com os métodos experimentais, vem se tornando uma alternativa eficiente de geração de informações técnicas para projetos, construção e monitoramento de processos.

Existem várias maneiras de classificação dos fluxos em meios porosos. Por exemplo, em Sisson, 1998, classificam-se os escoamentos bicomponentes, numa abordagem unidimensional, em três categorias: leito fixo, leito fluidizado e transporte de sólidos.

Entretanto, no presente trabalho é conveniente classificar os fluxos usando uma abordagem bidimensional, considerando o movimento do líquido e do meio poroso em instalações industriais. Neste sentido, destacam-se os fluxos em leito fixo, co-correntes, contracorrentes, cruzados e finalmente contracorrentes cruzados. O último tipo dos fluxos citado é o objeto de estudo deste trabalho.

Inicialmente apresentam-se os esquemas dos fluxos em leito fixo e co-correntes. A figura 1.1 apresenta um esquema de leito fixo, conforme mostrado em Sissom et al., 1998, onde as partículas sólidas permanecem fixas, retidas por chapas de aço perfuradas, enquanto que a solução passa através do leito de partículas.

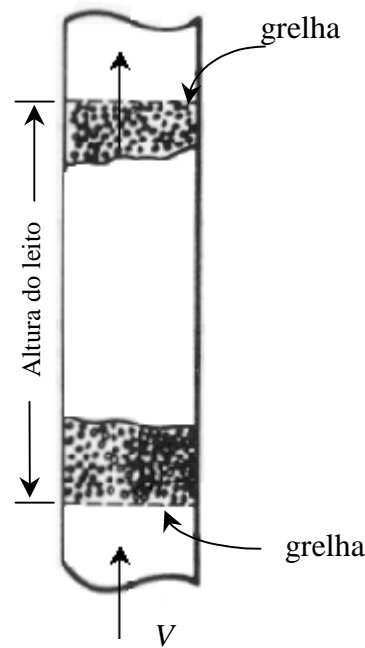


Figura 1.1- Sistemas bicomponentes em leito fixo

Este tipo de escoamento é utilizado, por exemplo, na engenharia do petróleo, na extração de óleo bruto ou gás a partir de um reservatório natural subterrâneo; é importante na engenharia civil para o processo de purificação da água; na engenharia química para os processos de destilação e sedimentação e, na engenharia mecânica, na geração de potência e na filtração.

Um exemplo de modelagem dos processos em leito fixo (extração de óleo por solvente) é mostrado na figura 1.2. Neste caso, a matéria-prima fica depositada, e no início, o solvente entra no topo do leito. Por percolação, retira o soluto das partículas da matéria-prima. A mistura enriquecida sai na parte inferior.

A figura 1.3 mostra o esquema dos fluxos co-correntes apresentados em Lasseran et al., 1993. O modo de operação co-corrente é usualmente preferido quando a diferença de concentração no meio não é a força motriz do processo. O esquema representado na figura 1.3 é de um secador de grãos.

O ar quente entra na parte superior e sai na parte inferior bastante úmido. Dentro do leito, o ar e a matéria-prima se movimentam no mesmo sentido, o que caracteriza o fluxo co-corrente.

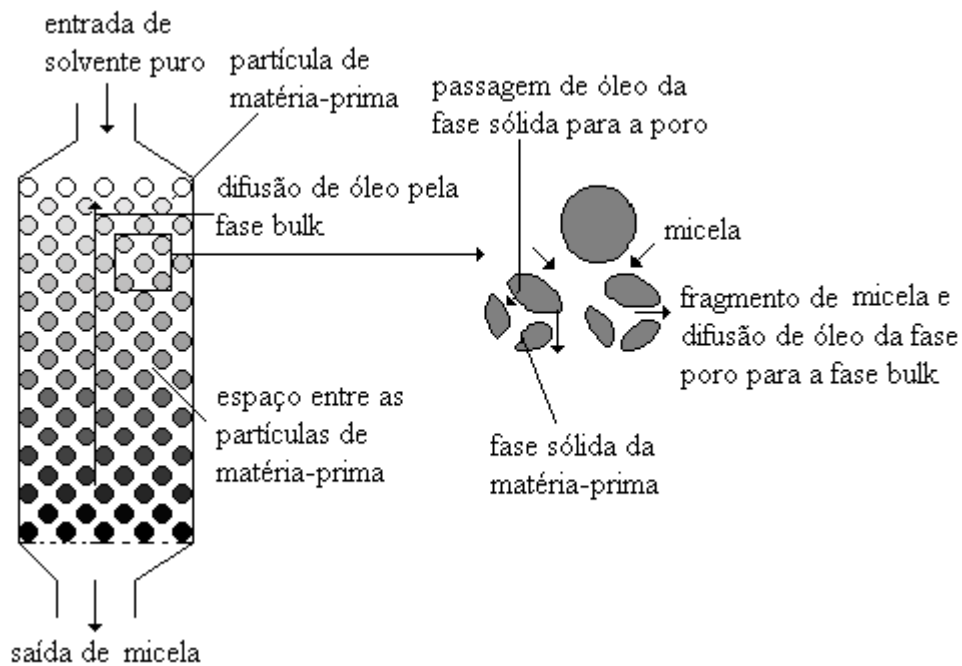


Figura 1.2 - Esquema principal dos processos em leito fixo [Majumdar et al., 1995]

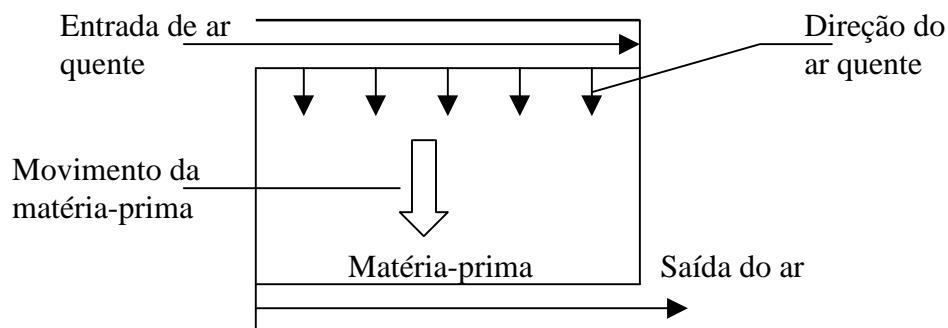


Figura 1.3 – Esquema dos fluxos co-correntes

Nos itens seguintes deste capítulo, apresenta-se uma descrição de trabalhos experimentais e modelos matemáticos relacionados com processos de transferência de massa em meios porosos, isto é, o transporte de certas espécies químicas num meio composto por vários componentes, em fluxos cruzados, contracorrentes e contracorrente cruzados, bem como, alguns métodos numéricos utilizados na resolução estes problemas.

1.3.2 Fluxos cruzados

1.3.2.1 Características gerais dos fluxos cruzados e seu modelamento

Os fluxos cruzados encontram-se, principalmente, na agroindústria e indústria química e, envolvem o movimento de duas fases em direções perpendiculares entre si.

A figura 1.4 mostra, de forma geral, um secador de grãos típico onde um gás secante entra através de perfurações na parte superior de um leito horizontal para banhar os sólidos (matéria-prima) que estão passando pelo secador. O gás mistura-se com os sólidos molhados no interior do secador, retira a umidade e sai na parte inferior do leito.

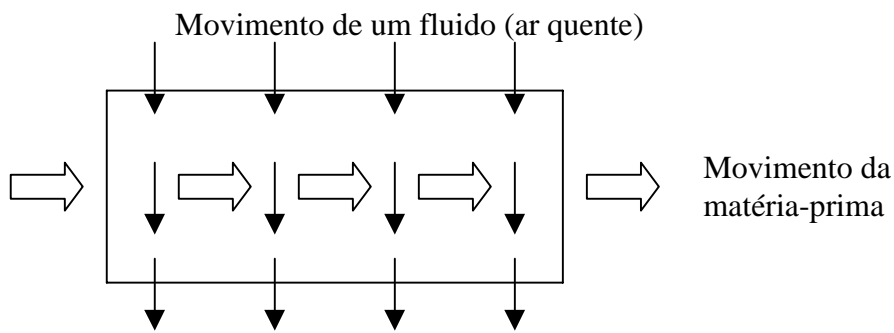


Figura 1.4 – Esquema dos fluxos cruzados.

A modelagem desses fluxos encontra-se em muitos estudos e, geralmente os modelos matemáticos são baseados nos balanços de energia e massa, resultando em equações em derivadas parciais com termos convectivos de transferência de massa, reações químicas e, às vezes, difusão. As condições de contorno (se não tem difusão) são, como regra geral, independentes do tempo. Abaixo, revisam-se algumas publicações sobre os fluxos cruzados.

1.3.2.2 Simulação dos processos em fluxos cruzados em um secador de arroz

Conforme mostrado em Rumsey et al., 2001, foi desenvolvido um modelo dinâmico de secagem de arroz por fluxo cruzado com o objetivo de analisar a evolução do perfil de umidade do arroz durante a secagem, usando um modelo matemático bidimensional. O esquema de um secador de fluxo cruzado é mostrado na figura 1.5.

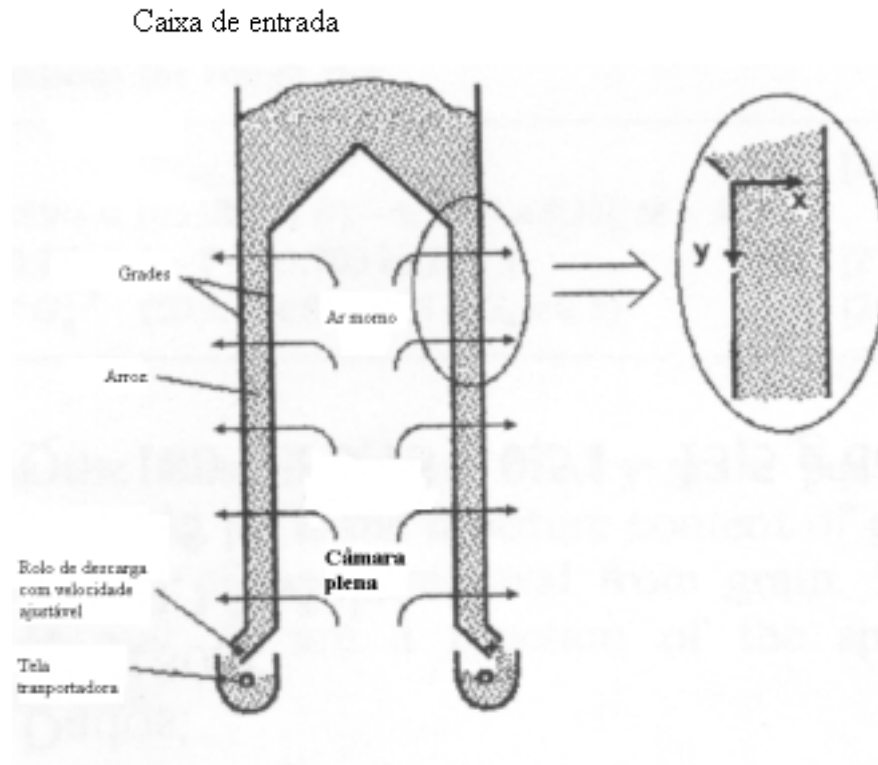


Figura 1.5 – Secador de arroz em fluxo cruzado

O modelo matemático é formado pelas seguintes equações:

Balanço de massa de água no grão:

$$-G_p \frac{\partial M}{\partial y} - R\rho(1-\varepsilon) = \rho(1-\varepsilon) \frac{\partial M}{\partial t} \quad (1.1)$$

onde G_p é o fluxo de massa de grão seco por unidade de área transversal, M é o volume de umidade do grão, ε é a porosidade do leito e R é a taxa de água removida do grão. Ambas as variáveis, M e R são função do espaço e do tempo.

Balanço de massa de água no ar:

$$-G_a \frac{\partial w}{\partial x} - R\rho(1-\varepsilon) = \rho_a \varepsilon \frac{\partial w}{\partial t} \quad (1.2)$$

onde G_a é a taxa de fluxo de massa de ar seco por unidade de área transversal e w é a umidade absoluta do ar, que é uma função do espaço e do tempo.

Balanço de energia no grão:

$$-G_p(C_{ps} + MC_{pw})\frac{\partial\theta}{\partial y} - R\rho(1-\varepsilon)(H_w - h_w) + ha(T - \theta) = \rho(1-\varepsilon)(C_{ps} + MC_{pw})\frac{\partial\theta}{\partial t} \quad (1.3)$$

onde h é o coeficiente de transferência convectivo de calor, a é a área superficial do grão por unidade de volume secado, e T e θ são as temperaturas do ar e do grão, respectivamente.

Balanço de energia no ar:

$$-G_a(C_{pa} + MC_{pv})\frac{\partial T}{\partial x} - ha(T - \theta) = \rho_a \varepsilon (C_{pa} + MC_{pv})\frac{\partial T}{\partial t} \quad (1.4)$$

O modelo matemático formado pelas equações de (1.1) a (1.4) estão sujeitas as seguintes condições iniciais e de contorno:

Condições iniciais: $W(x, y, 0) = w_0(x, y)$, $T(x, y, 0) = T_0(x, y)$,

$M(x, y, 0) = M_0(x, y)$, $\theta(x, y, 0) = \theta_0(x, y)$, para $x = 0 \dots x_s$ e $y = 0 \dots y_s$.

Condições de contorno: $W(0, y, t) = w_{in}(t)$, $T(0, y, t) = T_{in}(t)$,

$M(x, 0, t) = M_{in}(t)$, $\theta(x, 0, t) = \theta_{in}(t)$, para $x = 0 \dots x_s$ e $y = 0 \dots y_s$.

As equações de (1.1) a (1.4), junto com as condições iniciais e de contorno foram resolvidas na forma adimensional. O modelo matemático foi resolvido usando a técnica de diferenças finitas chamada método de MacCormack. Os resultados obtidos pelo modelo dinâmico mostraram-se em acordo satisfatório com os dados experimentais.

1.3.2.3 Modelo matemático do fluxo cruzado contínuo em secador comercial

Em Qi et al., 1996, um modelo matemático genérico para secadores de fluxo cruzado com difusão controlada foi desenvolvido e aplicado ao processo de secagem comercial (figura 1.6). A validade e a precisão do modelo é demonstrada por comparação dos resultados gerados pelo modelo com dados experimentais obtidos do secador.

Neste secador de fluxo cruzado típico, o gás secante é introduzido por perfurações no fundo de uma câmara horizontal que purifica os sólidos molhados que estão atravessando o secador. O gás varre os sólidos, retirando a umidade e sai no topo do leito de sólidos. Geralmente, o gás, no topo, já não interage intimamente com os sólidos do leito abaixo, e portanto, é considerado exausto. A umidade (pode ser também um solvente) é retirada do gás

secante e num esfriador condensa-se, e o gás, regenera-se para outra passagem no leito de sólidos.

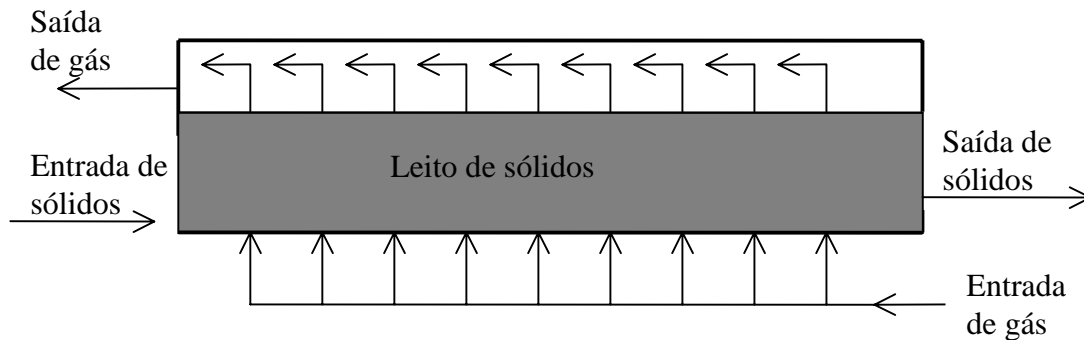


Figura 1.6 – Configuração geral de um secador em fluxo cruzado

Assumindo que o secador pode ser visto como um conjunto de estágios (e que os sólidos de um estágio não se misturam com os de outros estágios) conectados em série, e que um estágio está representando uma zona de secagem distinta correspondendo ao gás de entrada na mesma, conforme a figura 1.7.

A concentração de umidade no gás em cada estágio não é uniforme, isto é, na entrada sua concentração é C_0 , e na saída é C_i . Esta variação da concentração do gás torna a modelagem complexa, e por isso é assumida a concentração média dada por $(C_0 + C_i)/2$.

As equações do modelo são:

$$W_i = W_{i-1} \frac{J_i [1 - f(F' + F_i)]}{2 + J_i [1 - f(F' + F_i)]} + 2 \frac{C_i [1 - f(F' + F_i)] + f(F' + F_i)}{2 + J_i [1 - f(F' - F_i)]} \quad (1.5)$$

$$\frac{2W_{i-1} - 2C_i + J_i(W_i - W_{i-1})}{2 - 2C_i + J_i(W_i - W_{i-1})} = f(F') \quad (1.6)$$

onde

$$C_i = \frac{K_i C_0 - K_N C_0}{W_0 - K_N C_0} \quad (1.7)$$

é a concentração do gás transportado do estágio i [g de solvente/ m^3 de gás], K_i é o coeficiente de partição para o estágio i , definido como o razão da concentração no sólido no gás, [g/m^3 de sólido/ g/m^3 de gás], W_0 e W_i são concentrações médias de solvente nos sólidos, [g/m^3], J_i é o

fator de leitura definido como $J_i = \frac{GK}{Q_i \rho_i}$, F_i é o número de Fourier e F' é o número de Fourier imaginário, G é a taxa de processamento de sólidos [kg/h] e Q_i é a taxa volumétrica de gás no estágio i [m^3/h].

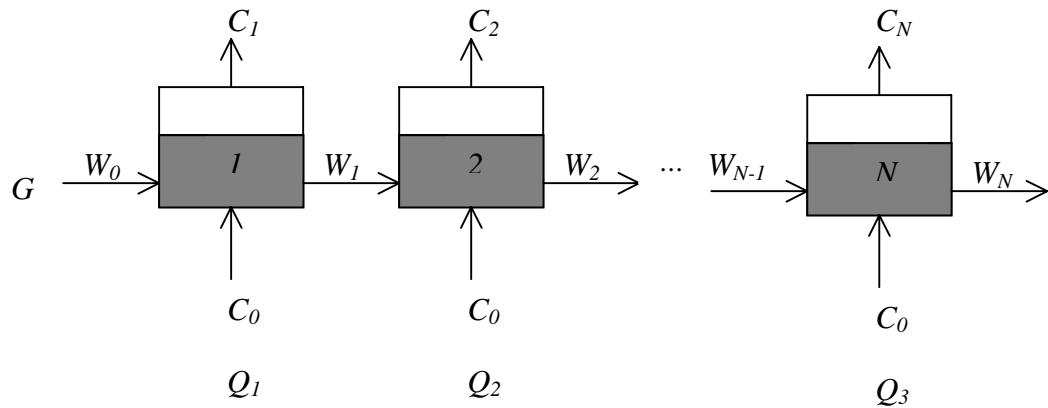


Figura 1.7 – Representação de um secador de fluxo cruzado por uma série de estágios

O modelo acima é baseado na difusão em uma simples partícula e assume que todas as partículas têm o mesmo comportamento. Ele também assume que a área superficial avaliada para a transferência de massa é a superfície total do sólido. Este modelo trata do relacionamento quantitativo entre a umidade nos sólidos e as variáveis envolvidas no processo as quais são agrupadas em três parâmetros adimensionais: F (número de Fourier), J (representa o balanço entre a taxa de processamento de sólidos – carregamento de sólidos e a taxa de consumo de gás em cada estágio) e N (número de estágios). Também requer um valor preciso do fator de eficiência de contato gás-sólido ou difusividade efetiva, a qual pode ser determinada experimentalmente em laboratório ou ajustando dados de outros secadores atuais. O modelo leva em conta a difusividade efetiva no número de Fourier. O fator de eficiência, ϕ_i é definido para o

estágio i , como $\phi = \frac{F_{i,ef}}{F_i}$, e em sentido global, como $\phi = \frac{F_{0,ef}}{F_0} = \frac{\sum_{i=1}^N \phi_i F_i}{\sum_{i=1}^N F_i}$, onde F_i é o número de

Fourier no estágio i , $F_{i,ef}$ é o número de Fourier efetivo no estágio i .

O modelo foi testado em escala industrial num secador de fluxo cruzado Torusdisc para secar resinas. Neste caso, o aglomeramento de partículas foi o problema mais significante.

1.3.2.4 Modelagem dos processos em pilha térmica de óxido sólido

Em Bistolfi et al., 1996, diferentes aproximações para modelar uma pilha térmica de óxido sólido (SOFC) são apresentadas. Diferentes tecnologias de pilhas térmicas usando diferentes meios eletrólitos foram propostos: pilha térmica de ácido fosfórico (PAFC), pilha térmica de carbonato fundido (MCFC), pilha térmica de óxido sólido (SOFC). Cada uma delas foi pesquisada em níveis diferentes de desenvolvimento e performance.

Entre outros modelos propostos, o primeiro modelo desenvolvido de SOFC foi um modelo bidimensional em estado estacionário de uma pilha plana simples. A geometria e arranjos dos fluxos utilizados para uma pilha plana SOFC estão mostrados na figura 1.8.

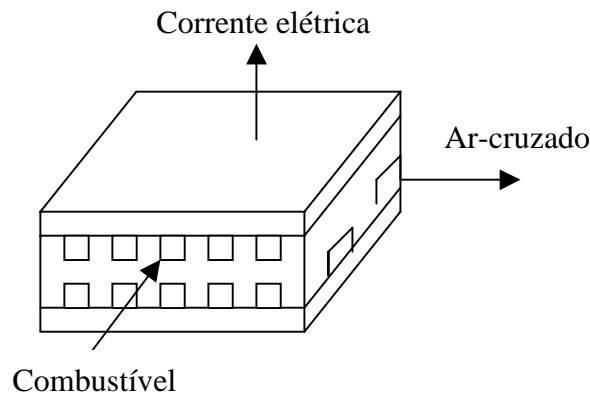


Figura 1.8 – Descrição esquemática de uma pilha plana SOFC para fluxo cruzado

A pilha tem duas camadas sólidas (dois eletrodos) separadas por um meio eletrolítico que é considerado como PEN (positivo-meio eletrolítico-negativo) com características térmicas e elétricas médias.

Os resultados principais, o perfil de temperatura e corrente nas pilhas (figura 1.9), concernem aos efeitos da configuração dos fluxos e o combustível (H_2 ou CH_4) sobre a performance, particularmente relativo às espécies.

Do ponto de vista matemático, o modelo consiste de um conjunto de equações diferenciais parciais e ordinárias (os fluxos concorrente e contracorrente são unidimensionais enquanto que o fluxo cruzado é bidimensional) para o balanço de massa e energia, e uma equação íntegro-diferencial para o balanço elétrico (derivando da combinação das leis de Nernst e Kirchoff). As reações químicas e, portanto, a geração de calor é suposto que aconteça no interior do PEN. As equações foram discretizadas e resolvidas usando bibliotecas comerciais de rotinas matemáticas.

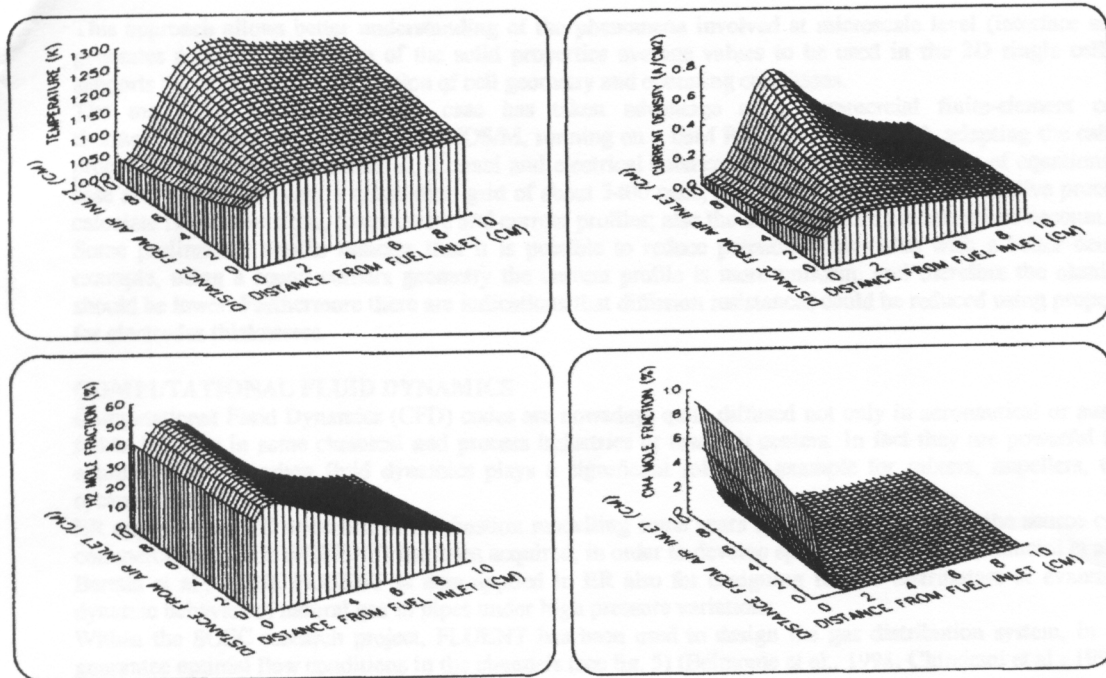


Figura 1.9 – Perfil de temperatura, corrente elétrica, espécies H_2 e CH_4 em fluxo cruzado

1.3.3 Fluxos contracorrentes

1.3.3.1 Características gerais dos fluxos contracorrentes

Os fluxos contracorrentes encontram-se principalmente em trocadores de calor, combustão de carvão, destilação (catalítica), processos de extração e absorção. A figura 1.10 mostra o esquema dos fluxos contracorrentes em uma coluna de absorção gás-líquido.

O gás se mistura ao líquido na parte inferior da coluna e escoam para o topo. Parte desta mistura é absorvida pelo líquido que escoam em fluxo contracorrente em relação ao gás, de cima (do topo) para baixo da coluna. Desta forma, as impurezas do gás são absorvidas pelo líquido. O modelo matemático desses fluxos é descrito através de equações diferenciais parciais baseadas nos balanços de massa e energia.

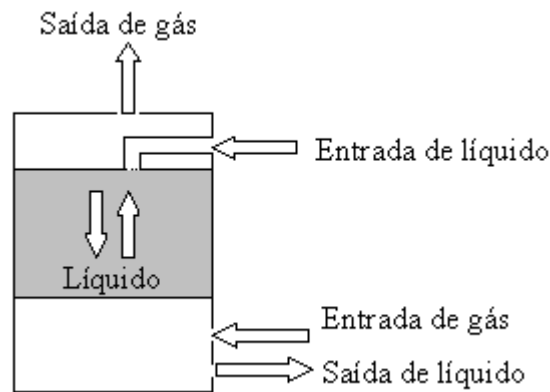


Figura 1.10 – Esquema dos fluxos contracorrentes em uma coluna absorção gás-líquido

1.3.3.2 Simulação de uma coluna de absorção utilizando o Método de Volumes Finitos

Em Silva et al., 1997, é desenvolvido um modelo matemático para uma coluna de absorção (figura 1.11) envolvendo os escoamentos contracorrentes de ar e de água, com o objetivo de determinar o coeficiente de transferência de massa.

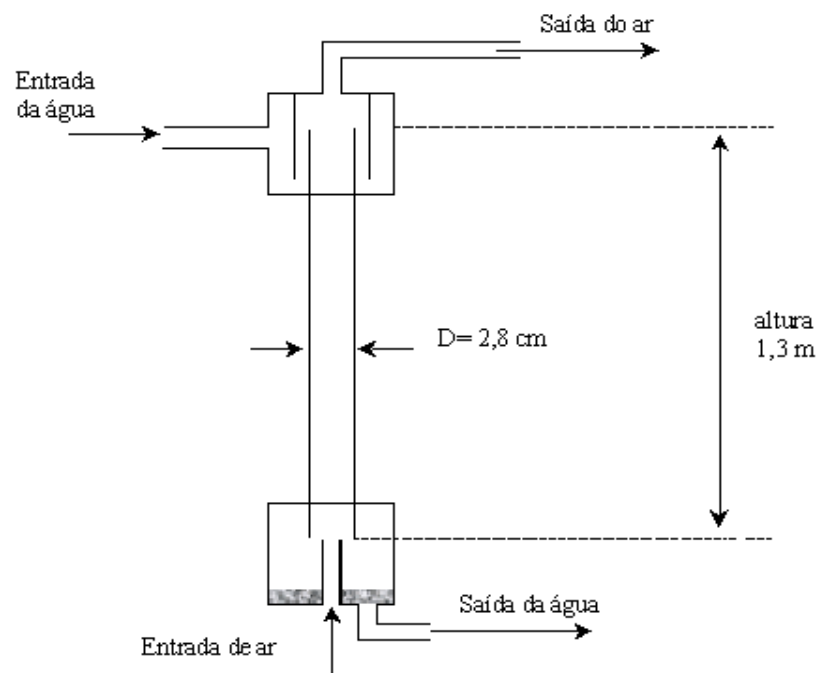


Figura 1.11 – Esquema dos fluxos contracorrentes em instalação experimental.

Para resolver o problema é utilizado o método dos Volumes Finitos, com arranjo de variáveis co-localizadas. Com o objetivo de apoiar o modelo matemático foi montada uma instalação experimental, conforme figura 1.12. No experimento a água escoar por gravidade, em

forma de filme pela parte interna de um tubo, e o ar sobe em direção contrária pelo núcleo da coluna.

Experimentalmente foi avaliada a influência da vazão de ar (vazão de água constante) sobre o fenômeno de transferência de massa. Também foram obtidos os perfis de velocidade e concentração da água na fase gasosa.

As condições de contorno (figura 1.12a), prescritas na entrada da coluna são: a componente do vetor velocidade u é igual à velocidade média do ar, medida experimentalmente na entrada da coluna. A componente do vetor velocidade horizontal é considerada nula, e além disso, devido à simetria, o domínio do problema físico é determinado na metade da coluna.

Na fronteira Sul (figura 1.12b) foi estabelecida a condição de simetria (derivada nula); na fronteira Norte a componente do vetor velocidade u é prescrita e igual a velocidade experimental da água $u_A = 720 \text{ cm}^3/\text{min}$. A fração mássica w_A na interface gás-líquido foi aceita como constante, e igual ao seu valor saturado. Na saída da coluna (Leste) foi imposta a condição de contorno: $\frac{\partial w_A}{\partial x} = 0$.

As equações principais estão escritas no sistema de coordenadas cartesianas, levando em consideração o fluido newtoniano, escoamento laminar, incompressível e bidimensional, e se apresentam da seguinte forma:

- equação da conservação de massa do ar

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0 \quad (1.8)$$

- equação da conservação do momento linear do ar na direção x

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u u) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial y}\right) \quad (1.9)$$

- equação da conservação do momento linear do ar na direção y

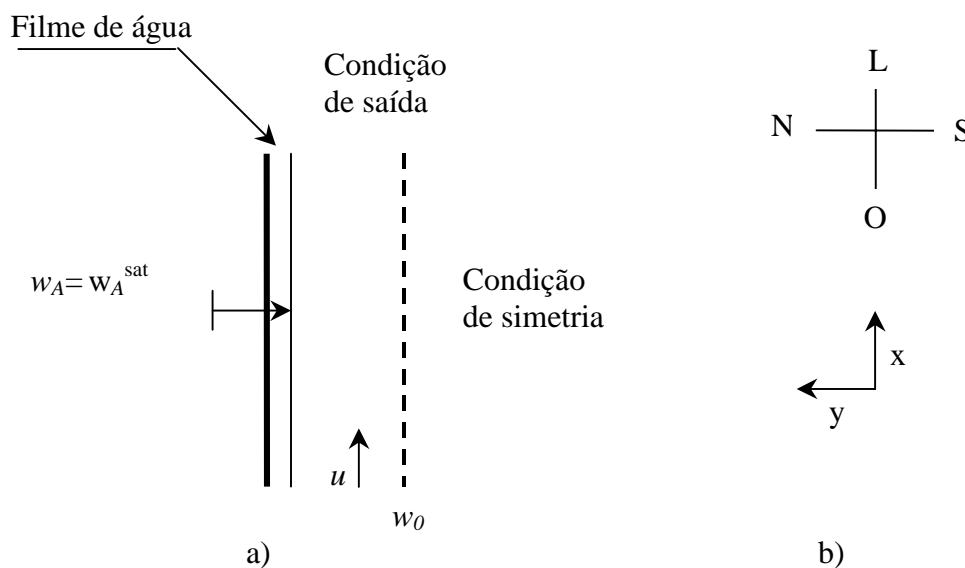
$$\frac{\partial P}{\partial y} = \rho g_y \quad (1.10)$$

- equação da alteração da concentração de água no ar

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho w_A) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u w_A) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{AB} \frac{\partial w_A}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{AB} \frac{\partial w_A}{\partial y} \right) \quad (1.11)$$

onde t é o tempo, ρ é a massa específica do fluido, x e y são as coordenadas do sistema cartesiano, u é o componente do vetor velocidade do ar na direção x , P é a pressão, g_x e g_y são os componentes da força mássica, μ é a viscosidade dinâmica do fluido e w_A é a fração molar da água.

Na resolução do sistema de equações (1.8), (1.9), (1.10) e (1.11), foi utilizado o método MSI (“Modified Strongly Implicit”) modificado, proposto por Schneider et al., 1981, juntamente com a metodologia proposta por Marchi et al., 1989.



w_A^{en} = fração mássica da água em ar na entrada
 u = velocidade do ar

Figura 1.12 – Condições de contorno para uma coluna de absorção em fluxos contracorrentes:
 a) situação física; b) sistema de coordenadas.

1.3.3.3 Estimação do estado distribuído de um trocador de calor de fluxo contracorrente

Em Estel et al., 2000, é desenvolvido um “observador” que é aplicado a um trocador de calor coaxial com fluxos contracorrente para estimar as temperaturas de dois fluidos e da parede

de separação, sob taxas de fluxos de líquidos variados, conforme mostra a figura 1.13. Ele é constituído de um trocador de calor tubular com dispositivos de controle e medida. Ao longo do trocador de calor são colocados termopares. Esses sensores estão conectados a um sistema permitindo a aquisição e exibição no monitor das temperaturas em tempo real.

O trocador de calor foi modelado para fluxo turbulento. As temperaturas são assumidas constantes ao longo do eixo radial para ambos os fluidos. Os fluidos são considerados incompressíveis. As camadas limites, térmica e hidrodinâmica, são consideradas desenvolvidas. As propriedades físico-químicas dos dois fluidos e da parede que os separam são constantes ao longo do tempo. O problema é convectivo ($Pe > 2 \cdot 10^4$). O calor trocado ao longo da parede é instantâneo ($Bi < 0,1$). Considerando estas simplificações e aplicando o balanço de energia no elemento diferencial, o modelo do trocador de calor é obtido como:

Fluido quente:

$$\frac{\partial T_h(x,t)}{\partial t} - \alpha_h Q_h \frac{\partial T_h(x,t)}{\partial x} = K_h (T_w - T_h) \quad (1.12)$$

Fluido frio:

$$\frac{\partial T_c(x,t)}{\partial t} - \alpha_c Q_c \frac{\partial T_c(x,t)}{\partial x} = K_c (T_w - T_c) \quad (1.13)$$

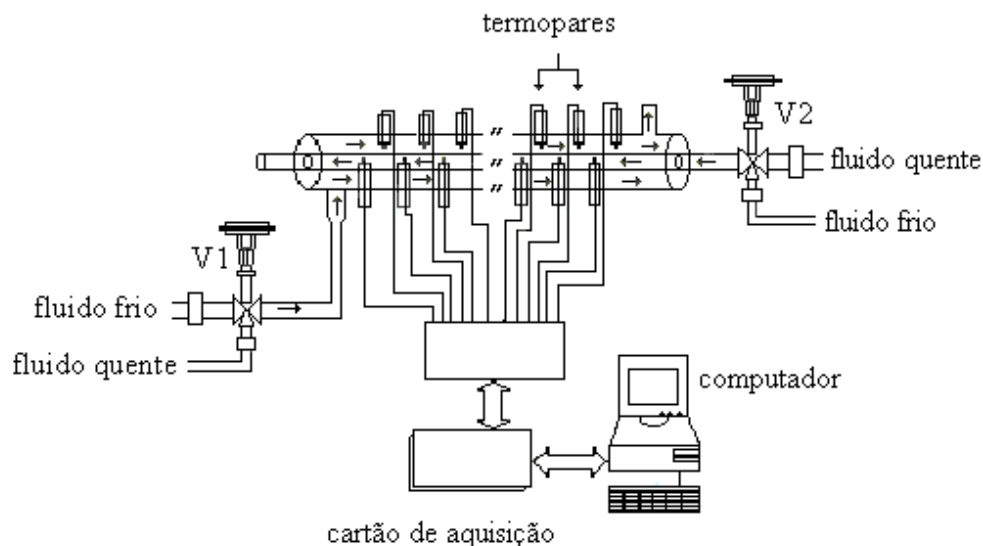


Figura 1.13 - Conjunto experimental de Estel et al., 2000

Parede de separação:

$$\frac{\partial T_w(x,t)}{\partial t} = K_{hw}(T_h(x,t) - T_w(x,t)) + K_{cw}(T_c(x,t) - T_w(x,t)) \quad (1.14)$$

onde,

$$\alpha_h = \frac{1}{\rho_h \pi r_i^2}, \quad \alpha_c = \frac{1}{\rho_c \pi (r_e^2 - (r_i + e_i)^2)}, \quad K_h = \frac{2h_h}{\rho_h C_{p_h} r_i}, \quad K_c = \frac{2h_c (r_i + e_i)}{\rho_c C_{p_h} (r_e^2 - (r_i + e_i)^2)}$$

$$K_{hw} = \frac{2h_h r_i}{\rho_w C_{p_w} ((r_i + e_i)^2 - r_i^2)}, \quad K_{cw} = \frac{2h_c (r_i + e_i)}{\rho_{wc} C_{p_w} ((r_i + e_i)^2 - r_i^2)}$$

onde, T é a temperatura [$^{\circ}C$], h é o coeficiente de transferência de calor [$Wm^{-2}K^{-1}$], e é a espessura [m], D é o diâmetro [m], r é o raio [m], C_p é o calor específico [$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$], x é a posição axial [m] e ρ é a densidade [kgm^{-3}]. Os subíndices i , w , c e h indicam, respectivamente, interno, parede, frio e quente.

As equações de (1.12), (1.13) e (1.14) estão sujeitas às seguintes condições de contorno

$$T_c(x=l,t) = T_{c,in} \quad e \quad T_h(x=0,t) = T_{h,in} \quad (1.15)$$

com as seguintes condições iniciais:

$$T_c(x,t=0) = T_c^0(x) \quad e \quad T_h(x,t=0) = T_h^0(x) \quad (1.16)$$

O esquema numérico utilizado é o método de MacCormack com preditor,

$$\overline{X_{aj}^{n+1}} = X_{aj}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (X_{bj+1}^n - X_{bj}^n) + \Delta t X_{cj}^n \quad (1.17)$$

e corretor,

$$X_{aj}^{n+1} = 0,5 \left[X_{aj}^n + \overline{X_{aj}^{n+1}} - \frac{\Delta t}{\Delta x} (X_{bj}^{n+1} - X_{bj-1}^{n+1}) + \Delta t X_{cj}^{n+1} \right] \quad (1.18)$$

onde os índices j e n correspondem, respectivamente, às discretizações espacial e temporal.

A convergência do esquema é obtida da condição de Courant-Freidrich-Lewy (CFL), que é expressa como

$$\frac{\max(V_h, V_c) \cdot (\Delta t)_{CFL}}{\Delta x} \leq 1 \quad (1.19)$$

onde Δx é o passo de discretização [m], V_h e V_c são as velocidades médias do fluido [m/s], Δt é o período de tempo [s]. A vantagem desta técnica é que ela é mais fácil do que os métodos matriciais.

1.3.3.4 Modelagem em secadores de milho de fluxo misto

Em Lasseran et al., 1993, é apresentado o modelo matemático e o software de um secador de fluxo misto, que é uma torre retangular tendo um número de leitos de grãos alternados e uniformemente ventilados em fluxos co-correntes e contracorrentes. Uma seção de fluxos contracorrentes apresenta-se na figura 1.14. O movimento dos grãos no leito é considerado uniforme para baixo, após a descarga, na parte inferior.

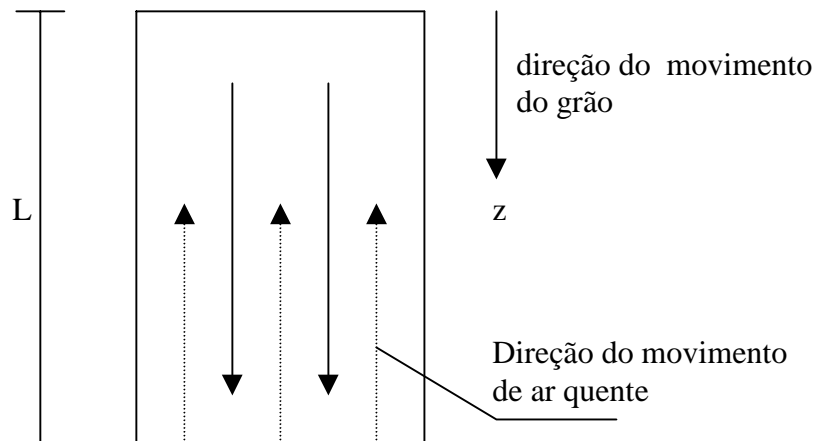


Figura 1.14 – Secadores de fluxos mistos

O submodelo matemático compõe-se pelas equações de secagem de grãos:

$$\frac{DX_1}{Dt} = \frac{B_1}{\rho_g \tau_1} (X_2 - X_1) \quad (1.20)$$

$$\frac{DX_2}{Dt} = \frac{B_1}{\rho_g \tau_2} (X_1 - X_2) + \frac{B_2}{\rho_g \tau_2} (X_3 - X_2) \quad (1.21)$$

$$\frac{DX_3}{Dt} = \frac{B_2}{\rho_g \tau_3} (X_2 - X_3) + \frac{\Phi_m a}{\rho_g \tau_3} \quad (1.22)$$

$$\frac{DT_g}{Dt} = \frac{\Phi_h a - \Phi_m a L_v}{\rho_g (c_{pg} + X c_{pw})} \quad (1.23)$$

onde Φ_h e Φ_m são fluxos de transferência de calor e massa. B_1 e B_2 são os coeficientes de troca de água entre os compartimentos $[kg \cdot s^{-1} \cdot m^{-3}]$ providos de dados experimentais, e são função exponencial da temperatura do grão de cereal, ρ é a massa específica $[kg \cdot m^{-3}]$, t é tempo $[s]$, L_v é o calor latente de vaporização da água $[J \cdot kg^{-1}]$, a é razão da área do grão por unidade de volume $[m^{-1}]$, c_p é o calor específico a pressão constante $[J \cdot kg^{-1} \cdot ^\circ C^{-1}]$, T é temperatura $[^\circ C]$, e X é o conteúdo de umidade médio e é obtido por $X = \tau_1 X_1 + \tau_2 X_2 + \tau_3 X_3$.

O submodelo matemático para o ar é descrito por um conjunto clássico de duas equações diferenciais parciais (EDP's):

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = -V_a \frac{\partial Y}{\partial z} + \frac{\Phi_m a (1 - \varepsilon)}{\rho_a \varepsilon} \quad (1.24)$$

$$\frac{\partial T_a}{\partial t} = -V_a \frac{\partial T_a}{\partial z} + \frac{a(1 - \varepsilon)}{\varepsilon} \frac{\Phi_m c_{pv} (T_g - T_a) + \Phi_h}{\rho_a (c_{pa} + Y c_{pv})} \quad (1.25)$$

onde Y é a umidade absoluta do ar, V_a é a velocidade do ar $[m \cdot s^{-1}]$, ε é a porosidade do leito e z é a coordenada espacial $[m]$.

O conjunto de equações (1.20) a (1.25) está sujeito as seguintes condições iniciais

$$X_1 = X_{1_0}, X_2 = X_{2_0}, X_3 = X_{3_0},$$

$$Y = Y_0, T_a = T_{a_0}, T_g = T_{g_0}$$

para $0 \leq z \leq L$, e de contorno:

- para o ar:

$$Y = Y(t, Z_C), T_a = T_a(t, Z_C) \text{ para } 0 < t < t_f$$

onde t_f é o tempo total de processamento e Z_C é o comprimento do secador.

- para o grão:

$$X_1 = X_1(t,0), X_2 = X_2(t,0), X_3 = X_3(t,0), T_g = T_g(t,0)$$

Considerando que o modelo é acoplado e não linear, a solução analítica não é possível. Então, torna-se necessário utilizar métodos numéricos. A técnica de diferenças finitas combinada com o método de Euler, é usado para resolver, parcial e completamente, o conjunto de equações (1.20) a (1.25).

1.3.4 Fluxos contracorrente cruzados

1.3.4.1 Aplicação e características dos fluxos contracorrente cruzados

Os fluxos contracorrente cruzados, CCC, são usados principalmente na indústria de alimentos (extração de óleo vegetal e secagem de grãos). A figura 1.15 mostra, de forma geral, um esquema dos fluxos contracorrentes cruzados.

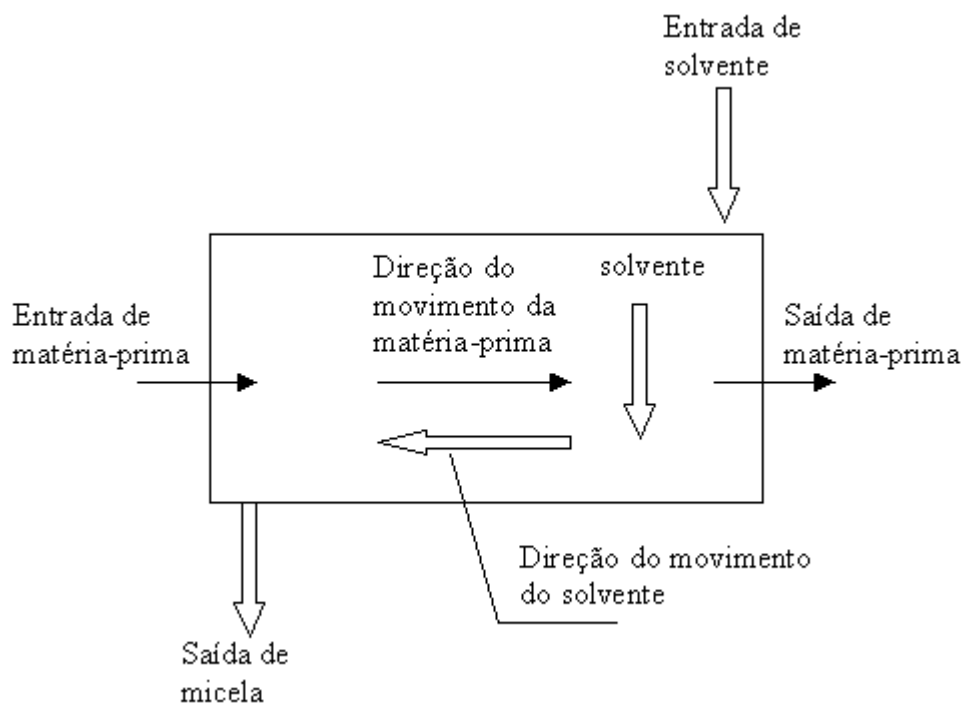


Figura 1.15 – Esquema dos fluxos contracorrente cruzados

Nestes fluxos, o solvente e a matéria-prima caminham de forma contracorrente e, também de forma cruzada. Na modelagem matemática é bastante usado o método dos estágios ideais que não considera as distribuições espaciais, não considera dados reais do equipamento, mas tem condições de contorno complicadas.

Como regra, um modelo de fluxos contracorrente cruzados necessita modelar não somente o campo de interação da lavagem, mas também as zonas de drenagem e carregamento, bem como considera os parâmetros reais de funcionamento do equipamento. No geral, um modelo destes fluxos tem condições de contorno específicas. Na apresentação deste tipo de fluxos, inicialmente, descrevemos o método dos estágios ideais [Lydersen, 1983], por ser este, o único método aplicado até o momento para simular os fluxos CCC

1.3.4.2 Método de estágios ideais

De uma forma geral, envolve-se alguns conceitos como: um extrato (E) - solvente; um refinado (R) - matéria-prima e, um terceiro componente - a espécie ou produto (X, Y) que tem que ser extraído do refinado. Os fluxos do extrato e do refinado passam pelos estágios. Em cada estágio ocorre alguma transferência da espécie entre fases. Se esta transferência no estágio for realizada de acordo com o equilíbrio entre fases tem-se o que é denominado estágio ideal ou teórico. Para conseguir uma grande transferência entre fases, ou seja, limpar o refinado R , é necessário aplicar o esquema multiestágios com fluxos contracorrentes (fases R e E). Observa-se que, por causa da simplicidade do método de estágios ideais, não se distinguem os fluxos contracorrente de fluxos contracorrente cruzados. Este método não prevê as distribuições espaciais de concentrações dentro de um estágio.

A figura 1.16 apresenta um esquema de um processo de extração com fluxos contracorrente, que representa os sistemas de extração líquido-sólido, constituído de i estágios ideais. Cada estágio teórico pode ser visualizado como um misturador onde o equilíbrio é obtido. Indicamos como R - refinado [kg/s], E - extrato [kg/s], X - fração mássica da espécie no refinado, Y - fração mássica da espécie no extrato. Aplicando estes conceitos na situação de extração, apresentada na figura 1.16, identificamos que: E_1 - vazão da micela na saída, Y_1 - fração mássica da espécie na micela, na saída, E_{i+1} - vazão de solvente na entrada, R_0 - vazão inicial de matéria-prima, X_0 - fração mássica inicial da espécie na matéria-prima, R_i - vazão da matéria-prima na saída do estágio i e X_i - resto da espécie na saída da matéria-prima.

Um balanço material ao redor do estágio “ i ” dá:

$$EY_{i+1} + RX_{i-1} = EY_i + RX_i \quad (1.26)$$

onde os índices i , $i+1$ e $i-1$ indicam as concentrações da espécie do componente extraído (X,Y) na saída dos estágios correspondentes, e os vazões de extrato e refinado foram tomados como constantes.

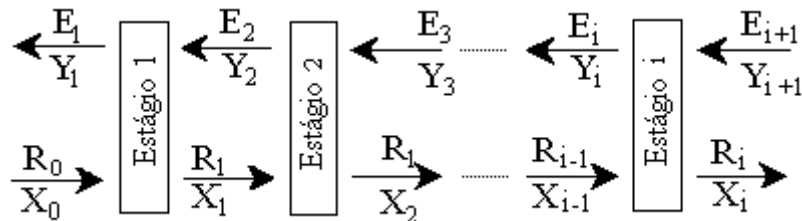


Figura 1.16 – Extração contínua por fluxos contracorrente de i estágios teóricos.

Em conformidade com o método de estágios ideais, as correntes com os mesmos índices estão em equilíbrio, de acordo com a equação $K=Y/X$ que é constante. Então, a concentração X na equação (1.26) pode ser substituída por Y/K (Lei de Henry). Além desta substituição introduz-se o fator de extração:

$$\varepsilon = \frac{R}{EK} \quad (1.27)$$

Reorganização a equação (1.26), temos:

$$Y_i = \frac{Y_{i+1} + \varepsilon Y_{i-1}}{1 + \varepsilon} \quad (1.28)$$

Ao aplicar a equação (1.28) sucessivamente para i estágios teóricos, chega-se à expressão final:

$$Y_i = \frac{\left(\sum_0^{i-1} \varepsilon^k \right) Y_{i+1} + \varepsilon^i Y_0}{\sum_0^i \varepsilon^k} \quad (1.29)$$

ou

$$Y_n = \frac{(\varepsilon^i - 1)Y_{i+1} + \varepsilon^i (\varepsilon - 1)Y_0}{\varepsilon^{i+1} - 1} \quad (1.30)$$

onde $Y_0 = KX_0$.

Normalmente, na entrada de um sistema multiestágios são conhecidos X_0 , Y_{i+1} , R , E , K e, conseqüentemente, Y_0 e ε . Então, usando a fórmula (1.30), determina-se Y_i , e conseqüentemente, X_i , pela fórmula $X_i = Y_i/K$. Depois, aplicando a fórmula (1.30) para $(i - 1)$ estágios, obtém-se:

$$Y_{i-1} = \frac{\varepsilon^{i-1}Y_i + \varepsilon^{i-1}(\varepsilon - 1)Y_0}{\varepsilon^i - 1} \quad (1.31)$$

Também existe outra fórmula para determinar as concentrações Y , mas desta vez, começando pelo outro lado do sistema de multiestágios:

$$Y_1 = \left(\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon^{i+1}} \right) Y_{i+1} + \left(\frac{\varepsilon^{i+1} - \varepsilon}{\varepsilon^{i+1} - 1} \right) Y_0 \quad (1.32)$$

1.3.4.3 Simulação de um processo cíclico de extração de café

Em Bewaji-Adedeji et al., 1996, foi desenvolvido um primeiro modelo, unidimensional, que pode ser considerado como um primeiro modelo de fluxos contracorrente cruzados (mas descontínuo).

Industrialmente, o café solúvel é extraído dos grãos torrados e moídos através da passagem de água quente de uma bateria de leitos sucessivos de café, cada vez mais ricos em café solúvel (figura 1.17a - o recipiente 1 está esgotado e o recipiente 6 é carregado com café fresco). O licor fresco deixa o leito como um xarope com uma alta concentração solúvel. Periodicamente, quando o primeiro leito é esvaziado, ele é removido da bateria, e um outro leito com café fresco, é adicionado no outro lado (figura 1.17b - o recipiente 6 entra na extração, e o recipiente 2 está na última extração). A operação é repetida para um ciclo regular, estabelecendo essencialmente um sistema de fluxo contracorrente.

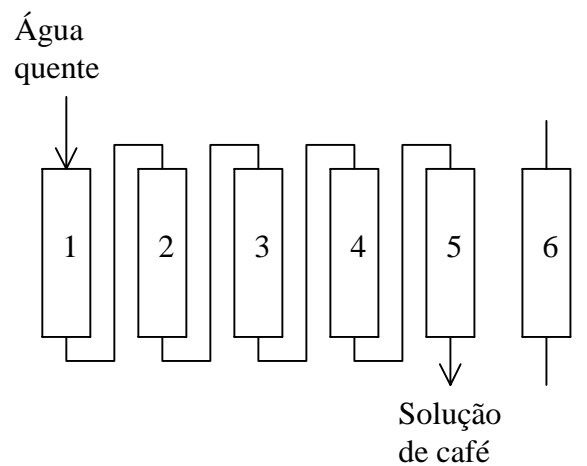
As concentrações no extrato e na fase sólida são dependentes do tempo e da posição. É assumido que não há dispersão radial e que o sistema é isotérmico. Também, considera-se que a extração é uma operação simples de transferência de massa.

A transferência de massa transiente do soluto de sólido para líquido é descrita pelo sistema de equações abaixo que são ligadas entre si por condições de contorno:

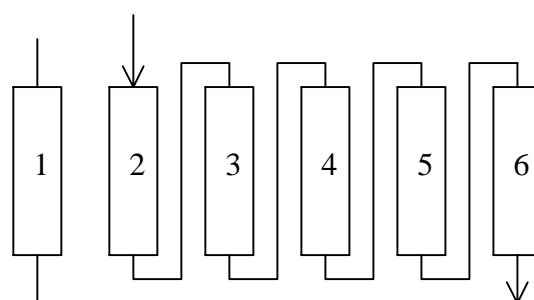
$$A\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} = k_{oc} aA(c^* - c) - \phi_E \frac{\partial c}{\partial x} \quad (1.33)$$

$$A(1-\varepsilon) \frac{\partial w}{\partial t} = -k_{oc} aA(c^* - c) \quad (1.34)$$

onde c^* - a concentração de equilíbrio do café na fase líquida [$kg \cdot m^3$], c - a concentração de café da fase líquida [$kg \cdot m^3$], w - a concentração de café da fase sólida [$kg \cdot m^3$], A - a área superficial do grão de café [m^2], ε - a porosidade, k_{Co} - o coeficiente de transferência de massa global da fase líquida [$m \cdot s^{-1}$], a - a área interfacial [m^{-1}], ϕ_E - a taxa de fluxo de fluido na entrada [$m^3 \cdot s^{-1}$], t - o tempo [s], x - a coordenada espacial na direção horizontal [m].



a) Antes da troca



b) Depois da troca

Figura 1.17 – Esquema operacional da extração de café

Neste modelo, a porosidade ε , é uma só, isto é, não é dividida em porosidade “bulk” e poro; também não considera a transferência de massa por difusão. Para resolver as equações

(1.33) e (1.34), as condições iniciais do leito devem ser conhecidas, junto com a concentração do extrato na entrada do leito e a relação de equilíbrio entre c^* e w .

A solução numérica é feita dividindo-se o leito em uma série de elementos discretos de espessura δx . No interior de um elemento, as condições são assumidas como uniformes.

No extrator completo, a água quente entra no leito 1 e sai saturada com extrato de café no leito 5 (figura 1.17a). Uma vez que o leito 1 está esgotado, ele é levado para o final da linha, e o leito 6, carregado, é introduzido no final da seqüência de leitos e a alimentação é trocada para o leito 2 (figura 1.17b). Enquanto isso, o leito 1 é limpadado e recarregado para uma posterior troca após o leito 6, no próximo carregamento e assim sucessivamente. A aproximação imita sistemas reais de extração em leitos provendo trocas de unidades múltiplas que permitem mover o alimento no sistema.

O código desenvolvido permite ao usuário selecionar o número de leitos do extrator e o número de estágios dentro de cada um. Este código é numericamente estável, e pode ser utilizado para uma simulação de um processo completo de extração de café adicionando um estágio de secagem.

1.3.5 Descrição sucinta de alguns métodos numéricos

Para encontrar a solução de um modelo matemático que descreva o comportamento de um problema físico em equações em derivadas parciais, utiliza-se em geral a técnica dos métodos numéricos. Neste item, apresentam-se três métodos numéricos: método de linhas [Kreiss et al., 1992; Lambert, 1993; Pfeiffer et al., 1996], um método híbrido [Alves et al., 2001] e método de Volumes Finitos [Patankar, 1980; Maliska, 1995; Versteeg e Malalasekera, 1995 e Ferziger e Peric, 1997.].

1.3.5.1 Método de linhas

Frequentemente, para encontrar a solução de uma equação diferencial parcial transforma-se em um sistema de equações diferenciais ordinárias através do método de linhas. O método de linhas discretiza o problema parcialmente, por isso às vezes é denominado de método de semi-discretização. Este método consiste em discretizar as variáveis espaciais e manter contínua uma variável temporal, o que equivale a substituir a malha retangular por uma seqüência de linhas paralelas ao eixo temporal.

É citado um exemplo de aplicação do método de linhas para o problema do aquecimento transiente de parede, conforme mostra a figura 1.18.

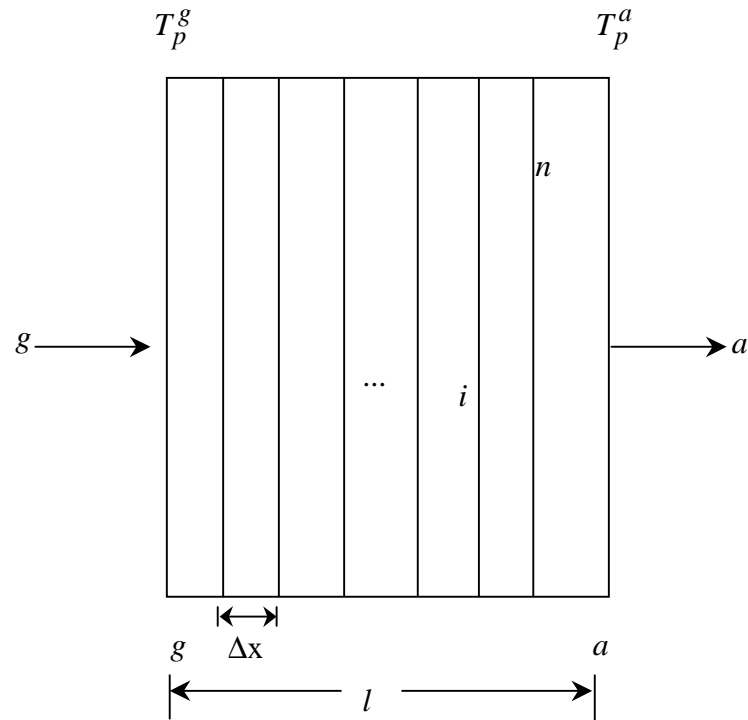


Figura 1.18 – Esquema de uma parede aquecida dividida por n camadas

A equação que descreve este processo é:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\lambda}{\rho c} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (1.35)$$

onde τ - tempo; x - coordenada na direção horizontal; T - temperatura; λ - condutividade; ρ - densidade; c - calor específico. Com condições de contorno:

$$h_g (T_g - T_p^g) = \lambda \frac{\partial T_p}{\partial x} \Big|_g \quad (1.36)$$

$$h_a (T_p^a - T_a) = \lambda \frac{\partial T_p}{\partial x} \Big|_a \quad (1.37)$$

onde: p - parede; g - gás; a - atmosfera.

Para aplicar o método de linhas, inicialmente, divide-se a parede por n camadas iguais com espessura Δx cada.

Admite-se que a temperatura é uniforme dentro de cada camada. Para i -ésima camada escreve-se a temperatura por T_i . Então, de acordo com a idéia do método de linhas a equação (1.35) transforma-se em um sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$\frac{dT_i}{d\tau} = \frac{\lambda}{\rho c} \left(\frac{T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1}}{\Delta x^2} \right) \quad (1.38)$$

Mas as equações são certas somente para camadas internas quando $i = 2, \dots, (n-1)$, e para camadas 1 ou n é necessário escreve-las considerando as condições de contorno (1.36) e (1.37). Para a camada 1, tem-se a seguinte fórmula:

$$\frac{dT_1}{d\tau} = \frac{h_g}{c\rho} T_g - T_1 - \frac{\lambda}{c\rho} \frac{(T_1 - T_2)}{\Delta x} \quad (1.39)$$

E para a camada n obtém-se a forma final:

$$\frac{dT_n}{d\tau} = \frac{\lambda}{c\rho} \frac{T_{n-1} - T_n}{\Delta x} - \frac{h_a}{c\rho} (T_n - T_a) \quad (1.40)$$

O sistema de equações resultantes pode ser resolvido por algum método conhecido para a resolução de EDO's, como por exemplo, Runge-Kutta.

1.3.5.2 Um método híbrido

Bem próximo do método de linhas está a Técnica Transformada Integral Generalizada – GITT [Alves, 2001], que é aplicada na solução das equações de transferência de calor e de mecânica de fluidos para duas ou mais dimensões. A idéia básica consiste, através de transformações analíticas, transformar um sistema de equações diferenciais parciais num sistema de equações diferenciais ordinárias. A aproximação é o truncamento de sistemas infinitos em uma ordem suficientemente grande e resolve-se isto através de procedimentos numéricos que obtêm a solução completa.

Uma ilustração deste método é um problema apresentado em Mikhailov & Ösizik, 1984. Foi necessário resolver a equação diferencial parcial que conduz o comportamento potencial de $T(x,t)$, que depende da variável espacial x e do tempo:

$$\varphi(t)w(x)\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \nabla K(x)\nabla T(x,t) + [\gamma(t)w(x) - d(x)]T(x,t) \quad (1.41)$$

onde $w(x)$, $K(x)$ e $d(x)$ são parâmetros que dependem da variável espacial, enquanto $\varphi(t)$ e $\gamma(t)$ são funções do tempo.

As condições, inicial e de contorno, são:

$$T(x,0) = f(x), \quad x \in V \quad (1.42)$$

$$\alpha(x)T(x,t) + \beta(x)K(x)\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = 0, \quad x \in S, t > 0. \quad (1.43)$$

onde $\alpha(x)$ e $\beta(x)$ são as funções prescritas e V é uma região finita em R^2 .

Apresentando a função incógnita $T(x,t)$ em forma da separação de variáveis, os autores obtêm:

$$T(x,t) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \psi(\mu_i, x) \Gamma_i(t) \quad (1.44)$$

onde:

$$\Gamma_i(t) = \exp \left[- \int_0^t \frac{1}{\varphi(t')} (\mu_i^2 - \gamma(t')) dt' \right] \quad (1.45)$$

Então, para $t = 0$ na equação (1.44), tem-se:

$$T(x,0) = f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \psi(\mu_i, x) \quad (1.46)$$

A fórmula (1.46) apresenta $f(x)$ em termos de autofunções ψ_j que são ortogonais entre si, com relação a $w(x)$ na região V , isto é,

$$\int_V w(x)\psi_i(\mu_i, x)\psi_j(\mu_j, x)dV = \begin{cases} 0 & \text{para } i \neq j; \\ N_i & \text{para } i = j. \end{cases} \quad (1.47)$$

onde a integral N_i é determinada por:

$$N_i = \int_V w(x)\psi_i^2(\mu_i, x)dV \quad (1.48)$$

Multiplicando ambos os lados da equação (1.46) pelos tempos de $\psi_j(\mu_j, x)$ e $w(x)$ e, integrando-a na região V , obtém-se:

$$\int_V w(x)\psi_j(\mu_j, x)f(x)dV = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \int_V w(x)\psi_i(\mu_i, x)\psi_j(\mu_j, x)dV = c_i N_i \quad (1.49)$$

devido à propriedade de ortogonalidade. Então, os coeficientes c_j são:

$$c_j = \frac{1}{N_j} \int_V w(x)\psi_j(\mu_j, x)f(x)dV = \frac{1}{N_j} \bar{f}_j \quad (1.50)$$

e o potencial $T(x, t)$ expressa-se pela fórmula:

$$T(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{N_i} \bar{f}_i \psi_i(\mu_i, x) \exp\left[-\int_0^t \frac{\mu_i^2 - \gamma(t')}{\varphi(t')} dt'\right] \quad (1.51)$$

completando a solução formal.

A fórmula (1.51) pode ser simplificada:

$$T(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} A_i(t)\psi_i(\mu_i, x) \quad (1.52)$$

onde $A_i(t)$ é dada por:

$$A_i(t) = \frac{1}{N_i} \bar{f}_i \exp\left[-\int_0^t \frac{\mu_i^2 - \gamma(t')}{\varphi(t')} dt'\right] = \frac{1}{N_i} \bar{T}_i(t) \quad (1.53)$$

Substituindo $T(x,t)$ de (1.53) na equação (1.41) e na condição (1.43), recebe-se a equação (1.41) que será apresentada na forma de uma soma dos dois tipos de termos: - dependentes exclusivamente da variável x ; - dependentes exclusivamente da variável t .

Os termos que dependem do t podem ser agrupados ao redor das funções incógnitas \bar{T}_i , gerando as equações diferenciais ordinárias relativamente à cada variável:

$$\frac{d\bar{T}_i(t)}{dt} + \frac{1}{\varphi(t)} (\mu_i^2 - \gamma(t)) \bar{T}_i(t) = 0, \quad \text{para } t > 0 \quad (1.54)$$

com condições iniciais:

$$\bar{T}_i(0) = \bar{f}_i, \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, i_f \quad (1.55)$$

onde i_f é o número de equações diferenciais de (1.53).

Na prática dos cálculos, o valor i limita-se em dependência do caráter do problema mas, como regra, o valor i é pequeno (por exemplo, $i = 2, \dots, i_f$ onde $i_f = 10$). Então, pode-se apresentar um método híbrido da resolução da equação (1.41) usando a técnica GITT pelas seguintes etapas:

1. Escolha da série das funções ortogonais $\psi_i(\mu, x)$ com $i = 1, \dots, i_f$.
2. Determinação dos valores μ_i , N_i e \bar{f}_i .
3. Resolução do conjunto das equações diferenciais ordinárias (1.54) por algum método numérico (por exemplo, método de Adams-Bashforth) e determinação das funções $\bar{T}_i(t)$ e $A_i(t)$.
4. Obtenção da resolução da equação (1.41) usando a fórmula (1.52).

1.3.5.3 Método dos Volumes Finitos

O nome “método dos Volumes Finitos” começou aparecer por volta de 1979, mas suas primeiras versões surgiram já nos anos 60. A estratégia básica do método é escrever a equação diferencial na forma conservativa, integrá-la no espaço e no tempo, em regiões pequenas, chamadas volumes finitos ou volumes de controle. A equação diferencial geral obtida do princípio de conservação, para uma variável dependente escalar ϕ , é:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \phi) = \nabla \cdot (\Gamma^\phi \nabla \phi) + S^\phi \quad (1.56)$$

onde ρ é a massa específica [$kg \cdot m^{-3}$], u é o vetor velocidade [$m \cdot s^{-1}$], Γ^ϕ é o coeficiente genérico de difusão e S^ϕ é o termo fonte.

Para transferência de massa, $\phi = C$ e $\Gamma^\phi = \rho D_{AB}$. Para problemas de transferência de calor, $\phi = T$ e $\Gamma^\phi = k/c_p$, onde C é a concentração, D_{AB} é o coeficiente de difusão de massa [m^2/s], c_p é o calor específico a pressão constante [$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$] e T é a temperatura [K].

Como exemplo de aplicação do método de volumes finitos, resolve-se a equação da difusão de calor em uma dimensão em regime transiente.

A equação que descreve este processo é:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho T) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + S \quad (1.57)$$

onde t – tempo [s]; x – coordenada na direção horizontal [m]; y – coordenada na direção vertical [m] e k – condutividade térmica [$W \cdot m^{-1} \cdot ^\circ C$].

A equação (1.57) está nesta forma, com c_p dentro dos parênteses da derivada, porque a propriedade transportada é a entalpia e não a temperatura. A malha empregada é mostrada na figura 1.19, onde nas outras direções, as dimensões são tomadas como unitárias, isto é, $\Delta y = 1$ e $\Delta z = 1$. É observado que a malha adotada possui volumes inteiros em todo o domínio.

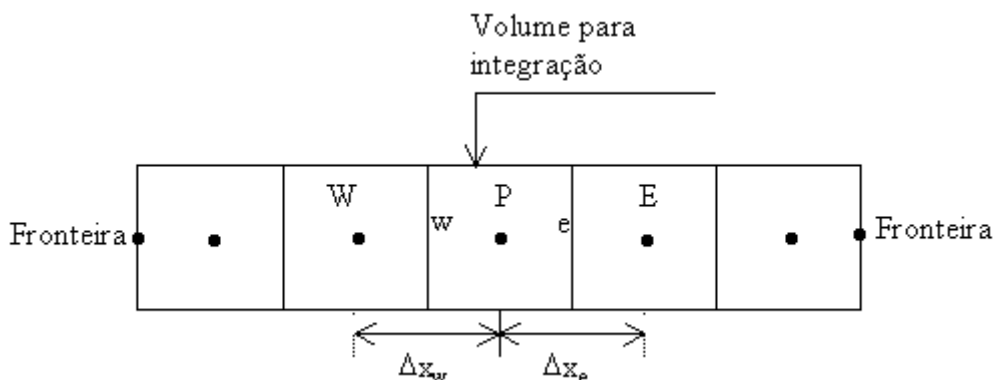


Figura 1.19 – Malha para o problema unidimensional de condução de calor

Integrando a equação (1.57), no volume de controle $\Delta x \Delta y \Delta z$ em relação ao tempo e ao espaço, e considerando ρ , c e k constantes, tem-se:

$$\rho \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial T}{\partial t} dx dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e S dx dt \quad (1.58)$$

resolvendo,

$$\rho(T-T^0)\Delta x = \left[\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_e - \frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_w \right] \Delta t + (S_p T_p^\theta + S_c) \Delta x \Delta t \quad (1.59)$$

onde o termo fonte foi linearizado, $S = S_p T_p^\theta + S_c$.

Escolhendo a função de interpolação espacial para a temperatura - diferenças centrais. Logo, a equação (1.59) fica:

$$(T-T^0) \frac{\rho \Delta x}{\Delta t} = \frac{k_e}{c_p} \frac{T_E^\theta - T_P^\theta}{\Delta x_e} - \frac{k_w}{c_p} \frac{T_P^\theta - T_W^\theta}{\Delta x_w} + S_p T_p^\theta \Delta x + S_c \Delta x \quad (1.60)$$

Reescrevendo a equação (1.60)

$$\frac{\rho \Delta x}{\Delta t} T = \frac{k_e}{c_p} \frac{T_E^\theta}{\Delta x_e} + \frac{k_w}{c_p} \frac{T_W^\theta}{\Delta x_w} + \left[-\frac{k_e}{c_p \Delta x_e} - \frac{k_w}{c_p \Delta x_w} \right] T_P^\theta + \frac{\rho \Delta x}{\Delta t} T_P^0 + S_p T_p^\theta \Delta x + S_c \Delta x \quad (1.61)$$

Escolhendo agora a função de interpolação temporal que fornecerá a variação da temperatura dentro do intervalo de tempo, $T^\theta = \theta T^1 + (1-\theta)T^0$, onde θ é a variável que permite escolher o esquema temporal, T^θ é o valor representativo da temperatura para todo o intervalo t , T^1 é o valor da temperatura obtido no mesmo passo de integração e T^0 é o valor da temperatura no passo de tempo anterior.

A equação (1.61) toma a forma:

$$\begin{aligned} a_p T_p = a_E [\theta T_E + (1-\theta)T_E^0] + a_w [\theta T_W + (1-\theta)T_W^0] \\ + [a_p^0 - (1-\theta)a_E - (1-\theta)a_w + S_p \Delta x] T_p^0 + b \end{aligned} \quad (1.62)$$

onde $a_E = \frac{k_e}{\Delta x_e}$, $a_w = \frac{k_w}{\Delta x_w}$, $a_p^0 = \frac{\rho c_p \Delta x}{\Delta t}$, $a_p = \theta a_E + \theta a_w + a_p^0 - S_p \Delta x$, $b = a_p^0 T_p^0 + S_c \Delta x$

Se $\theta = 0$ tem-se um esquema explícito; se $\theta = 1$, o esquema é totalmente implícito, e se $\theta = 0.5$, é implícito (Crank-Nicolson).

Cuidados gerais que precisam ser observados na discretização de uma equação diferencial pelo método de volumes finitos: 1 – conservação dos fluxos nas interfaces dos volumes de controle; 2 – a positividade dos coeficientes na equação (1.62) para que a solução obtida seja fisicamente coerente; 3 – a linearização do termo fonte deve ser feita com declividade negativa, $S_p < 0$ porque, com isso, a_p aumenta, conferindo à matriz dominância diagonal, o que aumenta a convergência do método.

A obtenção das equações aproximadas para problemas bi e tridimensionais segue exatamente o procedimento descrito para o problema unidimensional. Para uma situação bidimensional, a figura 1.20 mostra o volume elementar P com seus vizinhos, onde a dimensão na direção z é tomada como unitárias, isto é, $\Delta z = 1$.

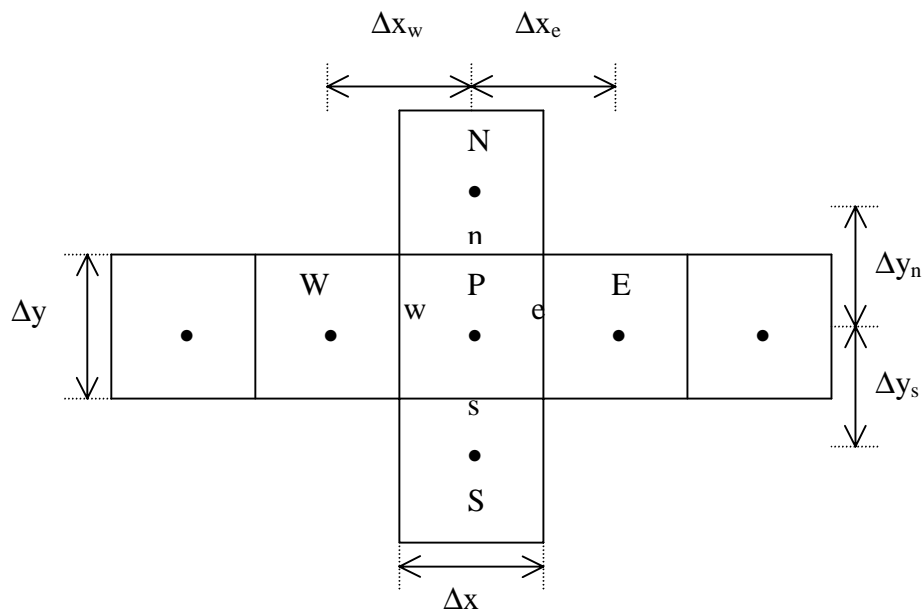


Figura 1.20 – Malha bidimensional para o problema de condução de calor

A equação para condução de calor em duas dimensões é:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho T) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{k}{c_p} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S \quad (1.63)$$

A integração desta equação no espaço e no tempo, aproximando as derivadas nas interfaces do volume elementar por diferenças centrais e usando uma formulação totalmente implícita, resulta em:

$$a_p T_p = a_E T_E + a_w T_w + a_N T_N + a_S T_S + b \quad (1.64)$$

onde os coeficientes são:

$$a_E = \frac{k_e \Delta y}{c_p \Delta x_e}, \quad a_w = \frac{k_w \Delta y}{c_p \Delta x_w}, \quad a_N = \frac{k_n \Delta x}{c_p \Delta y_n}, \quad a_S = \frac{k_s \Delta x}{c_p \Delta y_s}, \quad a_p^0 = \frac{\rho \Delta x \Delta y}{\Delta t},$$

$$b = S_C \Delta x \Delta y + a_p^0 T_p^0, \quad a_p = a_E + a_w + a_N + a_S + a_p^0 - S_p \Delta x \Delta y.$$

1.4 Aportes teóricos

Neste item, apresenta-se um embasamento teórico sobre a transferência de massa para uma melhor compreensão do conteúdo deste trabalho. Embora haja transferência de massa sempre que houver movimento global de um fluido, o que interessa para este trabalho é aquele que descreve o movimento relativo da espécie química numa mistura provocada pela presença de gradientes de concentração.

O objetivo deste item é o de ampliar a análise dos modos da transferência de massa e estabelecer os fundamentos de boa parte do material tratado no restante da tese.

Primeiramente, no item 1.4.1, consideram-se os tipos de extração e os fatores que influenciam na sua efetividade. No item 1.4.2, são conceituados os componentes envolvidos no processo. Os fenômenos de difusão, dispersão e transferência de massa em meios porosos são tratados no item 1.4.3. Os conceitos de porosidade (efetiva e de cavidade) e tortuosidade estão no item 1.4.4 e, no item 1.4.5, fazem-se considerações sobre a cinética de extração.

1.4.1 Tipos de extração e fatores que influenciam na sua efetividade

O termo extração por solvente é aplicado a todo processo de separação no qual um dos componentes de uma substância refinada (sólida ou líquida) é transferida a um extrato. Dentre os processos de extração baseados na solubilização, destacam-se:

Extração líquido-líquido

O processo conhecido como extração líquido-líquido (figura 1.21), ocorre quando o refinado envolvido é líquido e submetido a um processo de extração com extrato líquido [Rieger

et al., 1996; Toutain et al., 1998]. No início do processo de extração, o refinado (figura 1.21 a) contém o soluto ou a espécie (produto P) que é retirada do refinado quando este entra em contato com o solvente. No final do processo (figura 1.21 b), as partículas sem a espécie, apresentam o refinado esgotado e a micela (mistura do extrato com a espécie). Posteriormente, para a separação da espécie e do extrato são utilizados, nas operações industriais, a destilação ou evaporação. No entanto, o princípio de separação por destilação baseia-se na vaporização a partir de uma mistura de líquidos, de um ou vários componentes. O agente separador neste caso é o calor.

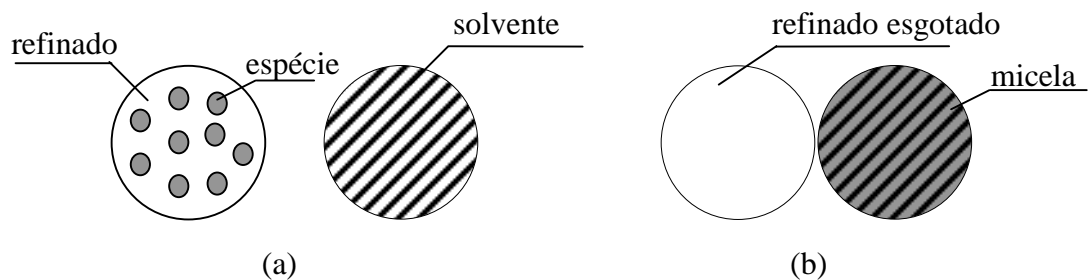


Figura 1.21 – Esquema de extração líquido-líquido

O processo de extração líquido-líquido é freqüentemente aplicado na separação dos componentes: inerte (R) e espécie (S) de uma solução [Vian et al., 1972] e, em particular, quando:

- os componentes (R e S) são relativamente pouco voláteis;
- os componentes (R e S) possuem as mesmas volatilidades;
- os componentes (R e S) são sensíveis à temperatura necessária para sua separação por destilação.

A extração líquido-líquido tem sido amplamente utilizada pelos setores da indústria farmacêutica [Simewsen et al, 1996] e petroquímica [Johanson et al, 1999] para:

- separação dos constituintes aromáticos e naftênicos, dos hidrocarbonetos parafínicos, contidos nas espécies lubrificantes;
- separação dos compostos não saturados, contidos nas espécies vegetais, como o azeite de soja;
- purificação de butadieno e a recuperação da penicilina, etc.

Extração sólido-líquido

Neste processo de extração, o refinado (R) envolvido é um sólido (mas como regra, poroso). O processo ocorre quando o refinado entra em contato com um extrato, e este extrato

solubiliza um ou mais componentes (S) do refinado. Os processos de extração, no sentido sólido-líquido, podem ser classificados em:

Lixiviação: é a operação na qual um ou mais componentes do refinado sólido é separado através da agitação com água ou com soluções alcalinas, ácidas ou salinas. Esta operação pode ser realizada em diversos recipientes como: tanques (figura 1.22), cubas, cilindros rotativos, colunas, entre outros. Este processo é utilizado em diversos ramos da indústria química tais como: no processo de caustificação para preparo do hidróxido de sódio, na extração de ouro com cianetos alcalinos, na separação da alumina da bauxita, etc.

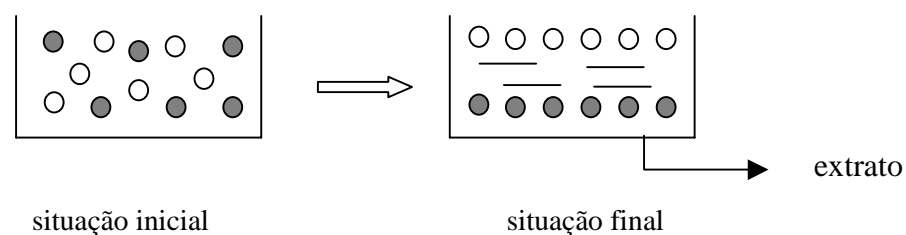


Figura 1.22 – Esquema de extração sólido-líquido por meio de lixiviação.

Extração por lavagem: o refinado sólido utilizado nesta operação é triturado para possibilitar o rompimento das paredes celulares, permitindo que a lavagem com extrato extraia a substância solúvel do refinado. Este processo pode ser realizado em tanques, onde o refinado é depositado, e com o auxílio de um agitador, é lavado diversas vezes com micela cada vez menos concentrada.

Extração por percolação: para esta operação, o refinado sólido se apresenta em forma de uma camada, onde ocorre a passagem do extrato através dela. Esta passagem do extrato é realizada com o objetivo de retirar um ou mais componentes solúveis do refinado. Na indústria de alimentos, este processo é utilizado para: extração de óleo de arroz, de óleo de girassol, de óleo de soja, etc.

O processo completo de extração envolve ainda a recuperação do solvente do extrato e do refinado, que são efetuadas por técnicas de evaporação ou destilação [di Givacchino, 1996; Lajara, 1990]. O pré-estabelecimento das dimensões de uma instalação industrial baseia-se no princípio da extração onde o tamanho, a capacidade e o rendimento do extrator podem ser determinados através das características do refinado, do extrato e pela forma como acontece o contato entre eles. Por exemplo:

- se a vazão de solvente for alta, menor será o teor da espécie residual no refinado, resultando num rendimento maior;
- se a velocidade de extração e de drenagem forem rápidas, menor será o tamanho do extrator, ou maior será sua capacidade;
- quanto menor a retenção de micela no refinado, menor o consumo de vapor de dessolventização, menor o tempo de residência do refinado, e conseqüentemente, menores os tamanhos do dessolventizador e do secador.

Em qualquer processo de extração, a taxa de extração pode ser influenciada por vários fatores como: temperatura, tamanho das partículas do refinado, a forma das partículas do refinado, a área específica de contato, permeabilidade e solubilidade.

1.4.2 Componentes envolvidos na extração

Vários conceitos foram necessários para que o trabalho fosse desenvolvido com bastante clareza. Destaca-se nesse item, os principais conceitos utilizados no processo em estudo, tais como: o refinado, o solvente, a espécie (soluto) e a micela.

1.4.2.1 Solventes em geral

O extrato inicial é um líquido cuja função é extrair a espécie contida no refinado. Estudos comprovam que se deve ter muitos cuidados na escolha do solvente, pois suas propriedades podem afetar a solubilidade do soluto, e assim sua eficácia e economia na extração [Miyasaka et al., 1981].

Alguns compostos orgânicos como os hidratos de carbono, gorduras e proteínas dos alimentos são solúveis nos solventes orgânicos, tais como o éter, álcool, benzeno, hexano, entre outros. Estes solventes, por apresentarem moléculas pouco polares, dissolvem facilmente as moléculas dos compostos orgânicos que também são pouco polares. Alguns dos solventes potenciais (tabela 1.1) são discutidos brevemente a seguir, com as suas vantagens e desvantagens como também algum critério distintivo e seus desempenhos [Bernardini, 1985].

Os dados da tabela 1.1 foram obtidos em um tempo de extração de 4h, temperatura de extração 45^oC e, 279 ml de extrato/100g de grão.

Vários fatores são importantes na determinação do tamanho do extrator, custos operacionais, tipo de equipamento e qualidade do produto final. Dentre eles destaca-se a solubilidade da espécie e as impurezas dos sólidos para um determinado solvente. A temperatura

de extração coloca limites para o ponto de ebulição do extrato e na solubilidade da espécie. Temperaturas maiores contribuem para uma extração mais rápida e completa. A viscosidade do extrato varia de acordo com a mudança de temperatura e a concentração da espécie (viscosidade baixa, aumenta a taxa de difusão da espécie). É importante, tanto para o consumo de energia, como para a qualidade da espécie, que o extrato tenha o mais baixo ponto de ebulição possível, e uma variação pequena de temperatura de ebulição, até o final da destilação. Portanto, os solventes mais usados são os hidrocarbonetos leves do petróleo.

Tabela 1.1 - Potencial de extração em condições de laboratório

	Quantidade de espécie (óleo) do grão (%)	Teor de espécie residual (%)			
		Hexano	Benzeno	CS ₂	C ₂ HCl ₃
Soja floculada	19,29	2,0	2,2	1,6	0,09
Torta de amendoim	12,60	2,8	2,5	2,1	1,6
Torta de semente de girassol	11,90	4,3	4,9	3,9	2,6
Torta de Canola	14,55	5,4	4,9	3,5	1,9
Grão de uva floculado	15,75	4,1	4,4	3,7	2,0

Fonte: Bernardini, 1995.

Hexano: O hexano é um hidrocarboneto alifático saturado de fórmula molecular C_6H_{14} com massa específica de $0,680 \text{ g/cm}^3$. É um líquido que tem a propriedade de extrair, dissolver e remover o óleo do refinado floculado. Possui uma estreita faixa para temperatura de ebulição (entre 61°C e 69°C). Ele é altamente inflamável e sua temperatura de auto-inflamação é de 240°C a 260°C . Apresenta algumas desvantagens, tais como: alta volatibilidade e custo elevado, considerando-se que há perdas durante o processo. Hoje, hexano é quase exclusivamente usado como solvente.

Etanol: Algumas pesquisas [Chien et al., 1990; Abraham et al., 1988] foram desenvolvidas visando a possibilidade de utilizar o etanol (C_2H_5OH) como solvente, visto que é encontrado em grandes quantidades, é mais barato que o hexano, e tem possibilidade de integrar dois tipos de agroindústrias: a dos óleos vegetais e a do álcool.

Dióxido de carbono: Outro solvente que vem sendo pesquisado para ser utilizado como alternativa nos processos de extração em escala industrial é o dióxido de carbono (CO_2), pois oferece vantagens operacionais. Uma delas é o fato de não necessitar de gastos com energia no processo final de separação. Um exemplo disso, é o trabalho desenvolvido por Lee, 1986, para extração do óleo de canola usando dióxido de carbono.

1.4.2.2 Matéria-prima

A matéria-prima é o material utilizado pela indústria para, a partir dele, produzir um produto que traga algum benefício ao homem. Ela vai originar o refinado, que contém os sólidos esgotados e a solução a eles aderida. A matéria-prima, a qual este trabalho se refere, é um meio poroso para facilitar a extração. Este meio compõe-se por: pequenas partículas com dois tipos de porosidade:

- *interna*, ε_p , que são os espaços vazios dentro das partículas da matéria-prima, identificados neste trabalho como fase poro;
- *externa*, ε_b , que são os espaços vazios entre as partículas, identificados aqui como fase “bulk”.

As características do material a ser processado pelo solvente podem ser quantificadas, e esta quantificação, é usada no projeto das instalações de extração, no controle das operações da preparação da matéria-prima. Tais características são: a densidade do refinado, a umidade e a percolabilidade (em relação ao ar), entre outras.

Entre essas características também destacam-se a área específica, a_p , de contato entre as fases poro e “bulk” em unidade de volume da matéria-prima (levando em conta a sua porosidade) e o diâmetro das partículas d_p .

1.4.2.3 Espécie, micela e suas características

A espécie é o óleo que está contido na matéria-prima, o qual, por algum processo, será separado do refinado. Por exemplo, a extração de óleo de sementes oleaginosas que contém óleo no interior das células intactas e em capilares fibrosos. O óleo contido na matéria-prima, como regra, aparece em duas formas: a) na forma de uma camada ao redor das partículas (ou tortas) trituradas e laminadas que é recuperada por um processo de simples dissolução; b) contido nas células intactas e é removido do interior destas, por difusão.

A micela é a mistura entre o óleo e o solvente. Para os processos da extração observa-se uma característica importante: o equilíbrio das concentrações de óleo das fases sólida e líquida. Quando se colocam solvente e matéria-prima misturados dentro de um recipiente, descobre-se que as concentrações mássicas g^N (fração mássica da espécie na fase sólida) e g (fração mássica da micela na fase “bulk”) vão alterar-se da seguinte forma: à medida que g aumenta, g^N diminui. Isto significa que o óleo, depois do enchimento dos poros pelo solvente, começa a transferir-se da fase sólida à líquida e, passando algum tempo, estabelece-se uma

relação independente do tempo entre as frações mássicas, ou seja, estabelece-se o equilíbrio caracterizado pela fórmula:

$$\frac{g_{eq}^N}{g_{eq}} = E_d \quad (1.65)$$

A grandeza E_d chama-se constante de equilíbrio e o seu valor depende do tipo de refinado, do extrato e da temperatura. Como regra, o valor E_d é uma constante em relação à concentração. Por exemplo, para o grão de soja e hexano, o valor de $E_d \approx 0,20$ [Bernardini, 1995] e não depende da concentração inicial do óleo no refinado e na micela.

O conteúdo do óleo na micela pode ser caracterizado pelas frações mássicas g_{es} (aplica-se preferivelmente nas empresas) ou pelas concentrações volumétricas C . Através das relações de g_{es} e g_{so} obtém-se para a massa específica média, ρ , da micela:

$$\frac{1}{\rho} = \frac{g_{es}}{\rho_{es}} + \frac{g_{so}}{\rho_{so}} \quad \text{ou} \quad \rho = \frac{1}{\frac{g_{es}}{\rho_{es}} + \frac{(1-g_{es})}{\rho_{so}}} \quad (1.66)$$

Escrevendo as equações (1.66) para C e C_{so} e fazendo algumas transformações, obtém-se:

$$C = \frac{g_{es}\rho}{\rho_{es}} \quad \text{e} \quad C_{so} = 1 - C \quad (1.67)$$

Se são conhecidos os valores C e C_{so} , podem-se determinar ρ , g_{es} e g_{so} .

1.4.3 Dispersão e difusão em líquidos

A difusão e dispersão são processos importantes na extração, pois influem essencialmente na sua eficiência. Por exemplo, o coeficiente de difusão D_{AB} possui um papel relevante na difusão do óleo dentro da fase poro, e no valor do coeficiente de transferência de massa entre as fases poro e “bulk”. O coeficiente de dispersão, E_S , determina a distribuição das concentrações da espécie na fase “bulk”, tendo em vista que, a micela escoia no refinado em regime turbulento. Por isso, neste item, apresentam-se alguns conceitos sobre estas propriedades.

1.4.3.1 Difusão

O mecanismo físico da difusão pode ser explicado pelo fato de que moléculas ou partículas pequenas misturam espontaneamente e passam de regiões de concentração relativamente alta a regiões de mais baixa concentração.

A equação fundamental da difusão molecular é conhecida como a primeira lei de Fick [Sissom et al., 1998] e é escrita para uma mistura binária, de A e B, como:

$$J_A = -\rho D_{AB} \frac{\partial \omega_A}{\partial x} \quad (1.68)$$

onde J_A é o fluxo de massa da espécie A [$kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$]; $\rho = \rho_A + \rho_B$ é a concentração mássica da mistura [kg/m^3]; D_{AB} é o coeficiente de difusão da espécie A em relação à espécie B [m^2/s]; $\omega_A = \rho_A / \rho$ é a fração mássica e ρ_A é a massa específica do componente A. Frequentemente, o processo de difusão ocorre em dois sentidos (figura 1.23).

No processo de extração existe uma difusão que é baseada na diferença de concentração entre duas regiões e ocorre dentro da fase “bulk”.

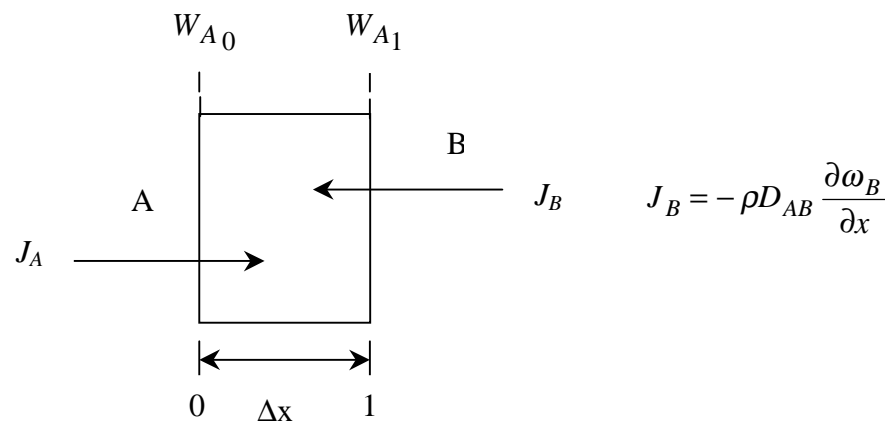


Figura 1.23 – Esquema de difusão mútua das substâncias A e B

Determinação de coeficientes de difusão em líquidos

Como a densidade molecular de um líquido é mais elevada do que a de um gás, as difusividades mássicas dos líquidos são menores do que as dos gases. Existem várias teorias [Sissom et al., 1998; Cussler, 1997] para calcular os coeficientes da difusão de gases, mas, pouco se conhece sobre a previsão das difusividades mássicas dos líquidos.

Por exemplo, para soluções diluídas, em Sissom et al., 1998, apresenta-se a equação semi-empírica:

$$D_{AB} = \frac{4,0 \cdot 10^{-7} T}{\mu(V_A^{1/3} - \phi_B)} \quad (1.69)$$

onde: T é a temperatura da solução [K]; D_{AB} é a difusividade mássica [m^2/s]; μ é a viscosidade dinâmica da solução (aproximadamente igual à do solvente em soluções diluídas) [$Pa \cdot s$]; V_A é o volume molecular da espécie A e ϕ_B é uma função de dissipação viscosa, seu valor é 2,0 para a água; 2,46 para o álcool etílico (etanol), C_2H_5OH , e 2,84 para o benzeno, C_6H_6 .

Esta equação fornece resultados aproximados para soluções diluídas de espécies que não se dissociam. A tabela 1.2 mostra alguns valores de difusão em líquidos.

Tabela 1.2 – Valores de coeficiente de difusão em diluição de líquidos orgânicos

Espécie	Solvente	D_{AB} ($\cdot 10^{-5}$ cm ² /s)
Tetracloroeto de Carbono	Álcool etílico	1,81
Dodecano	Hexano	2,73
Benzeno	Heptano	3,40
Metil-Etil-Cetona	Clorofórmio	2,13
Propano	Álcool butílico	1,57
Tolueno	Benzeno	1,85

Fonte: Cussler, 1997.

1.4.3.2 Dispersão

O fenômeno da dispersão é relacionado à difusão. A relação existe em dois aspectos:

- A dispersão é uma forma de misturar e, logo, em um nível microscópico, envolve a difusão de moléculas;
- A dispersão e a difusão são descritas com modelos matemáticos muito semelhantes e permitem aplicar, na descrição do fenômeno de dispersão, os modelos desenvolvidos para a difusão.

O conceito de “dispersão” somente se usa para modelagem em fluxos turbulentos. Como exemplo, consideramos a mescla rápida em plumagens de fumaça num fluxo [Cussler,1997]. Na maioria dos casos, este fluxo mistura-se com plumagens rapidamente por redemoinho ou vórtices turbulentos. A alteração de concentração de plumagens (C_A) descreve-se pela equação:

$$\frac{\partial C_A}{\partial \tau} = D \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right) - \frac{\partial C_A}{\partial x} V_x - \frac{\partial C_A}{\partial y} V_y - \frac{\partial C_A}{\partial z} V_z \quad (1.70)$$

onde V_x , V_y e V_z são componentes do vetor velocidade relativa e D é o coeficiente de difusão. O lado à esquerda desta equação reflete a alteração da concentração (C_A) num volume elementar pelo tempo. Os três primeiros termos, no lado direito, descrevem a alteração de concentração (C_A) por difusão no mesmo volume. Os próximos três são termos convectivos da alteração da concentração (C_A).

Em Cussler, 1997, define-se:

$$C_A = \bar{C}_A + C'_A \quad (1.71)$$

onde C'_A é a variação da concentração e \bar{C}_A é o valor médio:

$$\bar{C}_A = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} C_A d\tau \quad (1.72)$$

Note que o valor médio de C'_A pelo tempo é zero. Através de definições semelhantes, V_x é:

$$V_x = \bar{V}_x + V'_x \quad (1.73)$$

onde V'_x é a variação da velocidade, e \bar{V}_x é:

$$\bar{V}_x = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} V_x d\tau \quad (1.74)$$

Novamente, o valor médio das variações de velocidade é zero. Realizando algumas transformações feitas em Cussler, 1997, combinando os termos médios, adquire-se a equação na forma seguinte:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{C}_A}{\partial \tau} = D \left(\frac{\partial^2 \bar{C}_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}_A}{\partial z^2} \right) - \left(\frac{\partial}{\partial x} \bar{V}_x \bar{C}_A - \frac{\partial}{\partial y} \bar{V}_y \bar{C}_A - \frac{\partial}{\partial z} \bar{V}_z \bar{C}_A \right) \\ - \left(\frac{\partial}{\partial x} \overline{V'_x C'_A} - \frac{\partial}{\partial y} \overline{V'_y C'_A} - \frac{\partial}{\partial z} \overline{V'_z C'_A} \right) \end{aligned} \quad (1.75)$$

O último termo descreve a mescla causada pelo fluxo turbulento, ou seja, pela dispersão. É conhecido que o fluxo da substância A gerado pela difusão na direção x é:

$$\bar{J}_A = -D \frac{\partial \bar{C}_A}{\partial x} \quad (1.76)$$

e conseqüentemente,

$$-\frac{\partial}{\partial x} \bar{J}_A = D \frac{\partial^2 \bar{C}_A}{\partial x^2} \quad (1.77)$$

O fluxo $\overline{V'_x C'_A}$ gerado por causa da turbulência pode também considerar como “um resultado de uma difusão” se introduzir um coeficiente E_S que se chama coeficiente de dispersão [m^2/s]. Neste caso, pode-se escrever:

$$\overline{V'_x C'_A} = J_E = -E_S \frac{\partial \bar{C}_A}{\partial x} \quad (1.78)$$

Como regra, o valor de E_S é muito maior que o coeficiente de difusão. Se o fluxo é laminar o valor de $E_S = 0$. É importante lembrar que em extratores, a dispersão desempenha um papel principal.

Para determinar o coeficiente de E_S utilizam-se medidas experimentais que servem para fazer estimativas de dispersão em situações reais. Conforme mostrado em Cussler, 1997, o coeficiente de dispersão aumentará à medida que o fluxo se faz mais rápido. Em níveis adimensionais, o número de Peclet para dispersão turbulenta em meios uniformes é:

$$Pe \equiv \frac{d_p V}{E_S} \quad (1.79)$$

Freqüentemente, em fluxos através de meios porosos, o coeficiente de dispersão é apresentado como a soma das contribuições de difusão e fluxo turbulento [Langer et al., 1978]:

$$E_S = \beta_1 D + \beta_2 Vd_p \quad (1.80)$$

onde β_1 e β_2 são coeficientes experimentais constantes; os valores médios de $\beta_1 \sim 0,7$ e de $\beta_2 \sim 2,0$. A fórmula (1.80) pode ser reescrita em forma de números adimensionais dando:

$$\frac{E_S}{Vd_p} = \beta_1 \left(\frac{D}{Vd_p} \right) + \beta_2 \quad (1.81)$$

Nesta fórmula o grupo $\frac{Vd_p}{E_S}$ é o número de Peclet para dispersão. O conjunto $\frac{Vd_p}{D}$ é o número de Peclet mais comum para difusão.

Para grandes números de Reynolds nos meios porosos, o número de Peclet para dispersão está sobre a constante. Para fluxos lentos, a dispersão se torna fortemente afetada pelo número de Schmidt (isto é, por difusão). A influência do número de Reynolds é mostrada na figura 1.24 para gases e líquidos.

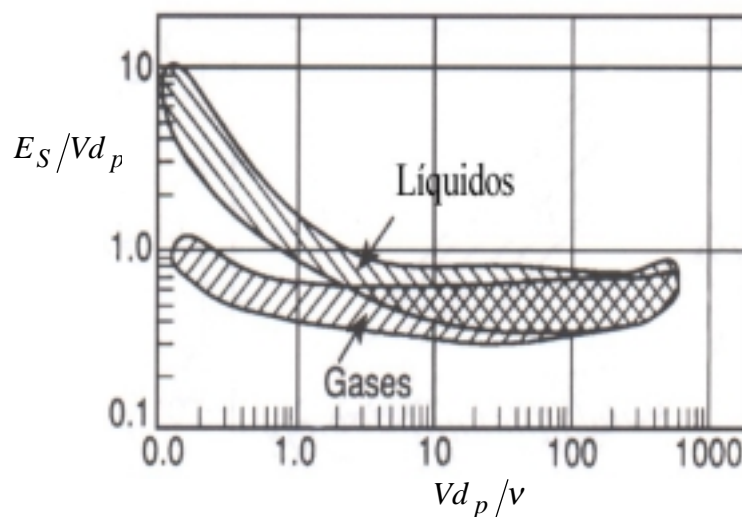


Figura 1.24 - Dispersão axial em meios porosos

1.4.3.3 Transferência de Massa

A definição de transferência de massa está baseada em argumentos empíricos como os usados no desenvolvimento da lei de Fick. A transferência de massa por convecção ocorre quando a massa é transportada entre o contorno de uma superfície e um fluido que se move, ou entre dois fluidos que se movem quando relativamente imiscíveis [Sissom et al., 1998]. O fluxo mássico $N_A [kg/s \cdot m^2]$ ocorre por causa das diferenças de concentrações e é determinado pela fórmula:

$$N_A = k_f (\rho_A - \rho_{A_\infty}) \quad (1.82)$$

onde k_f é o coeficiente de transferência de massa $[m/s]$.

Da equação (1.82) o fluxo mássico (N_A) é o resultado do produto do coeficiente de transferência de massa k_f pela diferença das densidades parciais: na superfície (ρ_A) e no seio do fluido (ρ_{A_∞}). O valor de k_f calcula-se por correlações experimentais que vinculam os números de Sherwood (Sh), Schmidt (Sc) e Reynolds (Re), etc., ou seja, o k_f é uma função da geometria do sistema, da velocidade do fluxo e propriedades do fluido.

Na prática, para o projeto de instalações e em pesquisas científicas (para determinar as relações de cálculos de transferência de massa) utilizam-se os seguintes números adimensionais:

$$\text{Número de Sherwood: } Sh = \frac{k_f d_p}{D_{AB}} \quad (1.83)$$

$$\text{Número de Schmidt: } Sc = \frac{\nu}{D_{AB}} = \frac{\mu}{\rho D_{AB}} \quad (1.84)$$

$$\text{Número de Lewis: } Le = \frac{\alpha}{D_{AB}} = \frac{k}{\rho c D_{AB}} \quad (1.85)$$

$$\text{Número de Reynolds: } Re = \frac{V d_p}{\nu} \quad (1.86)$$

$$\text{Número de Peclet (para transporte de massa): } Pe = Re Sc = \frac{V d_p}{D_{AB}} \quad (1.87)$$

onde, ν é a viscosidade cinemática [m^2/s]; μ é a viscosidade absoluta [$kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$] e α é a difusividade térmica [m^2/s].

Os números Sc e Le caracterizam difusão; os números de Re e Pe refletem fluxo, e o número de Sh , caracteriza o próprio coeficiente de transferência de massa.

A equação (1.82) envolve uma diferença de concentração. Por isso k_f possui dimensão diferente dos coeficientes de difusão e de dispersão mostrados na tabela 1.3, conforme Cussler, 1997.

O valor do coeficiente k_f é determinado experimentalmente e as fórmulas apresentadas abaixo foram estabelecidas nas instalações experimentais. Erros na determinação das correlações para interfaces líquido-líquido e líquido-sólido podem aparecer na ordem de 30%. De acordo com Fogler, 1987, muitos cientistas estabelecem dados para os fluxos laminar ou turbulento através de uma equação padronizada

$$Sh = c Re^m Sc^n \quad (1.88)$$

onde c é uma constante que depende da geometria; m e n são expoentes para ajustar dados experimentais pela fórmula (1.88).

Tabela 1.3 - Coeficientes de transferência de massa.

Efeito	Equação básica	Taxa	Força Motriz	Coeficiente
Transferência de massa	$N_A = k_f (C_A - C_{A_\infty})$	Fluxo por área relativo a uma interface entre duas fases	Diferença de concentração	k_f [L/t] é uma função do fluxo
Difusão	$-J_i = D_{AB} \nabla C_A$	Fluxo por área relativo à interface dentro de uma fase	Gradiente de concentração	D_{AB} [L^2/t] é uma propriedade física independente do fluxo
Dispersão	$-\bar{J}_E = E_S \nabla \bar{C}_A$	Fluxo por área relativo à interface dentro de uma fase	Gradiente de concentração média de tempo	E_S [L^2/t] depende do fluxo.

Fonte: Cussler, 1997

Por exemplo, dependendo da situação, Cussler, 1997, apresenta as fórmulas:

- para líquido em leito poroso fixo

$$Sh = 25 Re^{0,45} Sc^{0,5} \quad (1.89)$$

- para gás em leito poroso fixo

$$Sh = 1,2(1 - \varepsilon)^{0,36} Re^{0,64} Sc^{1/3} \quad (1.90)$$

onde ε é a porosidade.

- para fluxo laminar sobre a placa:

$$Sh = 0,646 (Re)^{1/2} (Sc)^{1/3} \quad (1.91)$$

- para fluxo turbulento sobre a placa:

$$Sh = 0,026 (Re)^{0,8} (Sc)^{1/3} \quad (1.92)$$

- para líquido em meios porosos:

$$St = 1,17 (Re)^{-0,42} (Sc)^{-2/3} \quad (1.93)$$

onde St = número de Stanton para transferência de massa; $St = \frac{k}{V}$. Os coeficientes (1.88) a (1.93) determinados acima são coeficientes locais e não médios.

1.4.4 Porosidade e tortuosidade

Os meios porosos possuem um conjunto de indicadores tais como a densidade, percolabilidade, porosidade, tortuosidade, etc. que influem nas características da extração. Por exemplo, a alta porosidade provoca a densidade baixa, resultando na diminuição de produtividade do extrator. Mas, a baixa porosidade contribui para a diminuição da percolação que também diminui a taxa de extração. Os indicadores mais relevantes para este estudo são a porosidade e a tortuosidade do refinado poroso. Algumas informações sobre esses dois fatores são descritos abaixo.

1.4.4.1 Porosidades efetiva e de cavidade

Porosidade ε_T , ou porosidade volumétrica total é uma característica do meio poroso macroscópico, definida como sendo a razão do volume dos espaços vazios (V_V) para o volume ocupado pela massa (V_m) somado ao volume de vazios (V_V):

$$\varepsilon_T = \frac{V_v}{V_m + V_v} \Rightarrow \varepsilon_T = \frac{V_v}{V_T} \quad \text{com} \quad V_T = V_m + V_v \quad (1.94)$$

Os poros em um meio poroso podem ser interligados entre si formando canais, ou podem apresentar-se em forma de cavidades (figura 1.25). Para algumas aplicações em meios porosos (por exemplo, na construção civil), a diferença entre a forma como eles aparecem não tem importância. Porém, do ponto de vista de fluxo em meio poroso, a forma como os poros aparecem é de grande importância e necessita da sua identificação e distinção.

Conseqüentemente, pode-se introduzir os conceitos de porosidade efetiva (externa, fase “bulk”) e porosidade de cavidade (interna, fase poro).

A porosidade externa (ε_b) é determinada como:

$$\varepsilon_b = \frac{V_{vb}}{V_T} \quad (1.95)$$

onde V_{vb} é o volume dos canais principais do meio poroso.

A porosidade interna (ε_p) é apresentada da seguinte forma:

$$\varepsilon_p = \frac{V_{vp}}{V_T - V_{vb}} \quad (1.96)$$

onde V_{vp} é o volume dos “becos sem saída”.

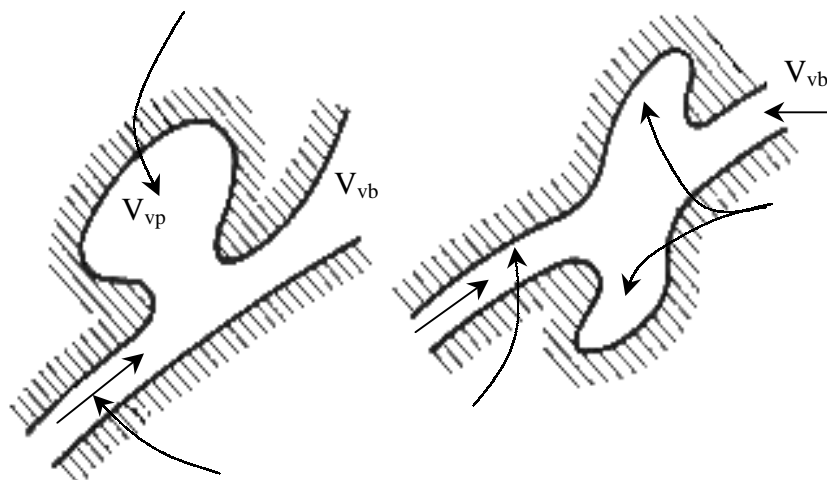


Figura 1.25 – Representação dos poros

Os poros internos, tendo uma contribuição insignificante para a passagem do líquido, são os “becos sem saída” ou bolsos estagnados [Coast et al.,1964]. Devido à geometria deles, o fluido em tais poros é praticamente estagnado. Em certos mecanismos de fluxo ou na relação entre descarga específica e velocidade média, é importante levar em consideração os efeitos destes poros. Em particular, a existência destes determina a intensidade da passagem da espécie do refinado para a micela. Na etapa de drenagem num extrator típico, também é necessário considerar o líquido que está na fase “bulk”. Este líquido vai escoar do meio poroso mais rápido mas, o líquido que permanece na fase poro, vai sair desta fase muito lentamente ou não a abandonará totalmente.

1.4.4.2 Tortuosidade do meio poroso

Além da porosidade e dos tamanhos das partículas, existe outro fator que determina a capacidade de um líquido atravessar o meio poroso. Este fator está ilustrado na figura 1.26, onde apresentam-se os dois tipos de meios porosos: o refinado que é preparado através da extrusão (a), e o refinado laminado (b).

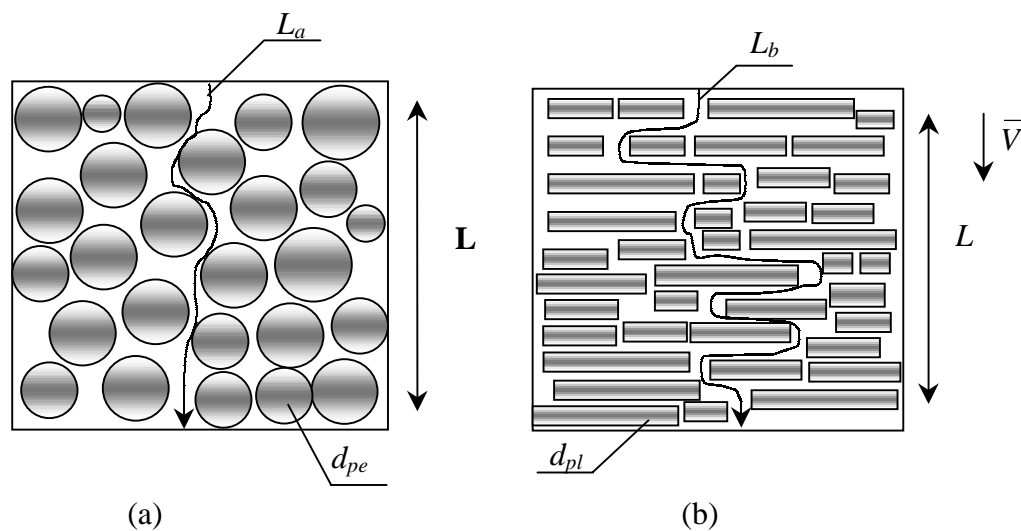


Figura 1.26 – Vias para passagem do líquido através de meios porosos diferentes.

É evidente que, no caso (b), o caminho do líquido atravessando o meio poroso é mais comprido (L) e a percolabilidade menor do que no caso (a), apesar das porosidades e os diâmetros médios serem iguais ($d_{pe} = d_{pl}$). Então, existe mais um fator influenciador no fluxo em um meio poroso, chamado tortuosidade.

A idéia de tortuosidade foi introduzida, pela primeira vez por Carman, 1937, que propunha um fator de tortuosidade quando estudava a relação entre a velocidade média em um tubo capilar tortuoso, a diferença piezométrica entre os extremos do tubo e a distância pela linha reta entre suas extremidades. Segundo Carman, 1937, a tortuosidade é considerada sob dois aspectos:

1º) para dois tubos (figura 1.27), com extremos cd e CD , com mesma força motriz $\Delta\phi$, os gradientes hidráulicos sendo diferentes:

$$|\nabla\phi|_{cd} = \frac{\Delta\phi}{L_{cd}} < \frac{\Delta\phi}{L_{CD}} = |\nabla\phi|_{CD} \quad (1.97)$$

por isso, a velocidade (V_{cd}) pelo tubo cd (que é proporcional ao gradiente) será menor de que a V_{CD} ; a ligação entre elas é determinada aproximadamente pela fórmula:

$$V_{cd} = \frac{L_{CD}}{L_{cd}} V_{CD} \quad (1.98)$$

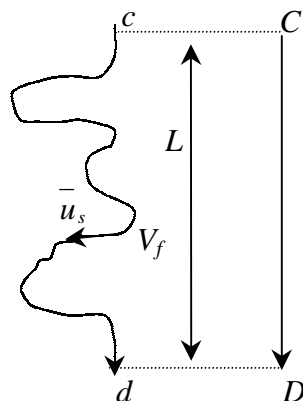


Figura 1.27 – Esquema da passagem do líquido através de canais diferentes.

2º) também o caminho cd é mais longo de que a via CD . Neste caso, uma parcela do líquido que entra no tubo cd vai atravessar a camada porosa por um período de tempo mais longo do que a parcela do fluido pelo tubo CD . Ou seja, a velocidade frontal do líquido (V_f) pelo tubo tortuoso será menor de que a velocidade real e a relação entre elas é :

$$V_f \cong V_{cd} \frac{L_{CD}}{L_{cd}} \quad (1.99)$$

Multiplicando ambos os lados da equação (1.99) pelo termo L_{CD}/L_{cd} obtém-se:

$$\frac{V_{cd} L_{CD}}{L_{cd}} = V_f = \frac{R^2 \gamma}{m\mu} \frac{\Delta\phi}{L_{cd}} \frac{L_{CD}}{L_{cd}} \quad (1.100)$$

Transformando a parte direita da equação (1.100) na forma tradicional obtém-se finalmente:

$$V_f = \frac{R^2 \gamma}{m\mu} \frac{\Delta\phi}{L_{CD}} \frac{L_{CD}}{L_{cd}} \frac{L_{CD}}{L_{cd}} = \frac{R^2 \gamma}{m\mu} \left(\frac{L_{CD}}{L_{cd}} \right)^2 \frac{\Delta\phi}{L_{CD}} = \frac{R^2 \gamma T}{m\mu} \frac{\Delta\phi}{L_{CD}} \quad (1.101)$$

onde $T = \left(\frac{L_{CD}}{L_{cd}} \right)^2 < 1$, que corresponde à taxa de tortuosidade determinada por Carman, 1937;

De fato, alguns autores, diferentemente da determinação de Carman, 1937, preferem definir tortuosidade como $\left(\frac{L_{cd}}{L_{CD}} \right)^2 > 1$. Esta é só uma questão de definição. Por outro lado, a definição de tortuosidade apresentada por vários pesquisadores como sendo (L_{CD}/L_{cd}) é um engano [Bear, 1972]. Esta última definição errônea de tortuosidade surge da idéia de não considerar o 1º aspecto discutido acima, só levando em conta o 2º aspecto. O fator de tortuosidade é diferente para vários meios porosos. Foram publicados muitos trabalhos para determiná-los. Habitualmente o valor da tortuosidade varia de 0,56 a 0,8, conforme Sissom, 1998 e Bear, 1972.

1.4.5 Considerações sobre cinética da extração

Como regra, os modelos matemáticos da extração de soluto envolvem um conceito geral sobre “cinética da extração” que é apresentada nestes modelos através de noções de transferência do soluto entre fases, difusão dentro da fase, entre outras.

Na modelagem de fluxos contracorrente cruzados, também estão envolvidos fatores cinéticos. Na figura 1.28, são apresentados os fluxos da espécie num fragmento do campo de extração. Observam-se os seguintes fluxos da espécie durante o processo de extração:

- 1 - transferência entre fases sólida e poro;
- 2 - difusão dentro da fase poro;
- 3 - transferência entre fases poro e “bulk”;
- 4 - difusão dentro da fase “bulk”.

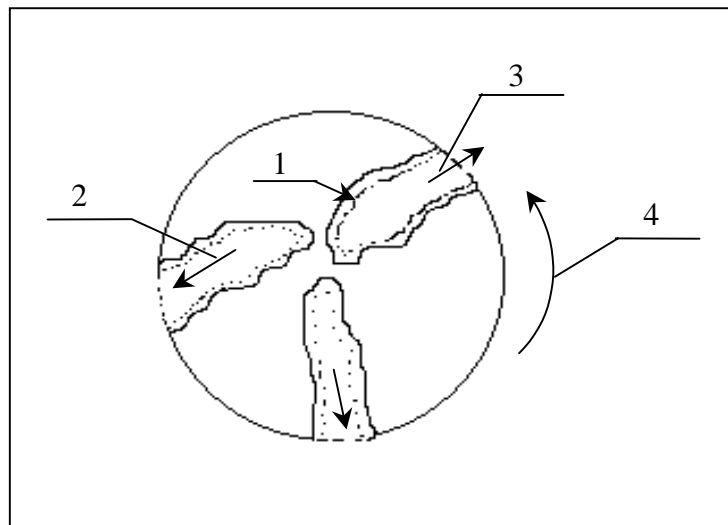


Figura 1.28 – Esquema dos fluxos da espécie num fragmento elementar do campo de extração.

Na realidade, estes fluxos surgem devido as forças motrizes limitadas e com “velocidades” limitadas, ou seja, os fluxos de massa nos regimes cinéticos. Mas frequentemente os coeficientes de transferência são relativamente grandes e alguns dos fluxos (1...4) podem ocasionar condições de equilíbrio quase que instantaneamente. Observa-se neste aspecto, que no modelo de estágios ideais todos os fluxos (1...4) são determinados admitindo o equilíbrio entre as fases, ou seja: $C^N = E_d C^p$; $C^p = C$; e a concentração C é uniforme pelo volume de um estágio. No modelo de Majumdar et al., 1995, o equilíbrio é proposto para calcular os fluxos 1, 2, e para determinar os fluxos 3 e 4, considerando a abordagem cinética (usando as leis dos fenômenos de transporte). Mas dependendo das propriedades físicas do refinado, do extrato e das suas velocidades de movimento, as concentrações C^N e C^p podem ser não uniformes no fragmento, e por isso, não estabelecer o equilíbrio. Nestas situações é necessário considerar os fatores cinéticos nos fluxos 1 e 2. Na bibliografia encontram-se vários trabalhos dedicados à modelagem destes fluxos usando a abordagem cinética [Chien et al.,1990; Simeonov et al.,1999]. Em particular, o trabalho de Chien et al.,1990, apresenta o modelo matemático dos processos em uma partícula (junto com a camada limite) que considera a difusão da espécie dentro da fase poro, conforme a figura 1.29.

É admitido que a partícula do refinado possui forma esférica com raio R_S e raio de núcleo r_c sem solvente e, o fluxo difusivo (fluxo 2) submete-se à primeira lei de Fick refletida pela equação:

$$N_{oil} = -D_{OE} \frac{dC_{oil}}{dr} + x_{oil} (N_{oil} + N_{Et})$$

onde D_{oe} é a difusividade da espécie no etanol e C_{oil} é a concentração de óleo na fase “bulk”, N_{oil} é o fluxo difusivo da espécie, N_{et} representa o fluxo do etanol e x_{oil} é a fração de óleo.

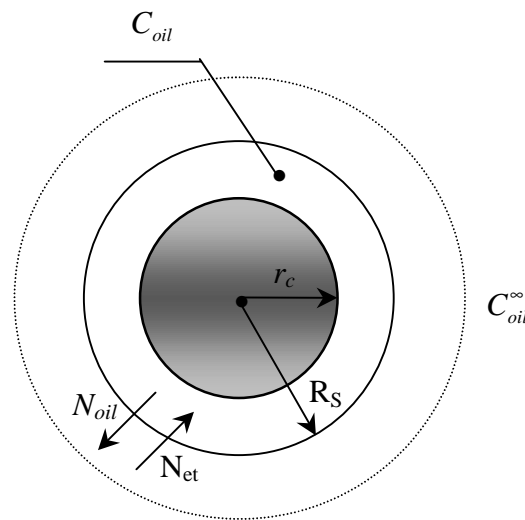


Figura 1.29 – Transferência de massa em uma partícula esférica.

Aceitando algumas hipóteses sobre o caráter da alteração de x_{oil} dentro da partícula, Chien et al., 1990, obtiveram a seguinte equação:

$$\frac{dC_{oil}}{dt} = - \frac{C_{oil}^n - C_{oil}^s}{\left\{ \frac{R^3 \rho_c}{3(c/s)D_e} \left(\frac{1}{r_c} - \frac{1}{R} \right) \right\}} \quad (1.102)$$

onde C_{oil} é a concentração de óleo na fase “bulk”, C_{oil}^s é a concentração de óleo na superfície da partícula, C_{oil}^∞ é a concentração de óleo em condições de equilíbrio, R_s é o raio da esfera, r_c é o raio da partícula de milho, ρ_c é a massa específica do milho [g/ml], c/s é a razão entre a massa da partícula e o volume do etanol [g/ml], D_e é a difusividade empírica [cm^2/s].

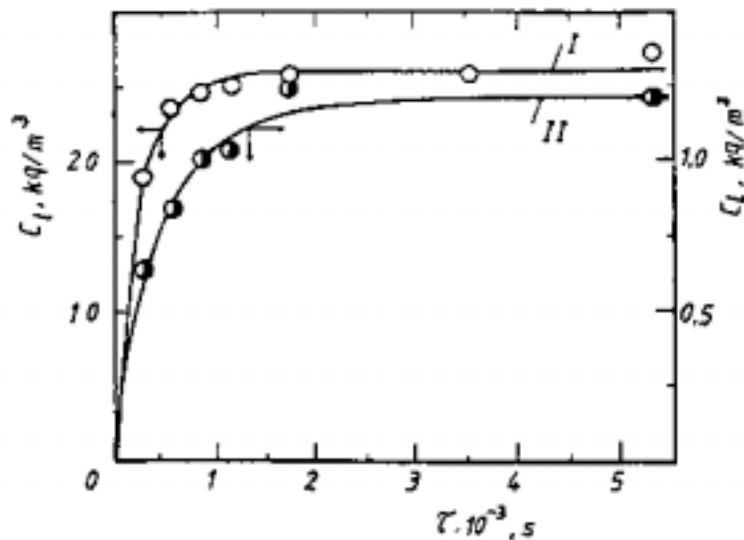
Em Simeonov et al., 1999, foram estudados dois tipos de extração sólido-líquido em plantas: da nicotina contida na folha do tabaco e da substância “*Quersus*” da casca do carvalho. O modelo matemático por eles desenvolvido considera a variação da difusividade e

porosidade. O trabalho também é aplicado na abordagem cinética para o modelamento do fluxo da espécie dentro da fase poro. As curvas de extração são apresentadas na figura 1.30.

O modelo também considera que as partículas do refinado são esféricas, e o fluxo forma-se dentro da partícula na fase poro por força da difusão, e da partícula para fase “bulk” por força das diferenças de concentrações : $C^p - C$. No modelo, os autores utilizam a analogia entre os processos da transferência de calor e massa usando até mesmo o número de Biot, que no caso da transferência de massa é:

$$Bi_m = \frac{k_f d}{D_o} \quad (1.103)$$

Este número caracteriza a existência ou não de um gradiente de concentração interno. Se este número for muito pequeno, o gradiente interno deve ser tão pequeno em comparação com a diferença de concentração externa, e a transferência de massa pode então ser controlada, sobretudo pelo transporte convectivo na superfície.



I – sistema nicotina tabaco; II – sistema casca do carvalho

○ ● - experimental - teórico, respectivamente

Figura 1.30 – Curvas de extração: $C_l = f(\tau)$, onde C_l é a concentração da fase líquida

O valor do número de Biot, pesquisado por Simeonov et al., 1999, é

$$Bi_m = \frac{k_f d}{D_{AB}} > 50, \text{ ou seja, a transferência de massa entre as fases “bulk” e poro é “mais rápida”}$$

que a difusão dentro da fase poro.

Por isso, para refinados formados de partículas “sólidas” (sem porosidades internas) ou com características cinéticas lentas ou com altas taxas de alterações das concentrações no campo de extração, necessita-se considerar os “efeitos cinéticos” dentro das partículas. Entretanto, nos extratores industriais contemporâneos, as velocidades do refinado e da micela são pequenas, e além disso, durante a preparação do refinado formam-se nele os poros internos (rompimento das paredes das células) que garantem a alta transferência do soluto dentro das partículas. Neste caso, pode-se aceitar a hipótese sobre o equilíbrio entre as concentrações da fase sólida e poro.

2. MODELAGEM DOS PROCESSOS DE EXTRAÇÃO EM FLUXOS CONTRACORRENTE CRUZADOS

Neste capítulo será mostrado o desenvolvimento do modelo matemático dos processos em fluxos contracorrente cruzados de um extrator típico. Faz-se uma descrição dos processos envolvidos: distribuição da matéria-prima e da micela nas seções do extrator; como ocorrem os processos de carregamento, extração e drenagem; como ocorre a transferência de massa entre as fases poro e sólido, poro e “bulk”; descrevem-se as principais etapas da esquematização e considerações sobre o esquema físico (item 2.1). A dedução das equações de variação das concentrações no modelo matemático, descritas no item 2.2. O modelo matemático acoplado para os processos nos fluxos contracorrente cruzados, considerando os submodelos de uma seção de percolação, o modelamento das bandejas, da drenagem e do carregamento, e condições iniciais e de contorno, está descrito no item 2.3.

2.1 Descrição dos processos em extrator de leito horizontal e criação do modelo físico

Um esquema detalhado, com os fluxos da matéria-prima e da micela com o carregamento do vagão e da drenagem, está mostrado na figura 2.1. A matéria-prima entra pelo tubo 1, na seção 1, enchendo o corpo do extrator limitado pela comporta, e ali permanece subindo na tremonha até uma certa altura (1 a 2,5 m) acima da superfície superior do leito, onde, como regra geral, existe uma comporta que regula a altura da massa. São aplicados rastelos em cada seção, para permeabilizar a massa e permitir uma melhor percolação. O solvente entra no extrator pelo controlador (17) e tubo (2), passando pela última seção, caindo na bandeja (19); a micela se movimenta para cima pelo tubo (13) até chegar no distribuidor (12). Depois atravessa a penúltima seção de percolação, caindo na bandeja (9) e, assim por diante, até o tubo (3), de onde ela (enriquecida de óleo) sai do campo de extração e entra no vaporizador (15); o farelo sai da seção de drenagem para o dessolventizador (14).

Numa situação típica, o extrator funciona em regime estacionário com os valores constantes: da velocidade do transportador u ; dos consumos de solvente Q_{so} ; da matéria-prima M_n ; etc. Entretanto, para entrar neste regime, é necessário algum tempo (depois do início do funcionamento), porque o transportador move-se lentamente, o que condiciona o tempo de estabelecimento de 1 hora até algumas horas. Também se considera o regime transiente do processo porque a concentração inicial do produto (N_T) que entra na instalação pode ser variável.

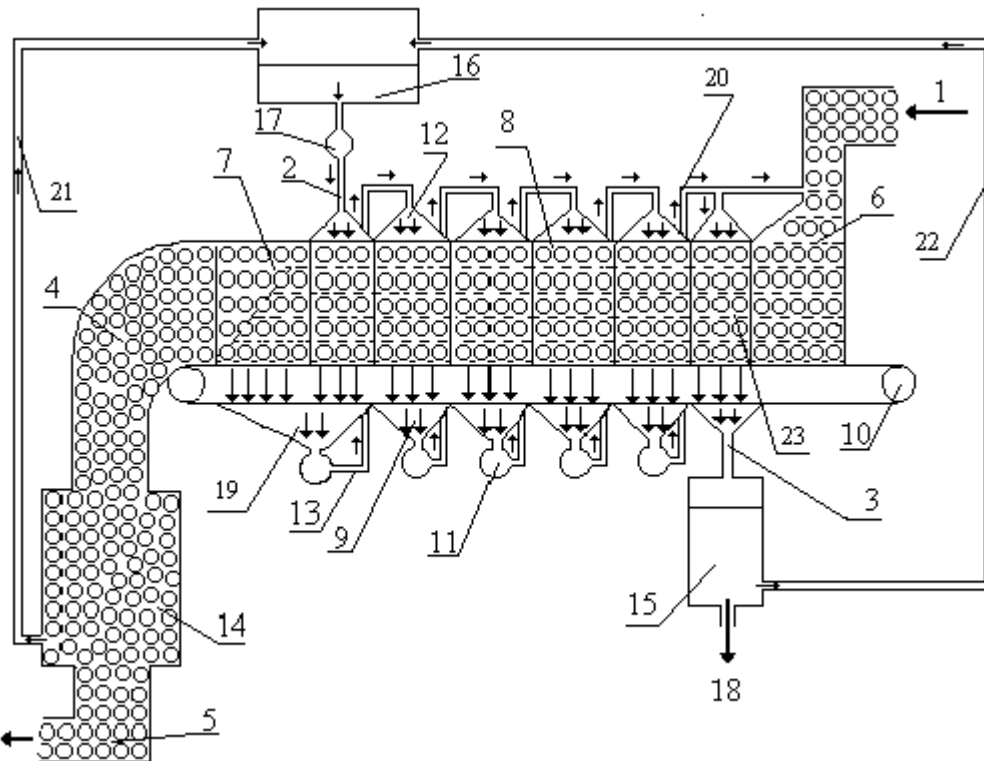


Figura 2.1 - Esquema dos processos e dos dispositivos de um extrator horizontal

1 - tubo de entrada de matéria-prima na seção de carregamento; 2 - entrada de solvente no campo de extração; 3 - tubo de saída da micela forte; 4 - saída de farelo branco do extrator; 5 - farelo sem solvente; 6 - seção de carregamento de matéria-prima com micela; 7 - seção de drenagem; 8 - seção de percolação; 9 - bandeja; 10 - transportador de matéria-prima; 11 - bombas de distribuição de micela; 12 - distribuidor de micela; 13 - tubo da saída de micela fraca; 14 - matéria-prima no DT (dessolventizador e tostador); 15 - evaporador; 16 - reservatório de solvente; 17 - controlador de fluxo de solvente; 18 - saída de óleo vegetal; 19 - bandeja da micela drenada; 20 - tubo com micela para a última percolação e carregamento; 21 - tubo com solvente que volta do DT; 22 - tubo com solvente que volta do evaporador; 23 - primeira seção de percolação.

A temperatura do leito é, praticamente, uniforme, considerando que o movimento da matéria-prima é muito lento, constante e sem agitação, o que não proporciona aquecimento por atrito através do contato entre as partículas da matéria-prima, entre as partículas e as paredes do extrator. Também não são observadas reações químicas que poderiam produzir calor. Um extrator tem comprimento aproximado de 10 a 15 m, uma largura de 1,5 a 2,5 m e uma altura de 1,5 a 2,5 m, dependendo da capacidade e do tipo de matéria-prima utilizada. No funcionamento típico, têm-se os seguintes parâmetros de regime: velocidade de descida da micela, $V_m = 3$ a 10 mm/s, velocidade da esteira transportadora da matéria-prima, $u = 4$ a 8 mm/s, fluxo de solvente puro, $Q_{so} = 8$ a 15 dm³/s; e fluxo de matéria-prima que entra no extrator na zona de carregamento (6), $M_n = 2$ a 12 kg/s.

Habitualmente a concentração mássica final do produto na micela é aproximadamente de 15% ... 35%. Como regra, uma seção de distribuição de micela não tem divisões. Os pontos de distribuição de micela e as bandejas acumuladoras de micela estão

imóveis. A velocidade u é constante e orientada da direita para a esquerda pela esteira perfurada. As seções de percolação são de mesmo tamanho e estão no mesmo nível, mas as seções de carregamento e de drenagem, tem um tamanho que mede aproximadamente a metade de uma seção de percolação típica; normalmente o nível de micela fica um pouco acima (3 a 10 cm, aproximadamente) do nível da matéria-prima.

Durante o carregamento, a micela forte preenche os espaços entre as partículas da matéria-prima e penetra na fase poro. Ao mesmo tempo, por força da extração, o óleo da fase sólida sai à fase poro, e rapidamente, estabelece-se o equilíbrio entre as concentrações volumétricas de óleo na matéria-prima, C^N , e as concentrações volumétricas de óleo da micela na fase poro, C^p .

No processo de percolação, passando de seção por seção, mantém-se o equilíbrio entre C^N e C^p , e a concentração C^p diminui por causa da transferência do produto de fase poro à fase “bulk” (à micela). - o fluxo 1 (figura 3.2); ao mesmo tempo, surge o fluxo contrário - fluxo 2, do solvente. A transferência de produto ocorre por causa da diferença de concentrações ($C^p - C$), onde C é a concentração do óleo na fase “bulk”. Entre as fases sólida e poro aparecem, também, os fluxos 3 (do óleo) e 4 (do solvente).

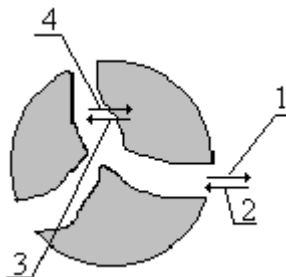


Figura 2.2 - Esquema da transferência de massa entre as fases sólida, poro e “bulk”

Na etapa de drenagem, a micela (praticamente solvente puro) escoia dos espaços entre partículas da matéria-prima. Em cada seção, durante a extração, as concentrações C e C^p não são uniformes pelo espaço e pelo tempo (figura 2.3). É evidente que, para qualquer seção, a concentração C_m (concentração do óleo na micela injetada) é menor que a concentração do óleo na fase poro para qualquer ponto da seção $C^p(x,y)$.

As concentrações da micela C_1 , C_2 , C_3 e C_4 , representadas pelos pontos sobre as posições p1, p2, p3 e p4, respectivamente (figura 2.3) distribuem-se da seguinte maneira: C_1 - concentração mais fraca em comparação com C_2 porque a partícula (p1) já foi lavada há algum tempo, e neste instante, a partícula (p2) entra na seção. Também $C_1 < C_3$ porque a micela chegando ao ponto (p3) já foi enriquecida, recebendo o produto das partículas que ficaram no seu

caminho. A concentração C_4 é a mais forte porque: - em comparação com C_3 a partícula (p4) entrou neste instante, - em comparação com C_2 , a micela já foi enriquecida pelo produto das partículas que ficaram no seu caminho.

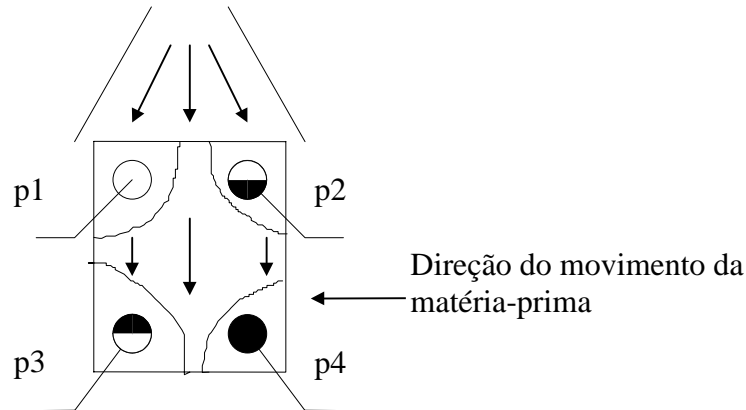


Figura 2.3 - Distribuição das concentrações pela seção de percolação

Estas considerações confirmam que a distribuição C^p e C na seção não é uniforme. Então, também observa-se que a concentração da micela, na saída da seção (entrada da bandeja), não é uniforme. Mas dentro da bandeja (e por isso no distribuidor), pode-se considerar que a concentração é uniforme (porque o processo de mistura na bandeja e na bomba é bastante intenso). Por causa da não-uniformidade da concentração $C(x,y)$ na seção ocorre, também, a difusão do óleo pelo campo da fase “bulk”.

A micela, dentro de uma seção de percolação, move-se de cima para baixo, de modo cruzado com o fluxo da matéria-prima, e passa de uma seção para outra contra este fluxo, resultando o esquema contracorrente cruzado (figura 2.4). Ele possui duas particularidades:

- o fluxo de micela da drenagem une-se com o fluxo principal da micela (3);
- uma parte da micela forte é utilizada na seção de carregamento (5), junto com a entrada de matéria-prima (6).

Estas particularidades complicam o modelo físico e o modelo matemático. Há também o movimento lento da micela, na direção horizontal, provocado pelo movimento da matéria-prima. No regime estacionário de funcionamento do extrator (figura 2.4), tem-se a relação:

$$Q_+^{es} + Q_{so} C_{in} = C_s Q_s + F_{ol} \quad (2.1)$$

onde, Q_+^{es} é a vazão volumétrica de óleo na entrada do extrator, Q_{so} é a vazão volumétrica de solvente na seção da entrada de hexano, F_{ol} é a vazão volumétrica do óleo na saída do farelo, e Q_s é a vazão da micela forte na saída do extrator.

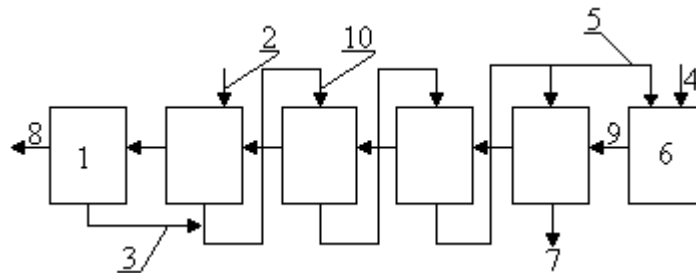


Figura 2.4 - Esquema principal dos fluxos no extrator

1 – seção de drenagem; 2 – entrada de solvente; 3 - entrada de micela drenada; 4 - entrada de matéria-prima; 5 - entrada de micela forte; 6 - seção de carregamento; 7 - saída de micela forte; 8 - saída de matéria-prima já processada (farelo); 9 - direção do movimento da matéria-prima; 10 - direção do movimento da micela.

Apoiado nesta descrição, pode-se criar o modelo físico dos processos no extrator típico. Os principais momentos do modelamento são:

1. Consideram-se os fluxos contracorrente cruzados da matéria-prima e da micela;
2. As seções vizinhas não têm separações físicas;
3. A difusão considera-se ao longo de todo o extrator, nas direções vertical e horizontal.
4. No início do preenchimento, todo o óleo está na fase sólida.
5. Durante o preenchimento, ocorre a passagem de micela forte, com concentração \bar{C}_2 da fase “bulk” para a fase poro, ocupando uma fração do volume dos poros dessa (ε_m), e simultaneamente, ocorre a transferência do óleo da fase sólida para a fase poro, ocupando a outra parte do espaço ($\varepsilon_p - \varepsilon_m$).
6. Depois do preenchimento, ocorre instantaneamente a mistura uniforme do óleo dos espaços ε_m e ($\varepsilon_p - \varepsilon_m$) formando a concentração inicial da fase poro, C_{en}^p , no espaço ε_p .
7. A quantidade volumétrica do óleo que sai (no andamento da percolação) das partículas substitui-se por uma mesma quantidade volumétrica de solvente. Neste caso, o fluxo volumétrico da micela, pelo extrator, é constante e não depende dos processos de transferência do óleo na fase “bulk”. Observa-se que, ao mesmo tempo, o fluxo mássico aumenta ($\rho_{es} > \rho_{so}$).
8. O nível de micela nas seções de percolação está acima do nível da matéria-prima.
9. Na etapa de drenagem o produto, que fica na fase poro do farelo, está perdido (não retorna ao extrator), mas a espécie da fase “bulk”, que passou pela zona de drenagem, retorna.

10. Na zona de carregamento, os processos de transferência da espécie, na fase “bulk”, não ocorrem.
11. No volume de cada bandeja, \bar{V}_b (os volumes das bandejas são iguais), a concentração do produto (\bar{C}_m), é uniforme.
12. A viscosidade é constante e não depende da concentração do óleo na micela.
13. A temperatura é uniforme por toda a zona de extração.
14. As concentrações volumétricas de espécie na parte sólida e fase poro estão em equilíbrio pela constante $E_d^v = C^N / C^p$.
15. As paredes celulares das partículas da matéria-prima estão totalmente rompidas.
16. Considera-se o regime transiente de funcionamento do extrator.
17. As porosidades ε_b e ε_p são constantes durante o processo da extração.
18. Dentro das seções de extração a micela da fase “bulk” move-se na direção vertical (com velocidade constante V_m , que é determinada pelas características da micela e da matéria-prima) e também na direção horizontal (com velocidade constante u_h), arrastada pela matéria-prima.
19. A velocidade do transportador u é constante.
20. A área específica de contato das fases poro e “bulk” (a_p) é constante durante a extração.

2.2 Dedução das equações do modelo matemático para uma seção

Inicialmente, deduzem-se as equações que descrevem a extração em uma seção de percolação do extrator (figura 2.5). Nesta zona, a micela (com velocidade vertical V_m , velocidade horizontal u_h e concentração do óleo C_{en}), sob a força da gravidade, move-se de cima para baixo. A matéria-prima (com velocidade u e concentração C_{en}^p) move-se sob a ação do transportador, cruzando o fluxo de micela. Se alguma quantidade de micela entrar na partícula, o mesmo volume de óleo sai. Neste caso, o fluxo volumétrico da micela, Q_Σ , é constante.

Se Q_Σ é constante ao longo da direção z , e além disso, a área transversal $A\varepsilon_b$ é constante, então, $V_m = Q_\Sigma / (A\varepsilon_b)$ é constante, onde $A = X_s H$ (H é largura do leito). Na dedução das equações abaixo, considera-se, $H = 1$. Esta consideração simplifica a dedução sem alterar a forma final das equações. As velocidades u e u_h são constantes durante todo o processo, de acordo com o modelo físico, mas as grandezas C , C^p são funções das coordenadas x e z e do tempo (até o momento de alcançar o estado estacionário).

Determina-se o campo de extração como sendo o retângulo, com altura L_r , na direção z , e largura X_s , na direção x , como mostra a figura 3.6.

Divide-se este campo uniformemente em elementos (i,j) com $i = 1...n$ e $j = 1...N_p$. Então cada elemento possui dimensões $\Delta x \cdot \Delta z$, onde:

$$\Delta x = \frac{X_s}{N_h} \quad \text{e} \quad \Delta z = \frac{L_r}{n} \quad (2.2)$$

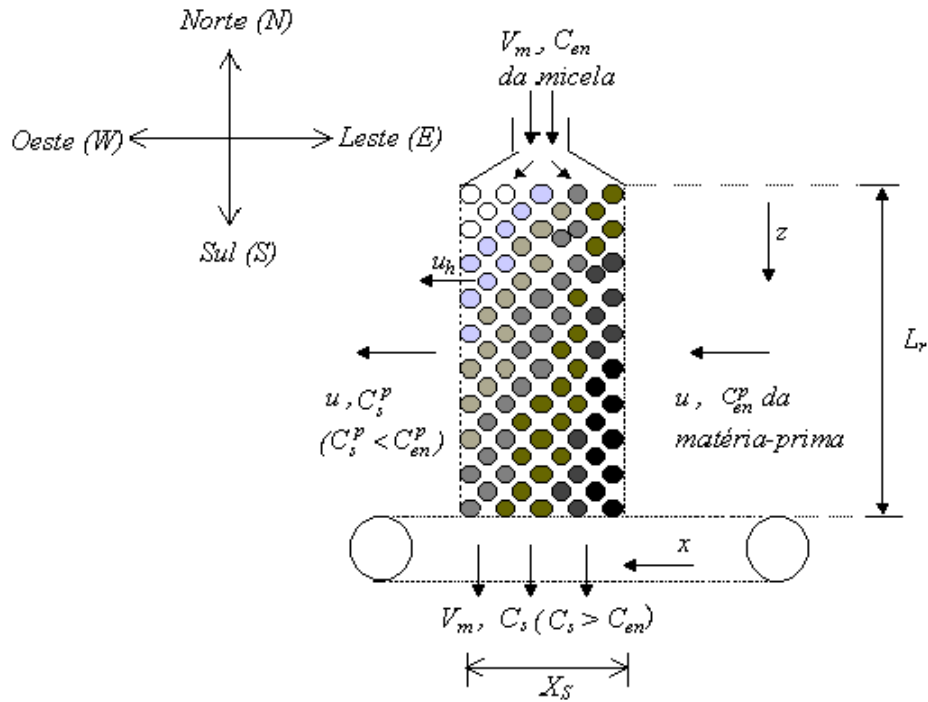


Figura 2.5 – Esquema de uma seção de extração com fluxos dos componentes

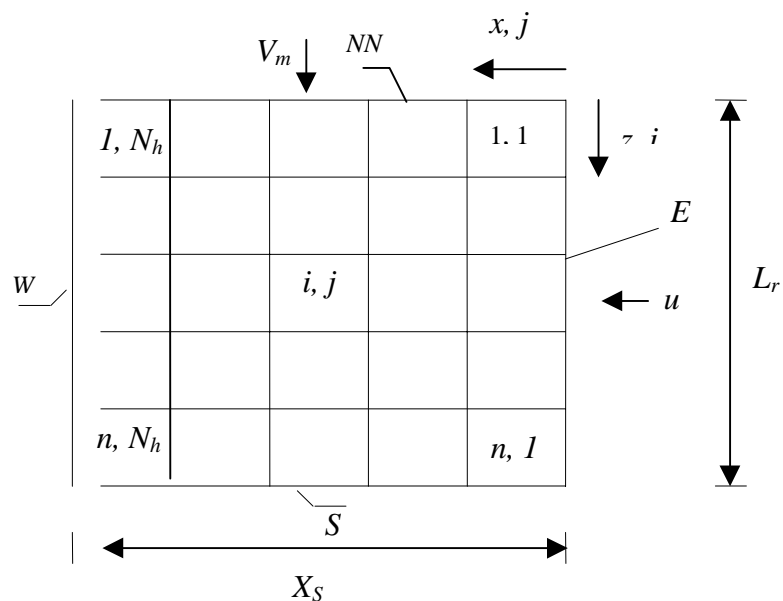


Figura 2.6 - Esquema de divisão do campo de extração numa seção

Observa-se que o sistema de coordenadas é euleriano, ou seja, elementos (i,j) são imóveis, e a micela e matéria-prima, fluem, atravessando estes elementos.

2.2.1 Equação da continuidade do óleo na fase “bulk”

Considerando que o volume ocupado pela fase “bulk” no elemento (i,j) é $\varepsilon_b \Delta x \Delta z \cdot l$, e a concentração da espécie nesta fase, durante o tempo $\Delta \tau$ altera-se de $C_{i,j}^\tau$ até $C_{i,j}^{\tau+\Delta \tau}$, de acordo com a figura 2.7, pode-se escrever o termo para a mudança da quantidade volumétrica de óleo em (i,j) :

$$\varepsilon_b \Delta x \Delta z (C_{i,j}^{\tau+\Delta \tau} - C_{i,j}^\tau) \quad (2.3)$$

Ao mesmo tempo do elemento $(i-1,j)$, entrou em (i,j) , durante o tempo $\Delta \tau$, a quantidade de espécie:

$$V_m \Delta x \varepsilon_b C_{i-1,j} \Delta \tau \quad (2.4)$$

e sai do elemento (i,j) ao $(i+1,j)$ a quantidade:

$$- V_m \Delta x \varepsilon_b C_{i,j} \Delta \tau \quad (2.5)$$

Também ocorre a difusão entre os elementos. Em particular, por este motivo, durante o tempo $\Delta \tau$, entre (i,j) e $(i-1,j)$ passa a quantidade de espécie :

$$- E_s \frac{(C_{i,j} - C_{i-1,j})}{\Delta z} \Delta x \varepsilon_b \Delta \tau \quad (2.6)$$

Analogamente, tem-se entre os elementos (i,j) e $(i+1,j)$:

$$E_s \frac{(C_{i+1,j} - C_{i,j})}{\Delta z} \Delta x \varepsilon_b \Delta \tau \quad (2.7)$$

A difusão também ocorre na direção horizontal. Tem-se os termos de difusão entre os elementos (i,j) e $(i,j-1)$, e entre (i,j) e $(i,j+1)$, respectivamente:

$$-E_s \frac{(C_{i,j} - C_{i,j-1})}{\Delta x} \Delta z \varepsilon_b \Delta \tau \quad \text{e} \quad E_s \frac{(C_{i,j+1} - C_{i,j})}{\Delta x} \Delta z \varepsilon_b \Delta \tau \quad (2.8)$$

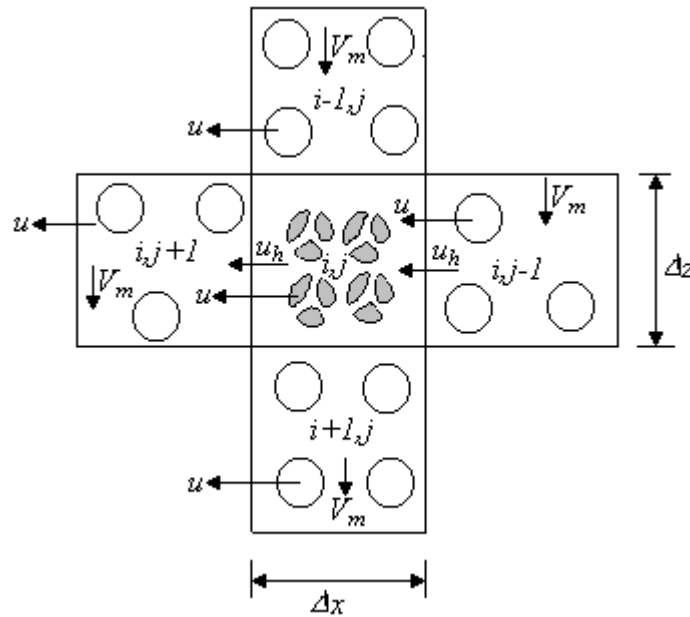


Figura 2.7 - Esquema dos fluxos no elemento (i,j).

Além disso, durante o tempo $\Delta \tau$, no elemento (i,j) da fase poro para a fase “bulk”, passa a quantidade de espécie:

$$k_f F (C_{i,j}^p - C_{i,j}) \Delta \tau \quad (2.9)$$

onde F é a superfície dentro do elemento (i,j), através do qual, ocorre a transferência de espécie, e determina-se pela fórmula:

$$F = (1 - \varepsilon_b) \alpha_p \Delta x \Delta z \quad (2.10)$$

Numa situação comum, alguma parte da micela pode, por causa do arraste da matéria-prima, entrar (através do lado direito, figura 2.7) e sair (através do lado esquerdo, figura 2.7) do elemento (i,j). Este efeito reflete-se pelo termo:

$$u_h \varepsilon_b \Delta z (C_{i,j-1} - C_{i,j}) \Delta \tau \quad (2.11)$$

De acordo com a lei de conservação tem-se a seguinte relação:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_b \Delta x \Delta z (C_{i,j}^{\tau+\Delta\tau} - C_{i,j}^{\tau}) &= V_m \varepsilon_b \Delta x C_{i-1,j} \Delta\tau - V_m \varepsilon_b \Delta x C_{i,j} \Delta\tau - E_s \frac{(C_{i-1,j} - C_{i,j})}{\Delta z} \Delta x \varepsilon_b \Delta\tau \\
&+ E_s \frac{(C_{i+1,j} - C_{i,j})}{\Delta z} \Delta x \varepsilon_b \Delta\tau - E_s \frac{(C_{i,j} - C_{i,j-1})}{\Delta x} \Delta z \varepsilon_b \Delta\tau + E_s \frac{(C_{i,j+1} - C_{i,j})}{\Delta x} \Delta z \varepsilon_b \Delta\tau \\
&+ k_f (1 - \varepsilon_b) a_p \Delta x \Delta z (C_{i,j}^p - C_{i,j}) \Delta\tau + \varepsilon_b u_h \Delta z (C_{i,j-1} - C_{i,j}) \Delta\tau
\end{aligned} \quad (2.12)$$

Dividindo (2.12) por $\varepsilon_b \Delta x \Delta z$ e simplificando, obtém-se:

$$\begin{aligned}
\frac{(C_{i,j}^{\tau+\Delta\tau} - C_{i,j}^{\tau})}{\Delta\tau} &= V_m \frac{(C_{i-1,j} - C_{i,j})}{\Delta z} + E_s \frac{(C_{i-1,j} - C_{i,j})}{\Delta z^2} - E_s \frac{(C_{i,j} - C_{i+1,j})}{\Delta z^2} \\
&+ E_s \frac{(C_{i,j-1} - C_{i,j})}{\Delta x^2} - E_s \frac{(C_{i,j} - C_{i,j+1})}{\Delta x^2} + k_f \frac{(1 - \varepsilon_b)}{\varepsilon_b} a_p (C_{i,j}^p - C_{i,j}) + u_h \frac{(C_{i,j-1} - C_{i,j})}{\Delta x}
\end{aligned} \quad (2.13)$$

onde E_s é o coeficiente de dispersão [m^2/s], k_f é o coeficiente de transferência de massa [m/s] e τ é o tempo [s]. Substituindo as diferenças finitas (central, progressiva e regressiva), obtém-se a equação (EDP) da continuidade da espécie na fase “bulk”:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = -V_m \frac{\partial C}{\partial z} + E_s \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) + \frac{(1 - \varepsilon_b)}{\varepsilon_b} k_f a_p (C^p - C) - u_h \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.14)$$

2.2.2 Equação da continuidade do óleo na fase poro

Considerando que o volume da fase poro no elemento (i,j) ocupa o espaço $\varepsilon_p (1 - \varepsilon_b) \Delta x \Delta z$, durante o intervalo de tempo $\Delta\tau$, a concentração de espécie nesta fase muda-se de $C_{i,j}^{p,\tau}$ até $C_{i,j}^{p,\tau+\Delta\tau}$. Pode-se escrever para a alteração da quantidade de espécie na fase poro no elemento (i,j) :

$$\varepsilon_p (1 - \varepsilon_b) \Delta x \Delta z (C_{i,j}^{p,\tau+\Delta\tau} - C_{i,j}^{p,\tau}) \quad (2.15)$$

Ao mesmo tempo, a fase sólida, que ocupa no elemento (i,j) , o espaço $(1 - \varepsilon_b) (1 - \varepsilon_p) \Delta x \Delta z$, transfere para a fase poro a quantidade volumétrica de espécie:

$$(1-\varepsilon_b)(1-\varepsilon_p)\Delta x\Delta z(C_{i,j}^{N,\tau+\Delta\tau}-C_{i,j}^{N,\tau}) \quad (2.16)$$

A transferência de espécie da fase poro à fase “bulk” determina-se pela equação (2.9) com sinal negativo (-).

Existe também o fluxo de espécie da fase poro (em conjunto com a matéria-prima) entre os elementos $(i,j-1)$ e (i,j) :

$$u\Delta zC_{i,j-1}^p(1-\varepsilon_b)\varepsilon_p\Delta\tau \quad (2.17)$$

e entre os elementos (i,j) e $(i,j+1)$:

$$-u\Delta zC_{i,j}^p(1-\varepsilon_b)\varepsilon_p\Delta\tau \quad (2.18)$$

O fluxo de espécie da fase sólida entre os elementos $(i,j-1)$ e (i,j) :

$$u\Delta zC_{i,j-1}^N(1-\varepsilon_b)(1-\varepsilon_p)\Delta\tau \quad (2.19)$$

e entre os elementos (i,j) e $(i,j+1)$:

$$-u\Delta zC_{i,j}^N(1-\varepsilon_b)(1-\varepsilon_p)\Delta\tau \quad (2.20)$$

A transferência de espécie da fase poro à “bulk”, durante um tempo $\Delta\tau$, no elemento (i,j) :

$$-k_f a_p \Delta x \Delta z (1-\varepsilon_p) (C_{i,j}^p - C_{i,j}) \Delta\tau \quad (2.21)$$

Então, por analogia com (2.12), tem-se a igualdade:

$$\begin{aligned} & (1-\varepsilon_b)\Delta x\Delta z\varepsilon_p(C_{i,j}^{p,\tau+\Delta\tau}-C_{i,j}^{p(\tau)}) + (1-\varepsilon_b)(1-\varepsilon_p)\Delta x\Delta z(C_{i,j}^{N,\tau+\Delta\tau}-C_{i,j}^{N,\tau}) = \\ & + u\Delta zC_{i,j-1}^p(1-\varepsilon_b)\varepsilon_p\Delta\tau - u\Delta zC_{i,j}^p(1-\varepsilon_b)\varepsilon_p\Delta\tau + u\Delta zC_{i,j-1}^N(1-\varepsilon_b)(1-\varepsilon_p)\Delta\tau \\ & - u\Delta zC_{i,j}^N(1-\varepsilon_b)(1-\varepsilon_p)\Delta\tau - k_f a_p \Delta x \Delta z (1-\varepsilon_p) \cdot (C_{i,j}^p - C_{i,j}) \Delta\tau \end{aligned} \quad (2.22)$$

Dividindo a equação (2.22) por $(1 - \varepsilon_p)\varepsilon_p\Delta x\Delta z\Delta\tau$, recebe-se

$$\frac{\partial C^p}{\partial \tau} + \frac{(1 - \varepsilon_p)}{\varepsilon_p} \frac{\partial C^N}{\partial \tau} = - \frac{k_f a_p}{\varepsilon_p} (C^p - C) - u \frac{\partial C^p}{\partial x} - u \frac{(1 - \varepsilon_p)}{\varepsilon_p} \frac{\partial C^N}{\partial x} \quad (2.23)$$

Considerando o equilíbrio entre as fases sólida e poro na forma $C^N = E_d^v C^p$ a derivada $\frac{\partial C^N}{\partial \tau}$ pode ser escrita por:

$$\frac{\partial C^N}{\partial \tau} = E_d^v \frac{\partial C^p}{\partial \tau} \quad (2.24)$$

e

$$\frac{\partial C^N}{\partial x} = E_d^v \frac{\partial C^p}{\partial x} \quad (2.25)$$

onde E_d^v é o coeficiente de equilíbrio volumétrico.

Colocando em (2.23) as relações (2.24) e (2.25), obtém-se:

$$\frac{\partial C^p}{\partial \tau} + \frac{(1 - \varepsilon_p)}{\varepsilon_p} E_d^v \frac{\partial C^p}{\partial \tau} = - \left[u \frac{\partial C^p}{\partial x} + u \frac{(1 - \varepsilon_p)}{\varepsilon_p} E_d^v \frac{\partial C^p}{\partial x} \right] - \frac{k_f a_p}{\varepsilon_p} (C^p - C) \quad (2.26)$$

Isolando as derivadas temporais no lado esquerdo e as derivadas espaciais do lado direito da equação, obtém-se:

$$\left[1 + \frac{(1 - \varepsilon_p)}{\varepsilon_p} E_d^v \right] \frac{\partial C^p}{\partial \tau} = - \left[1 + \frac{(1 - \varepsilon_p)}{\varepsilon_p} E_d^v \right] u \frac{\partial C^p}{\partial x} - \frac{k_f a_p}{\varepsilon_p} (C^p - C) \quad (2.27)$$

e reescrevendo (2.27), finaliza-se:

$$\frac{\partial C^p}{\partial \tau} = - \frac{k_f a_p (C^p - C)}{[\varepsilon_p + (1 - \varepsilon_p) E_d^v]} - u \frac{\partial C^p}{\partial x} \quad (2.28)$$

2.2.3 Condições iniciais e de contorno para o problema de uma seção

No item 3.3, foi realizada a comparação de duas versões do modelo de uma seção, apresentada pelas equações (2.14) e (2.28), com o objetivo de verificar parcialmente o código. Este problema isolado é chamado de “problema de uma seção”. Então, para resolvê-lo, são necessárias as condições iniciais e de contorno.

Para as condições iniciais pode-se escrever, por exemplo,

$$\begin{aligned} C(x,z,0) &= C_0 & \text{para } 0 < x < X_S, \quad 0 < z < L_r \\ C_0^p(x,z,0) &= C_0^p & \text{para } 0 < x < X_S, \quad 0 < z < L_r \end{aligned}$$

com preferência $C_0^p > C_0$, onde C_0^p e C_0 são as concentrações da micela na fase poro e “bulk” no tempo zero.

Para as condições de contorno (figura 2.6) considera-se que:

- na fronteira NN , a concentração do óleo na fase “bulk”, $C = C^N$;
- na fronteira S (saída de micela) pode-se prescrever que a derivada é $\left. \frac{dC}{dz} \right|_s = 0$;
- na fronteira E (entrada da matéria-prima) a concentração de espécie na fase poro, $C^p = C_E^p$, é prescrita, e para a fase “bulk”, tem-se: $\left. \frac{dC}{dx} \right|_E = 0$;
- na fronteira W (saída da matéria-prima) considera-se a derivada: $\left. \frac{dC}{dx} \right|_w = 0$.

Então escreve-se o conjunto das condições de contorno como:

na superfície NN : $C(x,0,\tau) = C^N(\tau)$ para $0 < x < X_S$; $\tau \geq 0$; $z = 0$

na superfície S : $\left. \frac{dC}{dz} \right|_s = 0$ para $0 < x < X_S$; $\tau \geq 0$; $z = L_r$

na superfície E : $C^p(0,z,\tau) = C_w^p(\tau)$; $\left. \frac{dC}{dx} \right|_E = 0$ para $x = 0$; $0 < z < L_r$; $\tau \geq 0$

na superfície W : $\left. \frac{dC}{dx} \right|_w = 0$; para $x = X_S$; $\tau \geq 0$; $0 < z < L_r$

O submodelo desenvolvido para uma seção possui um valor importante porque é uma parte essencial do modelo matemático dos processos em fluxos contracorrente cruzados.

2.3 Modelo matemático para os processos em fluxos contracorrente cruzados

De acordo com a figura 2.8, o extrator tem algumas seções de percolação, uma seção de carregamento, uma seção de drenagem e bandejas. Agora, apresentam-se os submodelos para estas partes do extrator

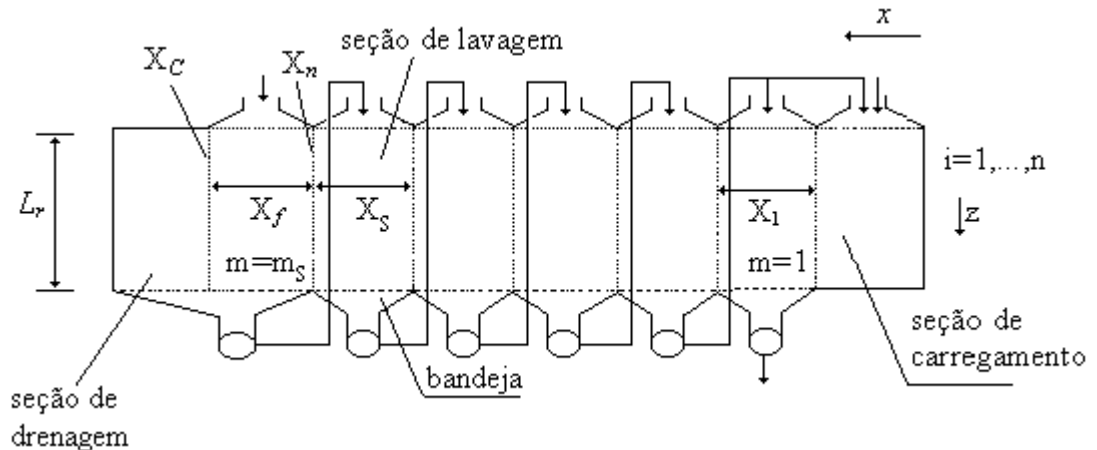


Figura 2.8 - Esquema dimensional de um extrator horizontal

2.3.1 Seções de percolação

Admite-se que o extrator inclui m_s seções de percolação; então, para cada m -seção tem-se duas equações (desenvolvidas no item 2.2):

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = -V_m \frac{\partial C}{\partial z} + E_s \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) + \frac{(1-\varepsilon_b)}{\varepsilon_b} k_f a_p (C^p - C) - u_h \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial C^p}{\partial \tau} = - \frac{k_f a_p (C^p - C)}{[\varepsilon_p + (1-\varepsilon_p)E_d^v]} - u \frac{\partial C^p}{\partial x} \quad (2.30)$$

As equações são iguais para todas as seções, e nos limites verticais entre elas, não há particularidades. Por isso, pode-se descrever todo o campo de extração somente pelas duas equações (2.29 e 2.30). As condições de contorno do modelo para todo o extrator serão mais complexas do que para um fragmento, como será apresentado no sub-item (2.3.5).

2.3.2 Modelagem da drenagem

Depois da percolação (saindo da fronteira esquerda da seção m_S – figura 2.8) a matéria-prima (já praticamente esgotada) e, a micela fraca (que ocupa os espaços ε_b e ε_p), entram na etapa de drenagem; onde esta micela separa-se da matéria-prima.

Analisando o funcionamento de um extrator e seu equipamento auxiliar, verifica-se que realmente todo solvente retorna ao extrator, após passar pelo dessolventizador. Mas quanto à espécie, somente o que está na fase “bulk” retorna ao extrator. Por esse motivo, conclui-se que há perdas de espécie nas fases sólida e poro da matéria-prima, isto é, a espécie não se evaporou com a alta temperatura a que é submetida no DT. Este fato é comprovado através dos resultados obtidos experimentalmente, onde foi constatado que a matéria-prima, após passar pelo processo de extração, ainda contém produto no seu interior.

O nosso objetivo neste item é determinar Q_D , (vazão volumétrica na seção de drenagem) e Q_Σ (fluxo volumétrico que passa através do extrator) e F_{ol} (perdas do produto). Observa-se que Q_Σ é constante porque de acordo com o esquema físico, nas seções de percolação, a espécie saindo da matéria-prima substituí-se pelo mesmo volume de solvente. Por isso, o fluxo mássico de espécie no extrator aumenta à medida que ele abandona a fase sólida, pelo fato de que a densidade do óleo é maior do que o solvente. Na figura 2.9 está mostrado o esquema dos fluxos na etapa de drenagem. De acordo com ele, no fundo da seção de drenagem, recebe o fluxo volumétrico da micela da fase “bulk” que passa através da linha A

$$Q_D = HL_r u_h \varepsilon_b \quad (2.31)$$

onde H é a largura do leito (m) e L_r é a altura do leito [m], u_h é a velocidade de arraste da micela pelo movimento da matéria-prima [m/s] e ε_b é a porosidade “bulk”.

Agora, analisando o balanço dos fluxos na m_S -seção para a fase “bulk”, pode-se escrever facilmente:

$$Q_\Sigma = Q_{so} + u_h \varepsilon_b HL_r \quad (2.32)$$

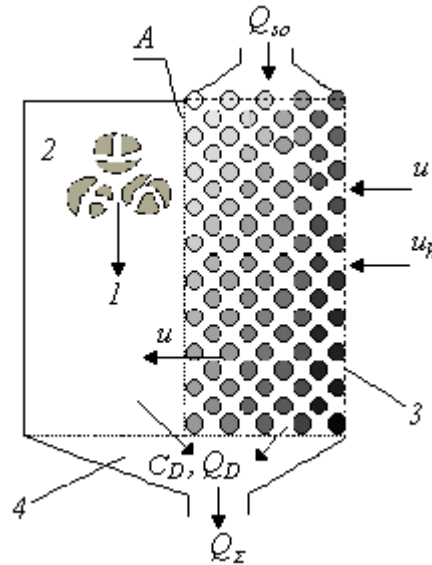


Figura 2.9 - Esquema da drenagem e dos fluxos na última seção

1 - drenagem da fase “bulk”; 2 – seção de drenagem; 3 – linha da entrada, da matéria-prima, na seção m_s ; 4 – bandeja; A – linha da entrada na seção de drenagem;.

As perdas de óleo F_{ol} ocorrem nas duas fases, poro e sólida. A vazão volumétrica dentro da fase poro (na entrada da zona de drenagem) é dada por

$$F_{ol}^p = Hu(1-\varepsilon_b)\varepsilon_p \int_0^{L_k} (C^p(\mathbf{X}_f, z, \tau)) dz \quad (2.33)$$

e a vazão volumétrica na fase sólida é:

$$F_{ol}^N = Hu(1-\varepsilon_b)(1-\varepsilon_p)E_d^v \int_0^{L_k} (C^p(\mathbf{X}_f, z, \tau)) dz \quad (2.34)$$

Adicionando-se as equações (2.33) e (2.34), obtém-se para a vazão volumétrica de óleo perdido:

$$F_{ol} = Hu(1-\varepsilon_b) \left[\varepsilon_p + (1-\varepsilon_p)E_d^v \right] \int_0^{L_k} (C^p(\mathbf{X}_f, z, \tau)) dz \quad (2.35)$$

As perdas teóricas de óleo P_{ol} são determinadas pela equação

$$P_{ol} = \frac{F_{ol} \rho_{es}}{[(1-N_T)M_n + F_{ol} \rho_{es}]} \quad (2.36)$$

2.3.3 Modelagem do carregamento

Em concordância com a figura 2.1 (fragmento 6), na seção de carregamento, entra matéria-prima com fluxo mássico M_n e com concentração mássica N_T de óleo, que são grandezas conhecidas. Ao mesmo tempo, nesta seção, entra a micela forte para preencher os espaços entre partículas e espaços dentro delas, para formar as fases “bulk” e poro. A figura 2.10 apresenta este processo detalhadamente.

O objetivo do submodelo é determinar as vazões Q_P (preenchimento das fases “bulk” e parcialmente da poro) e Q_s (vazão para a primeira seção de extração).

Para determinar a concentração da espécie na fase poro, na seção de carregamento, C_{en}^p , escreve-se, inicialmente, a fórmula para o fluxo Q_+^{es} (vazão volumétrica da espécie no extrator) que entra na seção de carregamento com matéria-prima:

$$Q_+^{es} = \frac{N_T M_n}{\rho_{es}} \quad (2.37)$$

De acordo com o modelo físico, este soluto, inicialmente, é distribuído dentro da fase sólida da matéria-prima que possui a vazão volumétrica $L_r H u (1 - \varepsilon_b) (1 - \varepsilon_p)$.

No resultado, facilmente determina-se a concentração volumétrica na fase sólida:

$$C_s = \frac{N_T M_n}{\rho_{es} L_r H u (1 - \varepsilon_b) (1 - \varepsilon_p)} \quad (2.38)$$

O preenchimento da fase poro é considerado somente numa partícula, onde, inicialmente a espécie está num volume $C_s (1 - \varepsilon_p)$, na fase sólida (figura 2.11a). Durante a primeira etapa do preenchimento, ocorre a passagem de micela forte (figura 2.11a), com concentração \bar{C}_2 , da fase “bulk” para a fase poro, ocupando uma parte dessa (ε_m), acumulando-se dentro da partícula uma quantidade da espécie igual a:

$$C_s (1 - \varepsilon_p) + \bar{C}_2 \varepsilon_m \quad (2.39)$$

e, quase simultaneamente, ocorre por força da extração, a transferência da espécie da fase sólida (com concentração C_{es}) para a fase poro, ocupando a outra parte ($\varepsilon_p - \varepsilon_m$) do espaço ε_p (figura 2.11 b). Nesta etapa, a quantidade da espécie dentro da partícula não se altera.

Depois do preenchimento, ocorre a mistura uniforme da espécie nos espaços ε_m e ($\varepsilon_p - \varepsilon_m$) formando a concentração da fase poro, C_{en}^p , na zona de carregamento (figura 2.11 c). Neste momento, também é estabelecido o equilíbrio entre as fases sólido, C_{in}^N , e poro, C_{en}^p .

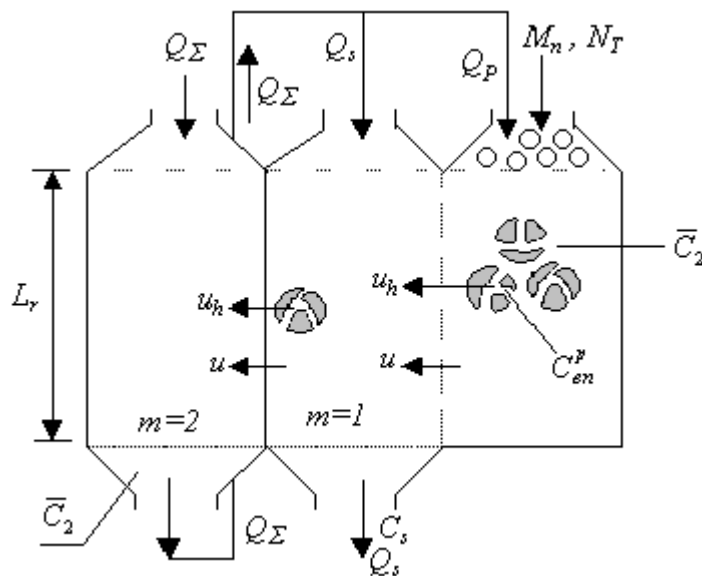


Figura 2.10 - Esquema do carregamento

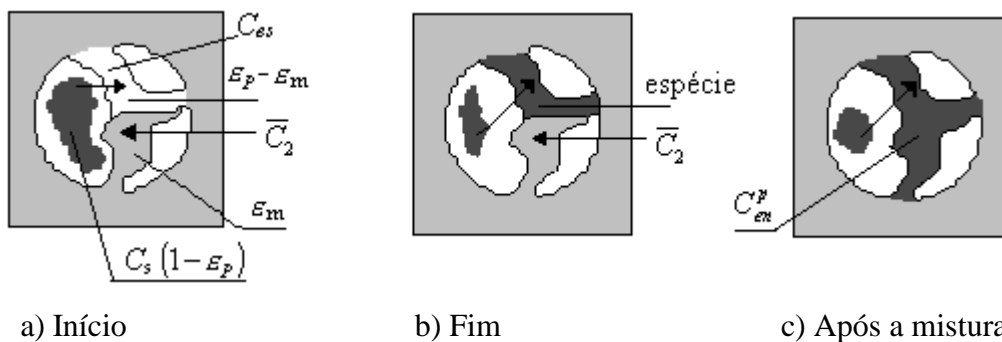


Figura 2.11 – Esquema do preenchimento de uma partícula

Baseado nestas considerações, podem-se escrever as equações do submodelo de carregamento para determinar C_{en}^p , C_{in}^N e C_{en}^p que são incógnitas no sistema de equações deduzidas abaixo.

Fazendo o balanço da espécie na partícula (fases sólido e poro), tem-se que a quantidade da espécie depois do preenchimento é igual a sua quantidade depois da redistribuição do óleo nos poros da partícula. Equacionando esta afirmação, obtém-se a primeira equação:

$$C_s (1 - \varepsilon_p) + \bar{C}_2 \varepsilon_m = C_{en}^p \varepsilon_p + C_{in}^N (1 - \varepsilon_p) \quad (2.40)$$

A segunda equação é uma relação de equilíbrio

$$LH(1 - \varepsilon_p)(1 - \varepsilon_p) \quad (2.41)$$

Substituindo C_{in}^N em (2.40), obtém-se:

$$C_s (1 - \varepsilon_p) + \bar{C}_2 \varepsilon_m = C_{en}^p \varepsilon_p + E_d^v C_{en}^p (1 - \varepsilon_p) \quad (2.42)$$

A terceira equação obtém-se considerando que “a quantidade de óleo na fase poro, depois do preenchimento (figura 2.11b), é igual à quantidade do óleo na fase poro depois da mistura”. Assim sendo, tem-se:

$$C_{es} (\varepsilon_p - \varepsilon_m) + \bar{C}_2 \varepsilon_m = C_{en}^p \varepsilon_p \quad (2.43)$$

onde $C_{es} = 1$ (óleo puro), e reescrevendo a equação (2.43), tem-se:

$$\varepsilon_m = \varepsilon_p \frac{(1 - C_{en}^p)}{1 - \bar{C}_2} \quad (2.44)$$

e substituindo em (2.43), tem-se:

$$C_s (1 - \varepsilon_p) + \bar{C}_2 \varepsilon_p \frac{(1 - C_{en}^p)}{1 - \bar{C}_2} = C_{en}^p \varepsilon_p + E_d^v C_{en}^p (1 - \varepsilon_p) \quad (2.45)$$

Finalmente, isolando C_{en}^p , obtém-se:

$$C_{en}^p = \frac{C_s(1-\varepsilon_p) + \frac{\bar{C}_2 \varepsilon_p}{1-\bar{C}_2}}{\frac{\bar{C}_2 \varepsilon_p}{1-\bar{C}_2} + \varepsilon_p + E_d^v(1-\varepsilon_p)} \quad (2.46)$$

A fórmula (2.46) determina a concentração volumétrica inicial do óleo na fase poro após o carregamento da matéria-prima. Mas observa-se que, no modelo acoplado, esta grandeza é uma incógnita porque depende (além de outras) do valor de \bar{C}_2 que é determinado durante a resolução de todo o sistema de equações deste modelo.

A vazão Q_Σ considera-se constante através das seções porque o óleo que sai da fase poro (figura 2.11), em qualquer ponto, substitui-se pela mesma quantidade volumétrica de solvente. Mas na entrada na última seção o fluxo Q_Σ ramifica-se nos dois fluxos Q_P (fluxo para preencher os espaços ε_p , ε_b na matéria-prima) e Q_s (fluxo da micela para a última seção). A fórmula para determinar Q_P evidencia-se:

$$Q_P = H L_r \left(u \cdot \varepsilon_b + u_h (1-\varepsilon_b) \varepsilon_p \frac{(1-C_{en}^p)}{1-\bar{C}_2} \right) \quad (2.47)$$

A vazão da micela forte na saída do extrator é igual a Q_s , porque, para cada seção, a vazão da fase “bulk” do lado direito é igual a vazão do lado esquerdo. Então o fluxo de entrada por cima da seção é igual ao fluxo da vazão de saída (figura 2.10). Por isso tem-se:

$$Q_s = Q_\Sigma - Q_P \quad (2.48)$$

2.3.4 Equações para variação das concentrações nas bandejas

As seções de lavagem também estão ligadas através do fluxo da micela que passa pelas bandejas e depois entra nos distribuidores. A concentração média de produto \bar{C}_m na bandeja m é igual à concentração na entrada da seção $(m-1)$. Para determinar como se altera a concentração \bar{C}_m em cada bandeja é necessário deduzir a equação correspondente. A variação da quantidade volumétrica do óleo na m -ésima bandeja durante o tempo $\Delta\tau$ é:

$$\bar{V}_b (\bar{C}_m^{\tau+\Delta\tau} - \bar{C}_m^\tau) \quad (2.49)$$

onde \bar{V}_b é o volume da bandeja (todas as bandejas são iguais).

Ao mesmo tempo, na bandeja da seção m , entra a seguinte quantidade de produto:

$$\varepsilon_b H \left(\int_{(m-1)X_S}^{mX_S} C(x, L_r, \tau) V_m dx \right) \Delta \tau \quad (2.50)$$

e sai:

$$\varepsilon_b \bar{C}_m X_S H V_m \Delta \tau \quad (2.51)$$

Utilizando a lei da conservação do óleo na bandeja, obtém-se:

$$\bar{V}_b (\bar{C}_m^{\tau+\Delta\tau} - \bar{C}_m^\tau) = \varepsilon_b H \left(\int_{(m-1)X_S}^{mX_S} C(x, L_r, \tau) V_m dx \right) \Delta \tau - \bar{C}_m X_S H \varepsilon_b V_{m-1} \Delta \tau \quad (2.52)$$

Depois de simples transformações e fazendo a passagem ao limite, $\Delta \tau \rightarrow 0$, obtém-se:

$$\frac{d\bar{C}_m}{d\tau} = \frac{\int_{(m-1)X_S}^{mX_S} C_m(x, L_r, \tau) V_m dx - \bar{C}_m X_S V_{m-1}}{\bar{V}_b / (H \varepsilon_b)} \quad , \quad m = 2, \dots, m_S. \quad (2.53)$$

Analogamente, considerando o escoamento da fase “bulk” (o fluxo Q_D), obtém-se para a última bandeja:

$$\frac{d\bar{C}_{m_S}}{d\tau} = \frac{\int_{X_n}^{X_C} C(x, L_r, \tau) dx + \int_0^{L_r} C(X_f, z, \tau) dz - \bar{C}_{m_S} X_S V_m}{V_b / (H \cdot \varepsilon_b)} \quad (2.54)$$

onde: $X_C = X_n + X_{m_S}$; $X_n = X_l + (m_S - 2) \cdot X_S$, X_C e X_n são as coordenadas da última seção, X_l é largura da primeira seção de percolação e X_{m_S} é a largura da última seção de percolação (figura 2.8).

2.3.5 Modelo matemático acoplado

Acoplando os submodelos (criados nos itens 2.3.1,..., 2.3.4), o modelo matemático total da extração de óleo, em fluxos contracorrente cruzados, em um extrator horizontal, é apresentado:

1. *Equações principais:* para o campo de extração, tem-se duas equações em derivadas parciais (com três variáveis independentes: uma o tempo e duas coordenadas espaciais):

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = -V_m \frac{\partial C}{\partial z} + E_s \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) + \frac{(1-\varepsilon_b)}{\varepsilon_b} k_f a_p (C^p - C) - u_h \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial C^p}{\partial \tau} = - \frac{k_f a_p (C^p - C)}{[\varepsilon_p + (1-\varepsilon_p)E_d^v]} - u \frac{\partial C^p}{\partial x} \quad (2.56)$$

2. *Equações íntegro-diferenciais ordinárias das concentrações nas bandejas:* para cada bandeja (exceto a primeira e a última), tem-se:

$$\frac{d\bar{C}_m}{d\tau} = \frac{\int_{X_n}^{X_k} C(x, L_r, \tau) dx - \bar{C}_m X_S V_m}{V_b / (H \cdot \varepsilon_b)} \quad (2.57)$$

para $m = 2 \dots (m_S - 1)$; $X_n = X_l + (m - 2) \cdot X_S$; $X_k = X_n + X_S$; $\tau \geq 0$

Para a última bandeja, tem-se:

$$\frac{d\bar{C}_{m_S}}{d\tau} = \frac{\int_{X_n}^{X_C} C(x, L_r, \tau) dx + \int_0^{L_r} C(X_C, z, \tau) dz - \bar{C}_{m_S} X_S V_m}{V_b / (H \cdot \varepsilon_b)} \quad (2.58)$$

onde: $X_C = X_n + X_f$; $X_n = X_l + (m_S - 2) \cdot X_S$.

3. *Condições de contorno e iniciais:*

Para a fase “bulk”:

a) para o lado direito do campo da extração

$$C(0, z, \tau) = \bar{C}_m(\tau); \quad m = 2, \quad z = 0, \dots, L_r; \quad \tau > 0; \quad (2.59)$$

b) para o seu lado esquerdo

$$\frac{\partial C(X_c, z, \tau)}{\partial x} = 0; \quad z = 0, \dots, L_r; \quad \tau > 0; \quad (2.60)$$

c) para o limite superior do campo

- para as seções de percolação $m = 1, \dots, (m_S - 1)$

$$C(x, 0, \tau) = \bar{C}_{m+1}(\tau); \quad \tau > 0; \quad (2.61)$$

se $m = 1$, então, $x = 0, \dots, X_I$;

se $m = 2, \dots, (m_S - 1)$, então, $x = [X_I + (m - 2) \cdot X_S], \dots, [X_I + (m - 1) \cdot X_S]$.

- para a seção m_S

$$C(x, 0, \tau) = C_{in}; \quad x = X_I + (m_S - 1)X_S \quad (2.62)$$

d) No limite inferior do campo:

$$\frac{\partial C(x, L_r, \tau)}{\partial z} = 0; \quad x = 0, \dots, X_C; \quad \tau > 0; \quad (2.63)$$

Para a fase poro, a condição de contorno do lado direito do campo é:

$$C^p(0, z, \tau) = C_{en}^p; \quad z = 0, \dots, L_r; \quad \tau > 0; \quad (2.64)$$

Os dados iniciais em todo o campo de extração são prescritos:

$$C(x, z, 0) = C_0(x, z) \quad \text{e} \quad C_0^p(x, z, 0) = C_0^p(x, z) \quad (2.65)$$

para $x = 0, \dots, X_C$, $z = 0, \dots, L_r$.

Nas bandejas: $\bar{C}_m(0) = C_m^0$ para $m = 2, \dots, m_S$.

4. Fórmulas auxiliares:

A concentração média da micela forte, na saída do extrator, determina-se pela expressão auxiliar

$$C_s = \frac{\int_0^{X_s} C(x, L_r, \tau) dx}{X_s} \quad (2.66)$$

No modelo matemático para a transferência da espécie, da fase poro para a fase “bulk”, também estão incluídas as seguintes fórmulas [Cussler, 1997; Treybal, 1963]:

$$Sh = \alpha Re^\beta Sc^{0,42}$$

onde $\alpha = 2,4$, $\beta = 0,34$ para $0,08 < Re < 125$

$$\alpha = 0,442, \beta = 0,69 \text{ para } 125 < Re < 5000 \quad (2.67)$$

3 ALGORITMO, APLICATIVO E SUAS VERIFICAÇÕES

Neste capítulo, baseado no modelo geral da extração em fluxos CCC, desenvolve-se, no item 3.1, o algoritmo de cálculo e no item 3.2, faz-se uma resolução do problema de uma seção e sua verificação pelo software desenvolvido por Patankar; no item 3.3, foi realizada uma verificação “interna” do modelo acoplado (estudo da influência dos parâmetros da malha sobre os resultados, estabelecimento de um estado estacionário e uma comparação dos resultados obtidos com a lei de conservação de espécie); no item 3.4 é feita uma análise dos dados experimentais obtidos de um extrator real (coleta dos dados experimentais e determinação de parâmetros operacionais; cálculo das concentrações nas bandejas pelo método de estágios ideais e a comparação dos resultados teóricos com os experimentais e o estabelecimento do regime básico); no item 3.5, foi realizado um estudo da influência do condicionamento da matéria-prima nas características principais do modelo.

3.1 Algoritmo de cálculo

No modelo, procura-se determinar a alteração das concentrações $C_m(x, z, \tau)$ e $C_m^p(x, z, \tau)$ em todo o campo de extração, e as concentrações médias nas bandejas $\bar{C}_m(\tau)$, ao longo do tempo. O modelo matemático elaborado inclui equações em derivadas parciais e íntegro-diferenciais ordinárias. Analisando vários esquemas numéricos chega-se à conclusão de que para resolver o sistema de equações, é preferível aplicar o método de linhas [Lambert, 1993] que transforma as equações (2.56 e 2.57) em EDO's, mantendo as derivadas temporais, e discretizando as derivadas espaciais em x e z . O sistema de equações resultantes pode ser resolvido por algum dos métodos conhecidos para a resolução EDO's. Para representar as EDP's pelo método de linhas, inicialmente aplicamos em todo o domínio de integração a malha, “direcionada” e numerada como está mostrado na figura 3.1. Por esta malha, cada seção de percolação (dependente do seu tamanho horizontal) divide-se em N_l , N_h ou N_f camadas verticais e n camadas horizontais. Como resultado, cada célula é representada por dois números (i, j) , com $i = 1 \dots n$ e $j = 1 \dots p$, onde p é o número de células verticais do todo o campo de extração e, é calculado pela fórmula: $p = N_l + (m_s - 2)N_h + N_f$.

Aplicando na malha as equações (2.56 e 2.57), estas transformam-se na seguinte forma:

$$\frac{dC_{ij}}{d\tau} = \frac{V_m(C_{i-1,j} - C_{ij})}{\Delta z} + \frac{E_s}{\Delta z^2}(C_{i-1,j} - 2C_{ij} + C_{i+1,j}) + \tag{3.1}$$

$$\frac{E_s}{\Delta x^2}(C_{i,j-1} - 2C_{ij} + C_{i,j+1}) + \frac{(1-\epsilon_b)}{\epsilon_b} k_f a_p (C_{ij}^p - C_{ij}) + u_h \frac{C_{i,j-1} - C_{ij}}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial C_{ij}^p}{\partial \tau} = - \frac{k_f a_p (C_{ij}^p - C_{ij})}{\epsilon_p + (1-\epsilon_p)E_d^v} + \frac{u(C_{i,j-1}^p - C_{ij}^p)}{\Delta x} \tag{3.2}$$

onde $i = 2, \dots, (n - 1)$ e $j = 2, \dots, (p - 1)$.

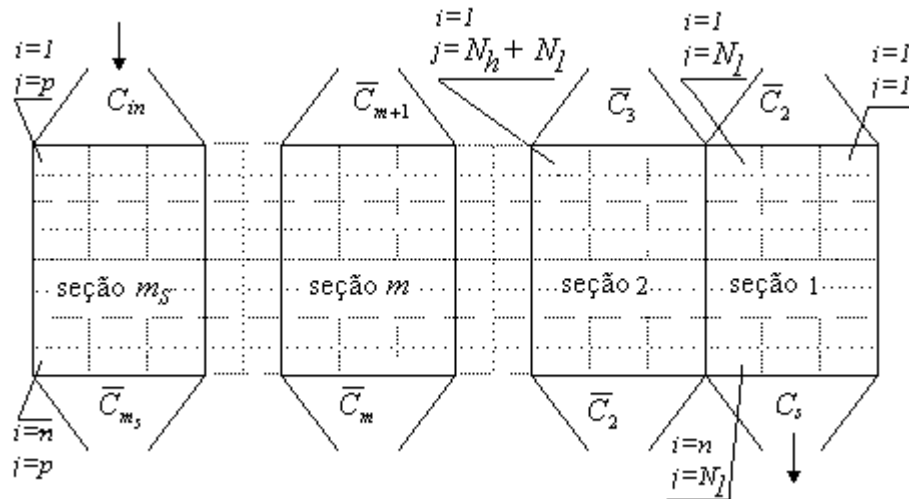


Figura 3.1 - Esquema da numeração das células, das incógnitas C_{ij} e das seções, no campo de extração

As equações para as células nas fronteiras do domínio apresentam-se abaixo na forma final. Das equações íntegro-diferenciais ordinárias (2.58 e 2.59) apresentando os termos integrais pelas somas finitas, obtém-se:

$$\frac{d\bar{C}_m}{d\tau} = \frac{V_m \cdot \Delta x \sum_{j=N_h(m-1)+1}^{N_h \cdot m} C_{n,j} - \bar{C}_m \cdot X_s \cdot V_m}{V_b / (H \cdot \epsilon_b)} ; \quad m = 2 \dots (m_s - 1) \tag{3.3}$$

$$\frac{d\bar{C}_{m_s}}{d\tau} = \frac{V_m \cdot \Delta x \sum_{j=p-N_h+1}^{j=p} C_{n,j} + u_h \cdot \Delta z \sum_{i=1}^n C_{i,p} - \bar{C}_{m_s}(\tau) \cdot X_s \cdot V_m}{V_b / (H \cdot \epsilon_b)} ; \tag{3.4}$$

No total, o sistema apresenta $(2np + m_s)$ equações diferenciais ordinárias. Se por exemplo, houver os seguintes parâmetros: $m_s = 6$, $N_h = 30$ e $n = 30$, será necessário resolver, aproximadamente, 10000 EDO's.

O sistema de EDO's obtido pode ser resolvido por vários métodos numéricos considerando que os valores dos coeficientes das equações permitem aplicar os métodos explícitos mantendo os tamanhos das células Δx , Δz e passo de integração h de acordo com as condições de estabilidade. Para resolver o sistema de EDO's foi utilizado o "Numerical Recipes" [Vetterling et al., 1992; Pressmann, 1995] que exige uma ordem linear de apresentar as equações do sistema de EDO's. Por isso, para aplicar diretamente as subrotinas padronizadas do pacote de resolução das equações (3.1...3.4) é necessário renumerar as variáveis incógnitas C_{ij} , C_{ij}^p , \bar{C}_m , generalizando-as, através de um símbolo Y , com um índice $k = 1 \dots (2np + m_s)$.

No início (figura 3.2), são numeradas as variáveis C_{ij} , com a troca dos símbolos C_{ij} por Y_k as quais são representadas pelos números $k = 1 \dots np$. Após, renumera-se (também, com troca de símbolos) as grandezas C_{ij}^p que ocupam os números $k = (np + 1) \dots 2np$, e finalmente, renumeram-se as concentrações das bandejas.

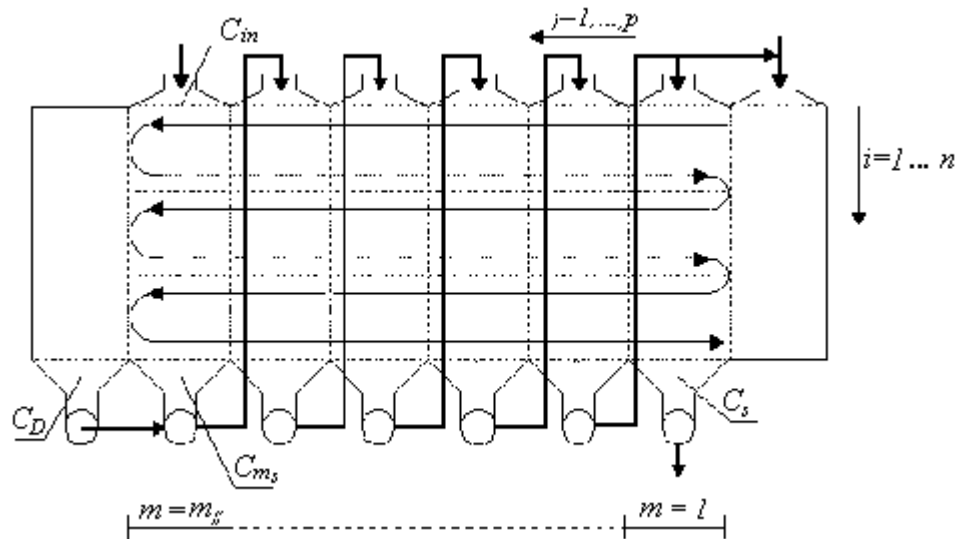


Figura 3.2 - Esquema da numeração das incógnitas Y_k na malha do campo de extração

De acordo com a figura 3.2, na numeração ($C_{ij} \rightarrow Y_k$), o número k é ligado com os índices (i,j) pela fórmula: $k = p(i - 1) + j$, começando com $(i = 1; j = 1)$, e primeiramente, altera-se $j = 1 \dots p$, $(i = 1)$; depois, toma-se $i = 2, j = 1$, e novamente, altera-se j de $1 \dots p$, e

assim por diante. O mesmo procedimento realiza-se na renumeração ($C_{ij}^p \rightarrow Y_k$), pela fórmula:

$k = np + p(i-1) + j$. No resultado, a apresentação das variáveis, por linha é:

$$Y_k = C_{ij}^p; \quad \text{com } k = p \cdot (i-1) + j; \quad \text{quando } i = 1 \dots n; \quad j = 1 \dots p;$$

$$Y_k = C_{ij}^p; \quad \text{com } k = np + p(i-1) + j; \quad \text{quando } i = 1 \dots n; \quad j = 1 \dots p;$$

$$Y_k = \bar{C}_m; \quad \text{com } k = 2np + m; \quad \text{quando } m = 2 \dots m_S;$$

$$Y_k = C_{in}; \quad \text{com } k = 2np + 1.$$

Reescrevendo as equações (3.1, 3.2) tem-se, para as células no interior (figura 3.2) do domínio:

$$\begin{aligned} \frac{dY_k}{d\tau} = & \frac{V_m(Y_{k-p} - Y_k)}{\Delta z} + \frac{E_s}{\Delta z^2}(Y_{k-p} - 2Y_k + Y_{k+p}) + \frac{E_s}{\Delta x^2}(Y_{k-1} - 2Y_k + Y_{k+1}) + \\ & + \frac{(1-\varepsilon_b)}{\varepsilon_b} k_f a_p (Y_{k+np} - Y_k) + u_h \frac{Y_{k-1} - Y_k}{\Delta x} \end{aligned} \quad (3.5)$$

para $k = (p+1) \dots p(n-1)$, além de $k = qp$; e $k = (q-1)p + 1$ para $q = 2 \dots (n-1)$.

$$\frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = - \frac{k_f a_p (Y_k - Y_{k-np})}{\varepsilon_p + (1-\varepsilon_p)E_d^v} + \frac{u(Y_{k-1} - Y_k)}{\Delta x} \quad (3.6)$$

para $k = np + 1 \dots 2np$; além de $k = (q-1)p + 1$; para $q = 1 \dots n$.

As equações para a fase bulk, nas fronteiras do domínio, são mais difíceis de escrever. Entretanto, considerando as condições de contorno (2.59 até 2.63), pode-se escrever uma forma geral que envolve todos os fragmentos da fronteira do domínio (figura 3.3):

$$\begin{aligned} \frac{dY_k}{d\tau} = & \frac{V_m(\Phi_1 - Y_k)}{\Delta z} + \frac{E_s}{\Delta z^2}(\Phi_1 - 2Y_k + \Phi_2) + \frac{E_s}{\Delta x^2}(\Phi_3 - 2Y_k + \Phi_4) + \\ & + \frac{(1-\varepsilon_b)}{\varepsilon_b} k_f a_p (Y_{k+np} - Y_k) + u_h \frac{\Phi_3 - Y_k}{\Delta x} \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde os significados das grandezas Φ estão apresentadas na tabela 3.1.

Para a fase poro, as equações possuem particularidades somente na fronteira direita (figura 3.3, fragmentos 1, 5 e 6), e apresentam-se:

$$\frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = - \frac{k_f a_p (Y_k - Y_{k-np})}{\varepsilon_p + (1 - \varepsilon_p) E_d^v} + \frac{u (C_{en}^p - Y_k)}{\Delta x} \quad (3.8)$$

onde $k = 1 + (q - 1)p + np$; para $q = 1 \dots n$.

Tabela 3.1 – Significados das grandezas Φ , para os fragmentos da fronteira, na equação (3.7)

Fragmentos do domínio	k	Φ_1	Φ_2	Φ_3	Φ_4
1	1	Y_{2n+2}	Y_{k+p}	Y_{2n+2}	Y_{k+1}
2	$2 \dots (p - N_h)$	Y_s	Y_{k+p}	Y_{k-1}	Y_{k+1}
3	$(p - N_h + 1) \dots (p - 1)$	Y_{2n+1}	Y_{k+p}	Y_{k-1}	Y_{k+1}
8	p	Y_{2n+1}	Y_{k+p}	Y_{k-1}	Y_k
4	$q \cdot p$; $q = 2 \dots (n - 1)$	Y_{k-p}	Y_{k+p}	Y_{k-1}	Y_k
5	$1 + q \cdot p$; $q = 2 \dots (n - 2)$	Y_{k-p}	Y_{k+p}	Y_{2n+2}	Y_{2n+2}
6	$(n - 1) p + 1$	Y_{k-p}	Y_k	Y_{2n+2}	Y_{k+1}
7	Np	Y_{k-p}	Y_k	Y_{k-1}	Y_k
9	$((n - 1) \cdot p + 2) \dots (n \cdot p - 1)$	Y_{k-p}	Y_k	Y_{k-1}	Y_{k+1}

Obs: $s = 2np + 2 + (k - 1)/N_h$, onde “/” significa uma divisão por um inteiro.

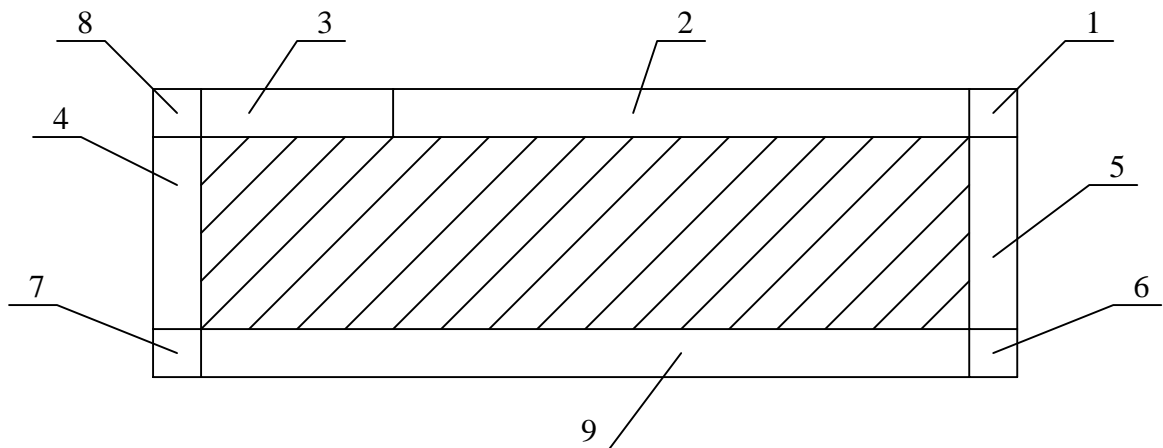



Figura 3.3 – Esquema do domínio de integração

 - representa o interior do domínio

Para as bandejas, as equações (3.3 e 3.4), realizando a renumeração ($\bar{C}_m \rightarrow Y_k$) para $k = (2np + 1) \dots (2np + (m_s - 1))$ transformam-se em:

$$\frac{dY_k}{d\tau} = \frac{\varepsilon_b H X_S V_m}{V_b} \left(\frac{1}{N_h} \left(\sum_{S=S_1}^{S_2} Y_S \right) - Y_k \right) \quad (3.9)$$

com $S_1 = np - p + 1 + (k - 2np - 1)N_h$; $S_2 = np - p + (k - 2np)N_h$, onde $k = (2np + 2) \dots (2np + m_S - 1)$ e em:

$$\frac{dY_k}{d\tau} = \frac{\varepsilon_b H X_S V_m}{V_b N_h} \sum_{S=np-N_h+1}^{np} Y_S + \frac{\varepsilon_b H L_r u_h}{V_b n} \sum_{q=1}^n Y_{(q,p)} - \frac{\varepsilon_b H X_S V_m Y_k}{V_b}; \quad (3.10)$$

onde $k = 2np + m_S$.

De acordo com o algoritmo de cálculo (método de linhas e Runge-Kutta de quarta ordem) foi criado um código escrito em linguagem C++.

3.2 Verificação do esquema numérico escolhido para o “problema de uma seção”

Neste trabalho, não é descrita a fase inicial de testes do aplicativo que durou alguns meses; também não se descrevem todas as fases de verificação, mas destacam-se os seus aspectos mais importantes:

- verificação do esquema numérico no problema de uma seção;
- a influência dos tamanhos da malha nos resultados de cálculo;
- estabelecimento de um estado estacionário para diferentes condições iniciais;
- conservação da espécie no esquema dos fluxos CCC;
- comparação com os dados experimentais coletados do extrator real.

Considerando que a versão acoplada do modelo é complexa, a verificação do esquema numérico, que utiliza o método de linhas com discretização por diferenças finitas, foi realizada para um submodelo de uma seção (item 2.2). Como software padrão, foi escolhido o programa desenvolvido por S. V. Patankar, que tem a vantagem de ser bastante utilizado em pesquisas científicas, e por isso, possui muita segurança. Este software baseia-se no método de volumes finitos [Patanekar, 1980; Versteeg e Malalasekera, 1995 e Ferziger e Peric, 1997]. Esta verificação proporciona a certeza de que se pode desenvolver e verificar o aplicativo para toda a instalação, com o método de linhas.

Simular uma parte do extrator também foi necessário porque proporcionou uma oportunidade de pesquisar separadamente os processos de extração de uma seção de percolação. Desta forma, há certeza que este aplicativo estaria simulando corretamente os processos do ponto

de vista físico-químico. Os dados iniciais utilizados para a verificação estão na tabela 3.2 e são os mesmos para ambos os programas.

O modelo para uma seção inclui duas equações (2.14) e (2.28). Aceita-se que, no início, o campo de extração preenchido de micela (concentração C_{in}) e de matéria-prima (concentração C_{in}^p) são uniformes.

Tabela 3.2 – Dados iniciais para o problema de uma seção

$n = 15$	$p = 10$	$L_r = 1,0 (m)$	$t_p = 500 (s)$	$dt = 10 (s)$
$a_p = 34,28 (m^{-1})$	$d_p = 5 \cdot 10^{-3} (m)$	$\epsilon_b = 0,4$	$\epsilon_p = 0,3$	$XB = 0,5 (m)$
$E_S = 1,3 \cdot 10^{-6} (m^2/s)$	$\mu = 3,2 \cdot 10^{-2} (kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1})$	$\rho = 800 (kg/m^3)$	$C_{en}^p = 0,3$	$C_{en} = 0,1$
$E_d = 0,2032$	$u = 3 (mm/s)$	$V_m = 7,3 (mm/s)$	$C_{in} = 0,1$	$C_{in}^p = 0,3$

Também considera-se que as concentrações na entrada, C_{en}^p e C_{en} (figura 3.4), nos poros da matéria-prima e micela, respectivamente, são constantes e uniformes.

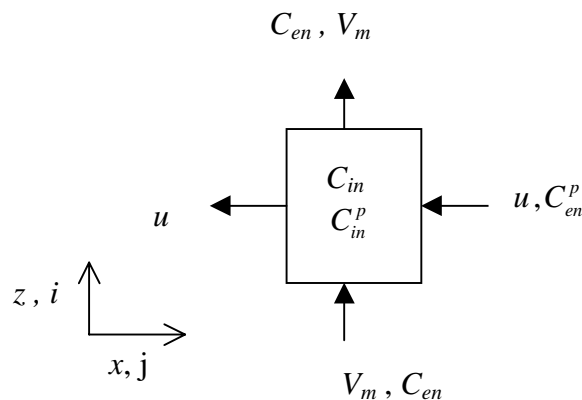


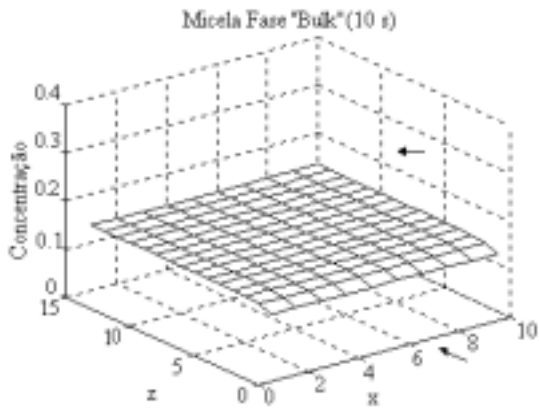
Figura 3.4 – Esquema dos fluxos para uma seção, com $i = 1 \dots n$ e $j = 1 \dots p$.

Nas figuras 3.5 e 3.6 estão mostradas as distribuições das concentrações C e C^p no campo de extração, para vários momentos do tempo. As entradas de matéria-prima ($x = 10, z = 0 \dots 15$) e micela ($x = 0 \dots 10, z = 0$) estão indicadas pelas setas.

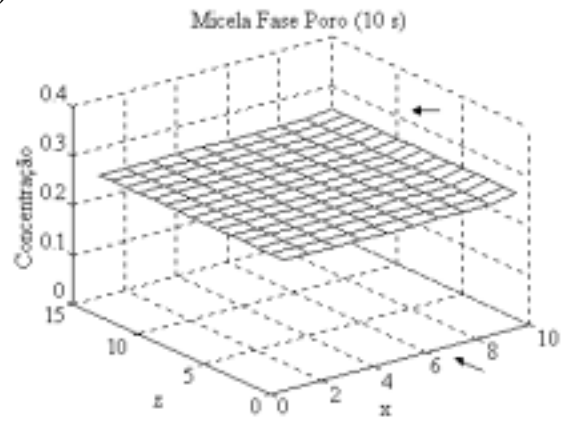
No início, os valores da concentração da espécie na micela, C e C^p são constantes e uniformes (figuras 3.5a e 3.6a). À medida que o tempo passa, as concentrações C e C^p tendem a se aproximar devido aos efeitos de transferência de massa entre as fases bulk e poro. A concentração C , na região da sua entrada, diminui, e na região de entrada da matéria-prima, aumenta. A concentração do óleo na fase poro nestas regiões possui comportamento semelhante

(figuras 3.5b e 3.6b). No tempo 250 s, o campo de extração já é estacionário (figuras 3.5c e 3.6c).

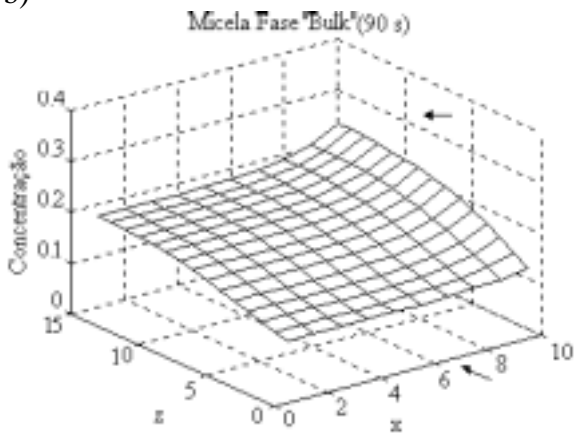
a)



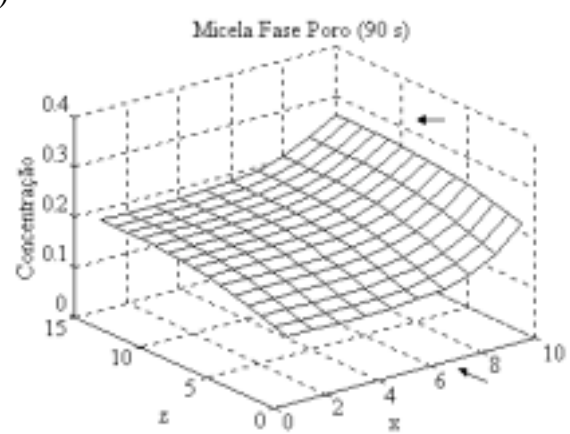
a)



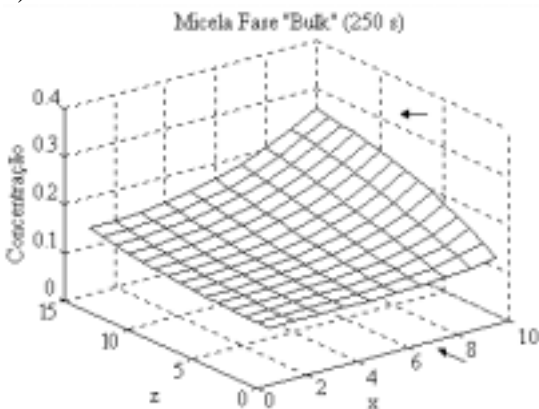
b)



b)



c)



c)

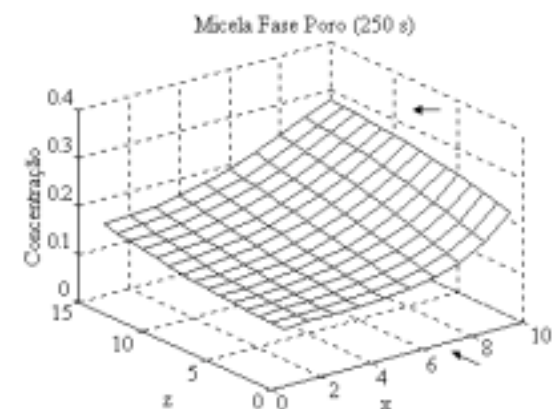


Figura 3.5 – Distribuição das concentrações C de óleo na fase “bulk” para vários momentos do tempo.

Figura 3.6 – Distribuição das concentrações C^p de óleo na fase poro para vários momentos do tempo.

A concentração C tem um mínimo no ponto de entrada da micela ($x = 0; z = 0$), e um máximo, na extremidade oposta da diagonal ($x = 10; z = 15$). A concentração C^p distribui-se pelo campo da mesma forma, possuindo mínimos e máximos nos mesmos pontos.

Utilizando o código de Patankar foram obtidos qualitativamente os mesmos resultados que estão apresentados na tabela 3.3.

Tabela 3.3 – Comparação dos valores das concentrações C obtidas, pelos métodos de linhas e Volumes Finitos.

i				
j	2	5	7	9
14	0,101	0,102	0,105	0,124
	0,101	0,102	0,105	0,124
11	0,103	0,107	0,116	0,156
	0,103	0,107	0,116	0,156
8	0,106	0,114	0,130	0,184
	0,106	0,114	0,129	0,184
5	0,112	0,123	0,145	0,207
	0,112	0,123	0,145	0,207
2	0,118	0,134	0,160	0,227
	0,118	0,134	0,160	0,227

Cada célula desta tabela, representada por um número (i,j) , contém dois valores numéricos; um valor superior que corresponde aos resultados obtidos pelo método de linhas, e um valor inferior obtido pelo método de volumes finitos. Observando os resultados, nota-se o alto grau de concordância entre os resultados produzidos pelos dois modelos.

3.3 Verificação do modelo acoplado pelos critérios “internos”

Neste item, são mostrados os resultados da verificação do modelo de extração de fluxos CCC (desenvolvido no capítulo 2) sob uma visão dos critérios internos, a saber: influência dos tamanhos da malha, conservação da espécie, e o estabelecimento de um único estado estacionário. Os dados iniciais utilizados para estas verificações são apresentados na tabela 3.9.

3.3.1 Influência dos tamanhos da malha e do passo de integração

Na criação de modelos e aplicativos que estão destinados à indústria é importante determinar uma “zona de segurança” da realização das simulações numéricas. Esta zona determina-se pelos tamanhos da malha (neste caso, os parâmetros são: n e N_h) e pelo passo de integração temporal h .

Para problemas simples, estes parâmetros determinam-se matematicamente usando, por exemplo, a condição de Courant [Wrobel et al., 1989]. Mas, conforme Maliska, 1995, quando se trabalha com sistemas de EDP's não lineares, onde se tem delicados acoplamentos (incluindo, no presente caso, as equações íntegro-diferenciais) com condições de contorno complexas, é difícil provar antecipadamente que uma aproximação numérica é estável e convergente. Estas dificuldades ficam maiores se, no esquema numérico, for usado um método de alta ordem de precisão (por exemplo, Runge-Kutta - R-K). Por isso, considerando que o problema é complexo, aceita-se um método de “experimento matemático” para determinar os intervalos seguros de alteração dos parâmetros da malha no domínio de integração e a influência dos parâmetros (N_h , n e h) nas características principais dos processos. Nos cálculos, os números de Courant são os indicadores da estabilidade, e são determinados para as direções verticais (S_v) e horizontais (S_u) pelas fórmulas:

$$S_v = \frac{V_m h}{\Delta z} \quad \text{e} \quad S_u = \frac{uh}{\Delta x} \quad (3.11)$$

onde: $\Delta z = \frac{L_r}{n}$ e $\Delta x = \frac{X_s}{N_h}$. Os resultados (para $E_s = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$) são mostrados na tabela 3.4.

Pode-se destacar os seguintes momentos:

- nos limites de divergência, os números de Courant são quase iguais: $S_v \approx 1,20$ e $S_u \approx 0,65$ independentemente dos tamanhos da malha;
- para a malha fina (F), como era esperado, o passo de integração máximo admissível, $h_m = 10\text{s}$, é menor do que para as malhas básica (B , $h_m = 15\text{s}$) e grossa (G , $h_m = 26\text{s}$);
- a alteração, dentro de uma malha, dos passos de integração nos intervalos: $h = 0,6\text{s} \dots h_m$ quase não influe nas características principais (C_s , e P_{ol}^p);
- ao mesmo tempo, a comparação dos valores de C_s , e P_{ol}^p mostra que as diferenças entre as malhas G e B é notável, e entre B e F , é pequena.

Tabela 3.4 – Influência dos parâmetros N_h , n e h na estabilidade dos cálculos ($E_S = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$).

h	$n=12$ e $N_h=12$ (G)				$n=20$ e $N_h=20$ (B)				$n=30$ e $N_h=30$ (F)			
	$C_s(\%)$	F_{ol} (cm^3/s)	S_v	S_u	$C_s(\%)$	F_{ol} (cm^3/s)	S_v	S_u	$C_s(\%)$	F_{ol} (cm^3/s)	S_v	S_u
0,6	0,3264	85,61	0,03	0,01	0,3195	71,50	0,05	0,02	0,3220	67,84	0,07	0,04
1	0,3264	85,61	0,04	0,02	0,3195	71,50	0,07	0,04	0,3220	67,84	0,11	0,06
2	0,3264	85,61	0,09	0,04	0,3195	71,50	0,15	0,08	0,3220	67,84	0,22	0,12
6	0,3264	85,61	0,27	0,14	0,3195	71,50	0,45	0,24	0,3220	67,84	0,67	0,36
10	0,3264	85,61	0,45	0,24	0,3195	71,50	0,75	0,40	0,3222	67,84	1,12	0,60
11	0,3264	85,61	0,49	0,26	0,3195	71,50	0,82	0,44	div.	div.	1,24	0,66
15	0,3264	85,61	0,67	0,36	0,3195	71,50	1,12	0,60	-	-	-	-
16	0,3264	85,61	0,72	0,38	div.	div.	1,20	0,64	-	-	-	-
19	0,3264	85,61	0,85	0,45	-	-	-	-	-	-	-	-
22	0,3264	85,61	0,99	0,52	-	-	-	-	-	-	-	-
26	0,3264	85,61	1,17	0,62	-	-	-	-	-	-	-	-
27	div.	div.	1,21	0,65	-	-	-	-	-	-	-	-

Com o objetivo de determinar a influência do coeficiente de dispersão nos limites da estabilidade, foram realizados os cálculos para as mesmas malhas G , B e F variando de $E_S = 10^{-6}$... 10^{-4} (tabela 3.5). Na análise dos resultados, também foi envolvido o número de difusão do

$$\text{pela expressão: } S_d = \frac{E_S \Delta t}{\Delta x^2} = \frac{E_S \Delta t}{\Delta z^2}$$

É evidente a influência de E_S nos limites da estabilidade, a saber: para $E_S = 10^{-4}$, o limite, pelo número de Courant (vertical) é: $S_v = 0,8 \dots 0,94$; para $E_S = 10^{-5}$, o limite é: $S_v = 1,12 \dots 1,20$ e para $E_S = 10^{-6}$, temos: $S_v = 1,20 \dots 1,24$.

Para explicar esta influência, foi realizada a análise de Von Neumann [Santos, 1998] na equação-exemplo:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = -V_m \frac{\partial C}{\partial x} + E_S \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3.12)$$

Escrevendo por diferenças finitas (forma explícita), obtém-se:

$$\frac{C_k^{n+1} - C_k^n}{\Delta t} = \frac{V_m}{\Delta x} (C_{k-1}^n - C_k^n) + \frac{E_S}{\Delta x^2} (C_{k-1}^n - 2C_k^n + C_{k+1}^n) \quad (3.13)$$

onde k é o número das células (discretização espacial) e n é o número que representa o momento na discretização temporal.

Tabela 3.5 – Limites na estabilidade dos cálculos para diferentes E_S .

$E_S = 10^{-4}$	$n = 12$ e $N_h = 12$ (G)		$n = 20$ e $N_h = 20$ (B)		$n = 30$ e $N_h = 30$ (F)	
	$h_b = 2$	$h_{m+1} = 21$	$h_b = 2$	$h_{m+1} = 11$	$h_b = 2$	$h_{m+1} = 7$
S_v	0,09	0,94	0,15	0,82	0,22	0,79
S_u	0,006	0,50	0,08	0,44	0,12	0,42
S_d	0,0072	0,075	0,02	0,11	0,045	0,15
C_s	0,3217	-	0,3152	-	0,3179	-
F_{ol} (cm^3/s)	85,48	-	71,42	-	67,80	-
$E_S = 10^{-5}$	$n = 12$ e $N_h = 12$		$n = 20$ e $N_h = 20$		$n = 30$ e $N_h = 30$	
	$h_b = 2$	$h_{m+1} = 26$	$h_b = 2$	$h_{m+1} = 16$	$h_b = 2$	$h_{m+1} = 10$
S_v	0,09	1,17	0,15	1,20	0,22	1,12
S_u	0,06	0,62	0,08	0,64	0,12	0,60
S_d	0,00072	0,0093	0,002	0,016	0,0045	0,022
C_s	0,3260	-	0,3191	-	0,3260	-
F_{ol} (cm^3/s)	85,59	-	71,47	-	54,76	-
$E_S = 10^{-6}$	$n = 12$ e $N_h = 12$		$n = 20$ e $N_h = 20$		$n = 30$ e $N_h = 30$	
	$h_b = 2$	$h_{m+1} = 27$	$h_b = 2$	$h_{m+1} = 16$	$h_b = 2$	$h_{m+1} = 11$
S_v	0,09	1,21	0,15	1,20	0,22	1,24
S_u	0,06	0,65	0,08	0,64	0,12	0,66
S_d	0,000072	0,00097	0,0002	0,0016	0,00045	0,0025
C_s	0,3264	-	0,3195	-	0,3222	-
F_{ol} (cm^3/s)	85,61	-	71,49	-	67,84	-

Aproximando a solução pela forma [Santos, 1998], tem-se:

$$C_k^n = U^n e^{ik\theta} \tag{3.14}$$

onde $i = \sqrt{-1}$, U^n é a amplitude no instante n , $\theta = \frac{2\pi \Delta x}{\lambda}$ é o ângulo de fase (sendo λ o comprimento de onda), obtém-se:

$$\frac{U^{n+1} e^{ik\theta} - U^n e^{ik\theta}}{\Delta t} = \frac{V_m}{\Delta x} (U^n e^{i(k-1)\theta} - U^n e^{ik\theta}) + \frac{E_S}{\Delta x^2} (U^n e^{i(k-1)\theta} - 2U^n e^{ik\theta} + U^n e^{i(k+1)\theta}) \quad (3.15)$$

Designando $S_v = \frac{V_m \Delta t}{\Delta x}$ e $S_d = \frac{E_S \Delta t}{\Delta x^2}$, e dividindo por $e^{ik\theta}$, obtemos:

$$U^{n+1} - U^n = S_v U^n (e^{-i\theta} - 1) + S_d U^n (e^{i\theta} - 2 + e^{-i\theta}) \quad (3.16)$$

Introduzindo um fator de ampliação ou transição, $G = \frac{U^{n+1}}{U^n}$, que deve ser $|G| \leq 1$ e considerando $e^{i\theta} + e^{-i\theta} = \cos \theta$, resulta

$$U^{n+1} = U^n [1 + S_v (e^{-i\theta} - 1) - 2S_d (1 - \cos \theta)] \quad (3.17)$$

obtendo a condição de estabilidade:

$$|G| = |1 + S_v (e^{-i\theta} - 1) + 2S_d (\cos \theta - 1)| \leq 1 \quad (3.18)$$

Para que o método seja estável é necessário que a solução permaneça limitada. Na análise da desigualdade (3.18) considera-se que S_v e S_d são positivos e θ pode assumir qualquer valor. Então, se $S_v \approx 0$ pela (3.18) pode-se determinar que o limite para S_d é, $S_d \leq 0,5$. Por outro lado, se $S_d \approx 0$, então existe outro limite, $S_v \leq 1$. Esta variante está mais próximo para o caso onde $E_S = 10^{-6}$. Admitindo que $S_d = 0,05$, obtém-se:

$$|G| = |1 + S_v (e^{-i\theta} - 1) - 0,2| = |0,8 - S_v + S_v e^{-i\theta}| \leq 1 \quad (3.19)$$

Neste caso, o limite de S_v torna-se: $S_v \leq 0,9$. Este efeito é observado na tabela 3.5.

A análise acima foi realizada para o esquema de diferenças finitas ou (do ponto de vista do método de linhas) para o esquema explícito de Euler. Mas no algoritmo do modelo do extrator horizontal, foi aplicado o método de R-K de quatro passos e 4ª ordem (clássico). É

conhecido que cada esquema numérico, independentemente das EDO's envolvidas, possui uma região própria de estabilidade absoluta [Lambert, 1993].

Na figura 3.7, são mostradas essas regiões para os métodos de Euler e R-K. Nela observa-se que quanto mais comprido é o trecho do eixo real negativo (ρ), é mais estável o esquema numérico [Houwen, 1996]. Da figura 3.7, pode-se obter:

$$\frac{\rho(R-K)}{\rho(Euler)} \approx \frac{2,8}{2} = 1,4$$

ou seja, o intervalo de estabilidade do método de Runge-Kutta é maior do que o método de Euler. Talvez este resultado possa explicar o aumento do limite de estabilidade numérica $S_v \approx 1,2 > 1$, obtido pelo “experimento matemático” considerando que o sistema de equações do modelo é mais complexo que a equação-exemplo (3.13) utilizado neste item.

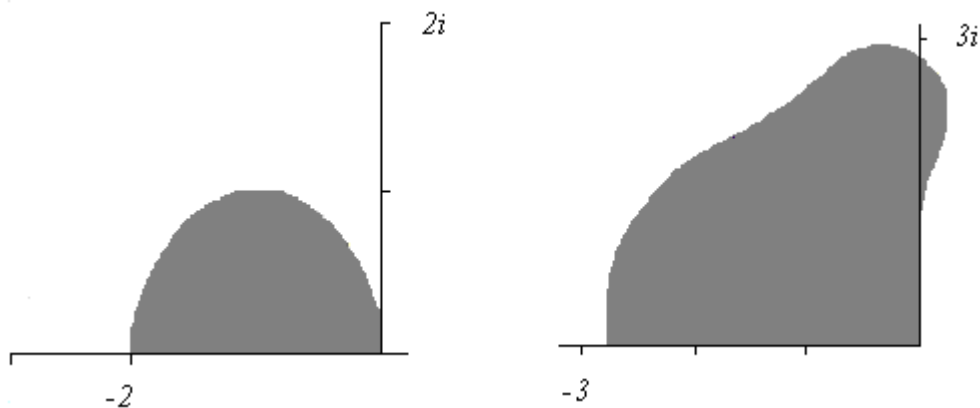


Figura 3.7 – Regiões de estabilidade absoluta para os métodos de Euler e R-K.

3.3.2 Estabelecimento de um estado estacionário único

A análise do esquema físico evidencia que, se os dados de entrada da matéria-prima (M_n e N_T) e do solvente (Q_{so} e C_{in}) são constantes, então, no campo de extração, tem que ser estabelecido um único estado estacionário das distribuições C e C^p , independentemente das suas distribuições iniciais.

Este tipo de verificação do modelo pode ser facilmente realizado por um conjunto de simulações para diferentes estados iniciais do campo de extração deixando os dados iniciais restantes invariáveis. Considerando este aspecto, foram realizadas três simulações, chamadas (condicionalmente):

- Regime “suave” : a distribuição inicial das concentrações C e C^p , pelas seções de percolação, são próximas, isto é, $C_0^p \approx C_0$ (é do tipo escada). Por exemplo, $C_1 = 0,2$ e $C_2 = 0,16$; $C_3 = 0,12$; $C_4 = 0,08$; $C_5 = 0,04$; $C_6 = 0,01$.
- Regime “micela forte”: a distribuição das concentrações iniciais, C e C^p , são uniformes pelas seções e praticamente iguais. Por exemplo, $C_0 = C_0^p \approx 0,1$;
- Regime “industrial”: a distribuição inicial das concentrações C_0 e C_0^p são uniformes por todo o campo de extração e $C_0^p \gg C_0$. Por exemplo, $C_0^p = 0,2$ e $C_0 = 0,01$.

Os resultados destas simulações (tabela 3.6) mostram que as evoluções das concentrações do campo terminam-se num mesmo estado estacionário. Os dados foram obtidos para os mesmos parâmetros de malha (indicado no título da tabela).

Tabela 3.6 – Comparação dos estados estacionários obtidos para os regimes: industrial, suave e forte ($n = 20$, $N_h = 20$, $h = 2$ s)

Regimes	\bar{C}_5	\bar{C}_4	\bar{C}_3	\bar{C}_2	\bar{C}_1	C_s
Industrial	0,0103	0,0298	0,0648	0,127	0,236	0,3195
Suave	0,0104	0,0301	0,0652	0,127	0,236	0,3199
Forte	0,0103	0,0298	0,0657	0,127	0,236	0,3195

3.3.3 Conservação da espécie no extrator

No regime estacionário, a soma das vazões da espécie que entram no extrator tem que ser igual à soma das vazões da espécie que saem do extrator. A vazão volumétrica da espécie que entra (dentro da matéria-prima) através do tubo 1 e pelo tubo 2 (figura 2.1) é dado por:

$$Q_+^{es} = \frac{N_T \cdot M_n}{\rho_{es}} + C_{in} Q_{so} \tag{3.20}$$

O extrator possui duas saídas:

- a principal é pela saída 3 (figura 2.1), com vazão:

$$Q_{es} = Q_s \cdot C_s \tag{3.21}$$

- e a secundária junto com farelo branco, pelo tubo 4 (figura 2.1), com vazões F_{ol}^N (perda de óleo na fase sólida) e F_{ol}^P (perda de óleo na fase poro do farelo).

Então, baseado na lei de conservação, tem-se:

$$Q_+^{es} = Q_{es} + F_{ol}^N + F_{ol}^P \quad (3.22)$$

Na simulação numérica para regime básico, tem-se:

$$C_s = 0,3195, \quad Q_s = 6,915 \text{ L/s}, \quad Q_{es} = 2,16 \text{ L/s}, \quad F_{ol}^N \approx 0,024 \text{ L/s} \text{ e } F_{ol}^P \approx 0,033 \text{ L/s}$$

Então, pela equação (3.22) obtém-se:

- lado esquerdo $Q_+^{es} \approx 2,266 \text{ L/s}$;

- lado direito $Q_{es} + F_{ol}^N + F_{ol}^P \approx 2,267 \text{ L/s}$,

ou seja, observa-se que existe uma boa concordância (0,1 %) entre os resultados teóricos obtidos com a lei de conservação.

3.4 Comparação com dados experimentais e estabelecimento de um regime básico

O extrator “De Smet” é um sistema complexo e, por isso, o seu modelo matemático foi criado com o uso de hipóteses simplificadoras e alguns parâmetros imprecisos. Por isso, fazer a verificação do modelo com dados experimentais torna-se importante na medida em que a análise das informações obtidas propicia a identificação do modelo.

Os modelos contemporâneos dos processos em extratores são baseados principalmente no método de estágios (ME) com uso de vários coeficientes empíricos [Karnofski, 1986; Abraham et al, 1988]. Mas o modelo desenvolvido nesta tese é fenomenológico e, por isso, para utilizá-lo, é necessário conhecer outros coeficientes para modelar os fenômenos que ocorrem no extrator. E, considerando que este modelo é original, é difícil encontrar na bibliografia as informações sobre estes parâmetros. Por exemplo, no único modelo fenomenológico dedicado ao problema da extração de óleo vegetal [Majumdar et al., 1995] foram encontrados alguns valores, tais como: E_d , d_p , ε_p , ε_b , D_{AB} . Porém, ainda faltam alguns parâmetros, tais como: E_S , c_w , u_h , Q_{so} e ρ_s .

Então, nesta etapa, é necessário:

- comparar os resultados numéricos com os dados experimentais;

- usando os mesmos dados experimentais e dados bibliográficos, determinar os parâmetros operacionais que faltam (com o objetivo de estabelecer os dados iniciais para o regime básico - regime utilizado para as simulações numéricas baseadas em dados obtidos do extrator real).

3.4.1 Coleta de dados experimentais e determinação dos parâmetros operacionais

Os dados experimentais foram coletados na indústria do Grupo Zaffari (Passo Fundo – RS), quando o extrator funcionava no regime estacionário. O solvente é hexano, a matéria-prima são flocos expandidos de soja. A figura 3.8 mostra o esquema simplificado do extrator instalado na empresa com os respectivos pontos de coleta de dados.

Durante o processo da coleta de dados, foram realizadas as medidas dos seguintes parâmetros e características:

- 1 – Fluxo mássico da soja (toneladas/dia)
- 2 – Concentração inicial mássica do óleo na matéria-prima, N_T .
- 3 – Concentrações mássicas de óleo nas bandejas em cada seção, $g_1 \dots g_5$.
- 4 - Concentração mássica de óleo na micela forte, na saída do extrator, g_s .
- 5 – Concentrações mássicas de óleo, P_{ol} , e do hexano, g_f^{so} no farelo branco, na saída do extrator.
- 6 – Vazão volumétrica da micela forte na saída do extrator, Q_s [L/s].
- 7 – Massa específica da matéria-prima na entrada do extrator, ρ_n [kg/m³]
- 8 – Dimensões geométricas do extrator, $X_S, X_f, X_D, X_I, L_r, H$ [m].

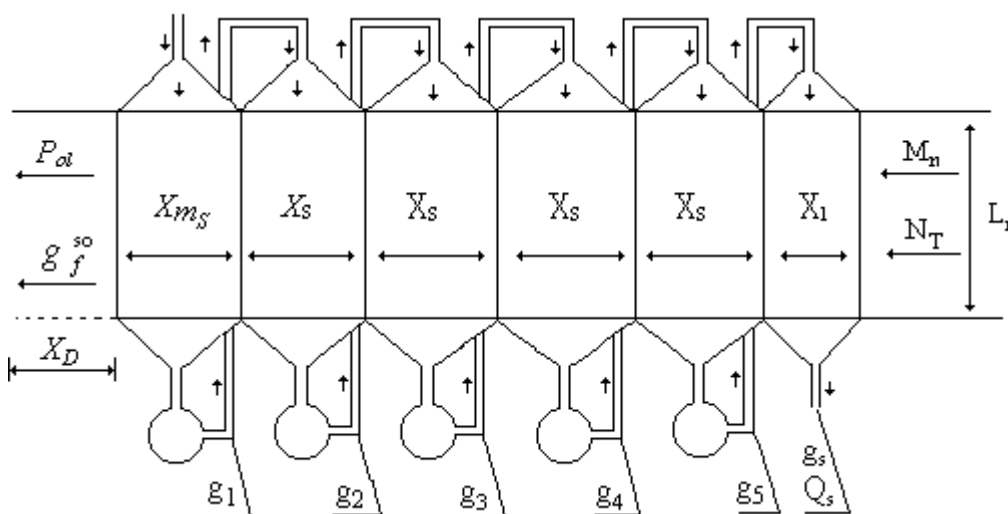


Figura 3.8 – Esquema do campo da extração com pontos de coleta e os tamanhos medidos

As medidas das concentrações da micela foram realizadas no laboratório da empresa, localizado no interior da mesma, com o uso: uma balança digital, uma estufa e Bécker.

Procedimento experimental

- 1º - foi medida a massa do recipiente, numa balança digital, onde posteriormente seria colocada a micela;
- 2º - foi colocado um certo volume de micela dentro do recipiente para uma posterior medida de massa do mesmo.
- 3º - o recipiente com micela foi levado para um secador onde ocorreria a evaporação do solvente.
- 4º - após a evaporação do solvente, a massa do recipiente com óleo somente, foi medida.
- 5º - a concentração foi determinada pela diferença das medidas de massa dos recipientes com micela (óleo e solvente) e do recipiente só com óleo.

Esta sequência de passos foi repetida para todas as amostras retiradas de cada saída de bomba do extrator, e para a saída de micela forte do extrator. Para determinar a concentração mássica de hexano, no farelo branco, na saída do extrator, foi coletada uma amostra de 5g de farelo branco e colocada num Bécker previamente pesado numa balança digital. Então, o Bécker, já com o farelo, foi levado para a estufa, que funciona a uma temperatura de 70°C, e lá ficou por 1,5h (tempo suficiente para ocorrer a evaporação do hexano). Após este tempo, o Bécker com farelo (e possivelmente com resíduo de óleo) foi resfriado à temperatura ambiente, e foi pesado novamente, na mesma balança. A diferença de massa entre as duas medidas, é a massa de hexano que ficou dentro da matéria-prima após o processo de extração. Posteriormente, o Bécker foi colocado novamente na estufa e aquecido até uma temperatura de 120°C durante um tempo de 1,5h para a evaporação do óleo. Então, o Bécker foi resfriado até a temperatura ambiente e foi novamente colocado na balança. A diferença de massa indicada pela balança representa a massa de óleo residual que estava dentro do farelo após o processo de extração (ou seja, é a massa de óleo perdido). As medidas geométricas do extrator foram medidas com uma trena de 20 m de comprimento.

As massas específicas do óleo, ρ_{ol} , 910 kg/m³ e do hexano, ρ_{he} , 680 kg/m³ foram encontradas em [Othmer et al, 1955]; Os resultados obtidos nas medições encontram-se na tabela 3.7.

Baseado nos dados desta tabela, foram calculados alguns parâmetros usados como dados iniciais para o código (M_n , Q_{so} , ϵ_b , ϵ_p , u e c_w) e algumas características para a comparação (C_s e \bar{C}_m).

Tabela 3.7 Dados experimentais coletados no extrator “De Smet”

$X_S (m)$	$X_I (m)$	$X_f (m)$	$X_D (m)$	$L_r (m)$
2,00	1,30	1,37	2,60	2,00
$H (m)$	$\rho_{ol} (kg/m^3)$	$\rho_{so} (kg/m^3)$	$\rho_n (kg/m^3)$	m_S
2,20	910	680	520	6
$N_T (\%)$	$g_s (\%)$	$g_5 (\%)$	$g_4 (\%)$	$g_3 (\%)$
21,86	37,7	31,43	21,85	10,97
$g_2 (\%)$	$g_1 (\%)$	$P_{ol} (\%)$	$g_f^{so} (\%)$	$g_{in} (\%)$
3,54	0,85	0,89	24	0,1

Fonte: Extrator “De Smet” do grupo Zaffari.

Considerando que $g_s^{so} = 1 - g_s$, podemos determinar $\bar{\rho}_s$ (densidade da micela na saída do extrator) pela relação:

$$\frac{1}{\bar{\rho}_s} = \frac{g_s}{\rho_{ol}} + \frac{g_s^{so}}{\rho_{so}} \quad (3.23)$$

Substituindo os valores, recebemos:

$$\frac{1}{\bar{\rho}_s} = \frac{0,3766}{910} + \frac{0,6234}{680} = 0,001306 \Rightarrow \bar{\rho}_s = 765,7 \text{ kg} / \text{m}^3 \quad (3.24)$$

Então, a sua concentração volumétrica, é determinada por:

$$C_s = \frac{g_s}{\rho_{ol}} \bar{\rho}_s = \frac{0,3766}{910} 765,7 = 0,3169 \text{ (31,69\%)} \quad (3.25)$$

Sabendo Q_s e $\bar{\rho}_s$ pode-se determinar a vazão mássica da micela concentrada (M_{mis}^u):

$$M_{mis}^u = Q_s \bar{\rho}_s = \frac{25000 \text{ l/h} \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{l} \cdot 765,7 \text{ kg}/\text{m}^3}{3600 \text{ s/h}} = 5,317 \text{ kg}/\text{s} \quad (3.26)$$

Daqui obtém-se a vazão de óleo (M_{ol}^u) e do hexano (M_{so}^u) na saída 3 (figura 2.1):

$$M_{ol}^u = g_s M_{mis}^u = 0,3766 \cdot 5,317 = 2,002 \text{ kg/s} \quad (3.27)$$

$$M_{so}^u = M_{mis}^u - M_{ol}^u = 5,317 - 2,002 = 3,315 \text{ kg/s} \quad (3.28)$$

Através dos dados experimentais disponíveis, pode-se determinar a vazão de matéria-prima (M_n) aplicando a equação do balanço de óleo no extrator junto com as seguintes hipóteses:

- o solvente na entrada do extrator não contém óleo;
- a matéria-prima (flocos expandidos) perde dentro do extrator, somente óleo;
- o valor P_{ol} é determinado experimentalmente quando o solvente já foi totalmente evaporado do farelo branco.

Com base nestas hipóteses, obtém-se para a vazão de óleo no farelo, depois da evaporação do hexano:

$$\frac{P_{ol} M_n (1 - N_T)}{(1 - P_{ol})} \quad (3.29)$$

Então, o balanço do óleo pode ser escrito da seguinte forma:

$$M_n N_T = M_{mis}^u g_s + \frac{P_{ol} M_n (1 - N_T)}{(1 - P_{ol})} \quad (3.30)$$

Resolvendo para M_n :

$$M_n = \frac{(1 - P_{ol}) M_{mis}^u g_s}{N_T (1 - P_{ol}) - P_{ol} (1 - N_T)} \quad (3.31)$$

No lado direito da fórmula (3.21) todas as grandezas são determinadas, então:

$$M_n = \frac{0,9911 \cdot 2,002}{0,2186 \cdot 0,9911 - 0,0089 \cdot 0,7814} = \frac{1,9842}{0,2099} = 9,451 \text{ kg/s} \quad (3.32)$$

A vazão da matéria-prima esgotada, sem hexano e com óleo perdido ($M_{n,ol}^s$) é determinada:

$$M_{n.ol}^s = M_n - M_{ol}^u = 9,451 - 2,002 = 7,449 \text{ kg/s} \quad (3.33)$$

A vazão de hexano na saída da matéria-prima (M_{so}^{DT}) pode ser determinado por

$$\frac{M_{so}^{DT}}{M_{n.ol}^s + M_{so}^{DT}} = g_f^{so} \quad (3.34)$$

de onde obtém-se:

$$M_{so}^{DT} = \frac{g_f^{so} \cdot M_{n.ol}^s}{1 - g_f^{so}} = \frac{0,24 \cdot 7,449}{0,76} = 2,352 \text{ kg/s} \quad (3.35)$$

Pelo esquema do extrator (figura 2.1), o hexano está circulando no extrator, saindo do campo de extração para o DT e para o vaporizador, entrando novamente no extrator pelo tubo 2, quase sem perdas. A vazão volumétrica de hexano, na saída do extrator é dada pela fórmula:

$$q_s = \frac{M_{so}^{\Sigma}}{\rho_{so}} = \frac{M_{so}^{DT} + M_{so}^u}{\rho_{so}} = \frac{(2,352 + 3,315) \text{ kg/s}}{680 \text{ kg/m}^3} = \frac{5,669}{680} = 8,334 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s} \quad (3.36)$$

Para avaliar as porosidades são propostas as seguintes considerações:

a) Durante o cozimento da soja (preparação da matéria-prima) a massa de soja não se perde e concentra-se (junto com o óleo) na fase sólida e a massa específica desta fase (ρ_s) é igual a massa específica da soja (ρ_{sj}). Neste caso, tem-se a equação:

$$\rho_{sj} (1 - \varepsilon_b) (1 - \varepsilon_p) = \rho_s \quad (3.37)$$

b) Considerando que na vazão de farelo branco (saída 4, figura 2.1), o hexano é concentrado na fase poro, e a fase sólida (ρ_s') perde alguma quantidade de óleo (ou seja, $\rho_s' < \rho_s$), pode-se escrever a relação entre as vazões:

$$\frac{Q_{so}^{DT}}{Q_{n,ol}^s} = \frac{\frac{M_{so}^{DT}}{\rho_{so}}}{\frac{M_{n,ol}^s (1 - P_{ol})}{\rho_s'}} = \frac{\varepsilon_p}{1 - \varepsilon_p} \quad (3.38)$$

Então, de (3.38), obtém-se:

$$\frac{M_{so}^{DT}}{M_{n,ol}^s (1 - P_{ol})} = \frac{\varepsilon_p \rho_{so}}{(1 - \varepsilon_p) \rho_s'} \quad (3.39)$$

É conhecido [Brooker, 1969] que a massa específica da soja $\rho_{sj} \approx 1,25 \text{ g/cm}^3$, e a massa específica ρ_s' , depois da extração de óleo, torna-se, aproximadamente, $\rho_s' \approx 1,10 \text{ g/cm}^3$.

Então, pela equação (3.39), pode-se avaliar a porosidade ε_p :

$$\frac{2,352}{7,449(1 - 0,0089)} \approx \frac{\varepsilon_p \cdot 680 \text{ kg/m}^3}{(1 - \varepsilon_p) 1100 \text{ kg/m}^3} \quad (3.40)$$

que resolvendo, obtém-se:

$$\frac{\varepsilon_p}{(1 - \varepsilon_p)} \approx 0,515 \Rightarrow \varepsilon_p \approx \frac{0,515}{1,515} = 0,34 \quad (3.41)$$

A porosidade “bulk” ε_b é obtida utilizando a fórmula (3.37),

$$\frac{521 \text{ kg/m}^3}{1250 \text{ kg/m}^3} = (1 - \varepsilon_b)(1 - 0,34) \quad (3.42)$$

$$0,4168 = (1 - \varepsilon_b)0,66 \Rightarrow \varepsilon_b = 0,37$$

Comparando estes resultados ($\varepsilon_b = 0,37$ e $\varepsilon_p = 0,34$) com os dados apresentados por [Majumdar et al., 1995] ($\varepsilon_b = 0,4$ e $\varepsilon_p = 0,3$), constata-se uma concordância satisfatória entre eles, mas observa-se que, por causa da incerteza no valor de ρ'_s , a avaliação das porosidades não é exata.

A velocidade u é determinada pela lei da continuidade para a vazão M_n :

$$u = \frac{M_n}{L_r H \rho_n} = \frac{9,451 \text{ kg/s}}{2 \text{ m} \cdot 2,2 \text{ m} \cdot 521 \text{ kg/m}^3} = 0,00412 \text{ m/s} = 4,12 \text{ mm/s} \approx 4 \text{ mm/s} \quad (3.43)$$

Nesta avaliação, usa-se a hipótese de que a velocidade vertical da micela na fase “bulk”, V_m , é constante em todas as seções, dependendo apenas das propriedades hidráulicas da matéria-prima (e não das áreas transversais das seções), da massa específica e da viscosidade da micela. Então tem-se:

$$Q_{so} = X_f H \varepsilon_b V_m \quad \text{e} \quad Q_\Sigma = X_s H \varepsilon_b V_m \quad (3.44)$$

onde X_s é a largura das seções internas de percolação [m] .

Fazendo,

$$\frac{Q_\Sigma}{Q_{so}} = \frac{X_s}{X_f} = \frac{2,00}{1,37} = 1,46 \quad (3.45)$$

$$Q_\Sigma = 1,460 \cdot Q_{so} = 1,460 \cdot 8,334 \cdot 10^{-3} = 12,17 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s} \quad (3.46)$$

Utilizando a fórmula, resulta:

$$Q_D = Q_\Sigma - Q_{so} = 12,17 \cdot 10^{-3} - 8,334 \cdot 10^{-3} = 3,84 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s} \quad (3.47)$$

e, da equação 2.31, pode-se determinar a velocidade de arraste da micela na direção horizontal , u_h , pela seguinte relação:

$$u_h = \frac{Q_D}{HL_r \varepsilon_b} = \frac{3,84 \cdot 10^{-3}}{2,2 \cdot 2 \cdot 0,37} = 2,36 \text{ mm/s} \quad (3.48)$$

e daqui, pode-se determinar o coeficiente de arraste da micela na direção horizontal:

$$c_w = \frac{u_h}{u} = \frac{2,358}{4,120} = 0,572 \approx 0,6 \quad (3.49)$$

O diâmetro d_p das partículas da matéria-prima utilizado na fórmula (1.83). Foi encontrado em Majumdar et al., 1995, ($d_p = 5 \cdot 10^{-3} \text{ m}$). Através de observações do extrator em funcionamento, o d_p é da mesma ordem, e por isso, aceita-se o valor $d_p = 5 \text{ mm}$.

O valor da constante de equilíbrio entre as fases poro e sólida é determinada habitualmente pela relação entre as concentrações mássicas $E_d = g^N / g^p$. No modelo, a constante é transformada para a forma volumétrica através da relação $E_d^v = C^N / C^p$, obtendo-se o valor médio 0,32.

A área específica de contato entre as fases poro e bulk a_p é determinada indiretamente, fazendo a sua identificação pela fração mássica de óleo perdida no farelo, P_{ol} , executando uma série de simulações numéricas mudando o valor de a_p , mantendo as outras variáveis constantes, até chegar à igualdade: $P_{ol}(\text{teórico}) = P_{ol}(\text{experimental})$.

3.4.2 Cálculo das concentrações nas bandejas pelo método de estágios ideais

Como regra, os processos nos extratores industriais ainda são simulados através do uso de algumas versões do método de estágios (ME) apesar de que nos fluxos CCC há limitações na aplicação deste método [Erickson, 1995; Foust, et al., 1982]. Uma das dificuldades, por exemplo, consiste na determinação da vazão de solvente através dos estágios, pois em cada seção entra uma vazão vertical e uma vazão horizontal. Também é problemático usar a equação, Kremser-Sounders-Brown [Lydersen, 1983], pois ela é aplicada para pequenas parcelas de espécie transferidas entre as fases (em torno de 1%); mas no extrator, estas parcelas são consideráveis (em torno de 30%). Por isso, existe alguma liberdade para estabelecer uma versão do ME, aplicado ao extrator, usando os dados experimentais e introduzindo algumas hipóteses simplificadoras.

A versão que foi implementada nesta tese (com o objetivo de comparar com os dados experimentais e resultados teóricos) é mostrada na figura 3.9, onde: X_i - são as frações mássicas de óleo em flocos (matéria-prima); i - número do n -ésimo estágio; Y_i - frações mássicas de óleo na micela; Q_{so} - vazão volumétrica de hexano (é constante e não se transfere na matéria-prima); M_{ol}^u - vazão mássica constante de matéria-prima na fase sólida (sem óleo); M_i^h - vazão mássica de óleo na micela entre os estágios: $i \rightarrow i + 1$; M_i^s - vazão mássica de óleo (na matéria-prima) entre estágios: $i \rightarrow i - 1$; Q_s e C_s - vazão volumétrica e concentração de óleo em micela, respectivamente, na saída do extrator .

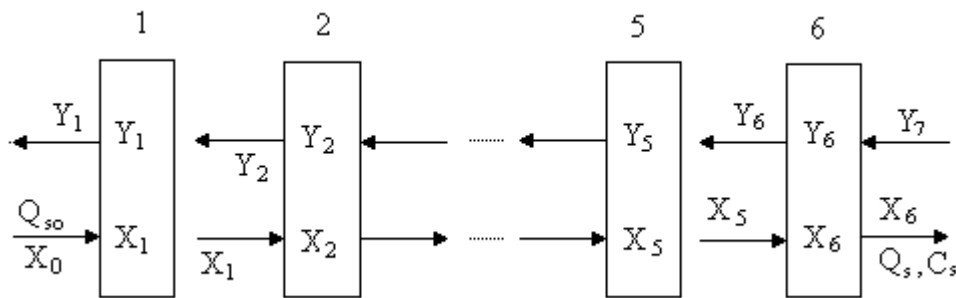


Figura 3.9 – Esquema de estágios ideais para fluxos CCC

Nesta versão do ME, aceita-se as hipóteses que as concentrações nas fases poro e “bulk” são iguais, $C^p = C$, e a relação de equilíbrio entre as frações mássicas Y e X é dada pela fórmula, $Y_i = E_d X_i$. Também aceita-se que os valores das seguintes grandezas: Q_s , E_d , g_s , M_n , N_T correspondem aos dados experimentais e designa-se: $X_6 = g_s$ (fração mássica de óleo na saída do extrator); $Y_7 = N_T$ (teor de óleo na matéria-prima); $M_7^s = M_n N_T$ (vazão mássica de óleo na matéria-prima que entra no extrator), $M_6^h = Q_{es} \rho_{es}$ (vazão mássica de óleo na micela no último estágio). Inicialmente realizam-se alguns cálculos preliminares:

A concentração volumétrica de óleo na micela concentrada:
$$C_s = \frac{g_s}{\rho_{es}} \left/ \left(\frac{g_s}{\rho_{es}} + \frac{1-g_s}{\rho_{so}} \right) \right.$$

A vazão mássica de matéria sólida sem óleo:
$$M_s = M_n (1 - N_T)$$

A vazão volumétrica de óleo com micela concentrada
$$Q_{es} = C_s Q_s$$

A vazão volumétrica de solvente na micela concentrada:
$$Q_{so} = Q_s - Q_{es}$$

A vazão mássica de solvente na micela concentrada:
$$M_{ol}^u = Q_{so} \rho_{so}$$

Agora, podem-se calcular as concentrações nos estágios e vazões entre os estágios:

Estágio 6:

- a concentração de óleo na fase sólida:
$$Y_6 = E_d X_6$$

- a vazão mássica de óleo na fase sólida: $M_6^s = \frac{Y_6 M_{ol}^u}{(1 - Y_6)}$

- a vazão mássica de óleo na micela que sai do estágio 5: $M_5^h = M_6^h + M_6^s - M_7^s$

- a concentração de óleo nesta vazão é: $X_5 = \frac{M_5^h}{(M_{ol}^u + M_5^h)}$

Estágio 5:

- concentração de óleo na fase sólida: $Y_5 = E_d X_5$

- a vazão mássica de óleo na fase sólida: $M_5^s = \frac{Y_5 M_{ol}^u}{(1 - Y_5)}$

.....

Este procedimento é utilizado até chegar ao estágio 1. A tabela 3.8 mostra os resultados obtidos pelo método dos estágios ideais.

Tabela 3.8 – Resultados obtidos pelo método de estágios ideais.

<i>i</i>	0	1	2	3	4	5	6	7
X_i	-	0,0008	0,0021	0,0052	0,0124	0,0299	0,0753	0,2186
Y_i	0,0014	0,0042	0,0107	0,0260	0,0620	0,1494	0,3767	-

3.4.3 Comparação dos resultados teóricos com experimentais e estabelecimento do “regime básico”

Os dados iniciais (experimentais e calculados no item 3.4.1) para comparar os resultados teóricos experimentais apresentam-se na tabela 3.9. Os resultados (as concentrações mássicas nas bandejas $g_s = f(m)$) são mostrados na figura 3.10.

Observa-se que os cálculos realizados pelo ME estão bastante longe dos resultados experimentais. Ao mesmo tempo os resultados obtidos pelo código “DESMET.C” estão próximos aos resultados experimentais.

Para as simulações numéricas apresentadas no capítulo 4 é necessário estabelecer um regime básico. Considerando que os valores ϵ_b e ϵ_p determinados no experimento pelas fórmulas

(3.41 e 3.42) possuem alguma incerteza. Para o regime básico foram aceitos os valores $\varepsilon_b = 0,4$ e $\varepsilon_p = 0,3$ [Majumdar et al, 1995], e conseqüentemente foi alterada a vazão Q_{so} , de 8,34 L/s para 9,0 L/s.

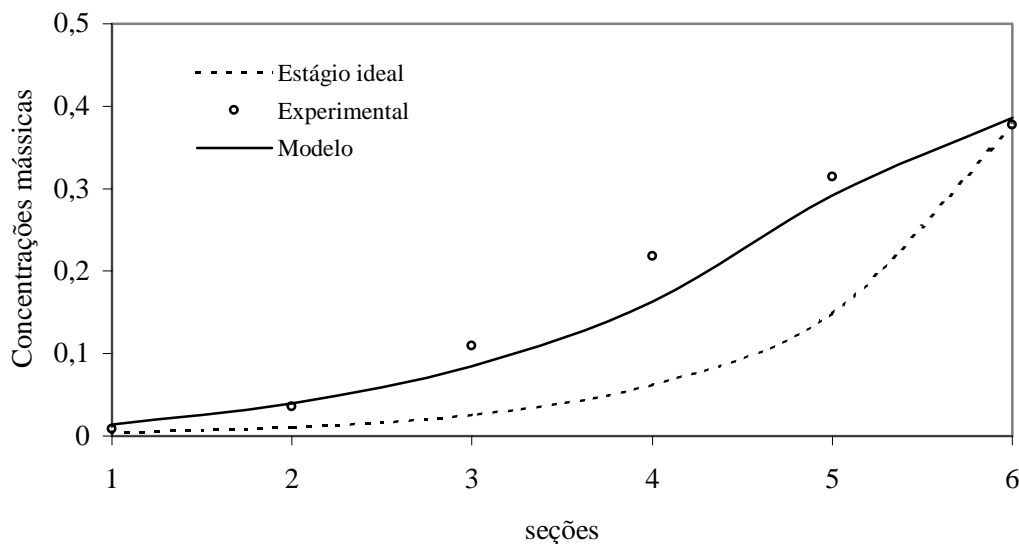


Figura 3.10 – Comparação dos dados experimentais com os resultados numéricos

Tabela 3.9 - Dados iniciais do regime básico utilizados no modelo.

$X_S (m)$	$X_I (m)$	$X_f (m)$	$L_r (m)$	$H (m)$	$V_b (m^3)$
2,00	1,30	1,50	2,00	2,20	0,15
$D_{AB} (m^2/s)$	$E_S (m^2/s)$	$\rho_{es} (kg/m^3)$	$\rho_{so} (kg/m^3)$	$\nu (Pa \cdot s)$	m_s
$1,3 \cdot 10^{-9}$	10^{-5}	910	680	$3,2 \cdot 10^{-4}$	6
$M_n (kg/s)$	$N_T (\%)$	$Q_{so} (L/s)$	$u (m/s)$	$\tau (s)$	n
9,4	21,86	9,00	0,004	20000	20
C_D	C_s	C_{in}	$h (s)$	c_w	N_h
0,01	0,20	0,001	2	0,6	20
$a_p (1/m)$	$d_p (m)$	ε_b	ε_p	E_d^v	-
63	$5,0 \cdot 10^{-3}$	0,4	0,3	0,32	-

Obs.: As grandezas sem unidades são adimensionais.

3.5 Influência de propriedades da matéria-prima nas características principais do modelo

O modelo desenvolvido nesta tese leva em conta as propriedades da matéria-prima e da micela. Ao mesmo tempo, algumas delas foram obtidas de avaliações com algum grau de

incerteza, em particular ε_p , ε_b , a_p , d_p , e u_h . Por isso, foi feito um estudo da sensibilidade das características envolvidas no processo à alteração dos parâmetros ε_p , ε_b , a_p , d_p , e u_h . A tabela 3.10 mostra a influência destes parâmetros nas características da extração, com valores aproximados de $\pm 10\%$ do valor utilizado no regime básico.

Observa-se que quando o valor de ε_b cresce de 10%: - as perdas de óleo (P_{ol}) e a concentração volumétrica do óleo na saída do extrator (C_s), diminuem; - as vazões volumétricas Q_Σ (vazão total no dentro do extrator), Q_D (vazão de micela na zona de drenagem), e Q_s (vazão de óleo na saída do extrator) aumentam. No geral, pode-se concluir que a variação de ε_b influencia as características importantes do processo de extração, e por isso, a determinação do valor apropriado desta propriedade é importante.

Na explicação da alteração das características, pode-se observar que:

- pela equação (2.31), a vazão Q_D é diretamente proporcional a porosidade bulk ε_b .
- pela equação (2.32), a vazão Q_Σ é a soma das vazões de solvente Q_{so} com a vazão Q_D . Logo, é evidente que com o crescimento de Q_D , mantendo Q_{so} constante, Q_Σ aumentará. A vazão Q_s é dada pela equação (2.48), onde pode-se ver que, se a vazão de espécie Q_P é constante, e como Q_Σ cresce, é evidente que Q_s aumentará.
- a vazão Q_s e a concentração C_s se relacionam pela equação (3.21), onde o produto destas duas grandezas deve ser quase constante. Logo, se a vazão Q_s aumenta, a concentração C_s deve diminuir.

Tabela 3.10 – Sensibilidade do modelo às propriedades da matéria-prima

Parâmetro	Alter. (%)	Q_Σ (%)	Q_D (%)	Q_s (%)	C_s (%)	P_{ol} (%)
ε_b	-10	-3,17	-10,0	-3,57	+3,13	+20,92
	+10	+3,25	+10,0	+3,51	-2,94	-17,65
ε_p	-10	0,00	0,00	+3,67	-2,97	-23,53
	+10	0,00	0,00	-3,77	+3,09	+28,90
a_p	-10	0,00	0,00	-0,04	-0,62	+24,80
	+10	0,00	0,00	+0,02	+0,47	-18,48
c_w	-10	-3,17	-10,0	+0,04	0,00	-1,55
	+10	+3,25	+10,0	-0,05	0,00	+1,59
d_p	-10	0,00	0,00	+0,04	+0,34	-13,86
	+10	0,00	0,00	-0,02	-0,34	+14,21

Observa-se na tabela 3.10 que a porosidade ε_b tem uma grande influência nas perdas de óleo, mas o valor das perdas é pequeno, por exemplo, com perdas de óleo típicas de 0,5%, uma alteração de 20% não vai alterar significativamente (perdas de 0,4%). Analisando a equação (2.35) pode-se concluir que quanto maior é o valor de ε_b , o número $(1 - \varepsilon_b)$ se torna menor ocasionando assim, a diminuição das perdas de óleo.

Outro valor de difícil determinação é a porosidade da fase poro ε_p . Observando os resultados mostrados na tabela 3.10 nota-se que com o acréscimo de ε_p , os valores de C_s e P_{ol} aumentam, enquanto que o valor de Q_s diminui. Nota-se também que as variações de ε_p não alteram os valores das vazões Q_Σ e Q_D . Analisando as equações (2.31 e 2.32) é fácil concluir que a porosidade da fase poro não influencia nas vazões Q_Σ e Q_D . A porosidade ε_p tem uma influência grande nas perdas de óleo; analisando a equação (2.35) é fácil verificar que se ε_p aumenta, o número $(\varepsilon_p + (1 - \varepsilon_p) E_d^v)$ aumenta, e por isso, a perda de óleo P_{ol} também aumenta.

Por outro lado, de acordo com esquema do extrator, na saída da segunda seção, a vazão Q_Σ ramifica-se em duas vazões: Q_p (vazão para preencher os espaços ε_p e ε_b , na zona de carregamento) e Q_s . Então, se a porosidade ε_p aumentar, a vazão de preenchimento também aumentará ocasionando uma diminuição da vazão Q_s (equação 2.48). Levando em conta que a vazão total Q_Σ não se altera pela equação (3.21) é fácil concluir que a concentração C_s deve aumentar a fim de manter constante o produto $Q_s C_s$.

O valor de a_p , é um parâmetro importante porque é através dele que as fases poro e “bulk” entram em contato. Por isso, o aumento do valor de a_p aumenta a taxa de transferência de óleo entre estas fases. No resultado, as perdas de óleo são grandemente afetadas por a_p que influi diretamente na alteração da concentração C^p (equação 2.30). Também pode-se observar que para maiores valores de a_p , a concentração C_s , na saída do extrator aumenta muito pouco (equação 2.29). Nota-se que as variações de a_p não afetam os valores das vazões Q_Σ e Q_D , e alteram de forma insignificante a vazão na saída do extrator Q_s . O valor de a_p utilizado nas simulações foi determinado por ajuste, como descrito no item 3.41.

A alteração do valor de d_p produz alterações notáveis nas perdas de óleo P_{ol} . Analisando a equação (1.83) observa-se que, para um valor maior de d_p , o coeficiente de transferência de massa k_f vai ser menor (equações 1.86 e 2.67). Também observa-se que a alteração de d_p afeta os valores das concentrações na saída do extrator C_s de maneira insignificante.

O leito do extrator “De Smet” não tem divisões entre as seções, e por isso há um deslocamento da micela na direção horizontal, com uma velocidade $u_h < u$, provocado pelo

movimento do meio poroso. Observa-se na tabela 3.10, que o coeficiente de arraste c_w , tem um efeito insignificante sobre a concentração C_s , a vazão na saída do extrator Q_s e as perdas P_{ol} , e tem influência significativa nas vazões de micela drenada Q_D e total Q_Σ , que explica-se pelas equações (2.31 e 2.32). Com o aumento de c_w , a velocidade de arraste da micela u_h ($u_h = c_w u$) aumenta, e conseqüentemente, a velocidade relativa entre a micela e o meio poroso, $V_s = \sqrt{V_m^2 + (u - u_h)^2}$, diminui. Esta velocidade é um fator que afeta a transferência de óleo da fase poro para a fase “bulk”. Então, é fácil concluir que o aumento de c_w provoca um crescimento nas perdas de óleo.

Um parâmetro de difícil estabelecimento é o coeficiente de dispersão E_S . Usando a fórmula (1.81) ou figura 1.24 é fácil mostrar que nas condições operacionais do extrator este coeficiente pode variar no intervalo: $E_S = 10^{-6}$ a 10^{-4} [m^2/s]. Por isso é interessante pesquisar a influência deste coeficiente nas características da extração. Para o regime básico foram feitas as simulações variando E_S , e os resultados estão apresentados na tabela 3.11.

É visível que no intervalo de 10^{-6} a 10^{-4} a influência é desprezível. Considerando que para alguns regimes operacionais, a dispersão influi nos processos de extração (por exemplo, o extrator “Crown-Model”), seria bom considerar no modelo o termo difusivo, mesmo que na maioria dos casos, ele tenha um papel pequeno. No regime básico foi estabelecido $E_S = 10^{-5}$.

Tabela 3.11 – Características da extração para diferentes valores de E_S .

E_S	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}
C_s	0,3195	0,3191	0,3152
P_{ol} (%)	0,7149	0,7147	0,7142
C_{en}^p	0,4970	0,4968	0,4956
Q_s (L/s)	6,915	6,915	6,918
Q_Σ (L/s)	13,22	13,22	13,22
C_D (%)	0,4059	0,4068	0,4156

4 SIMULAÇÕES NUMÉRICAS

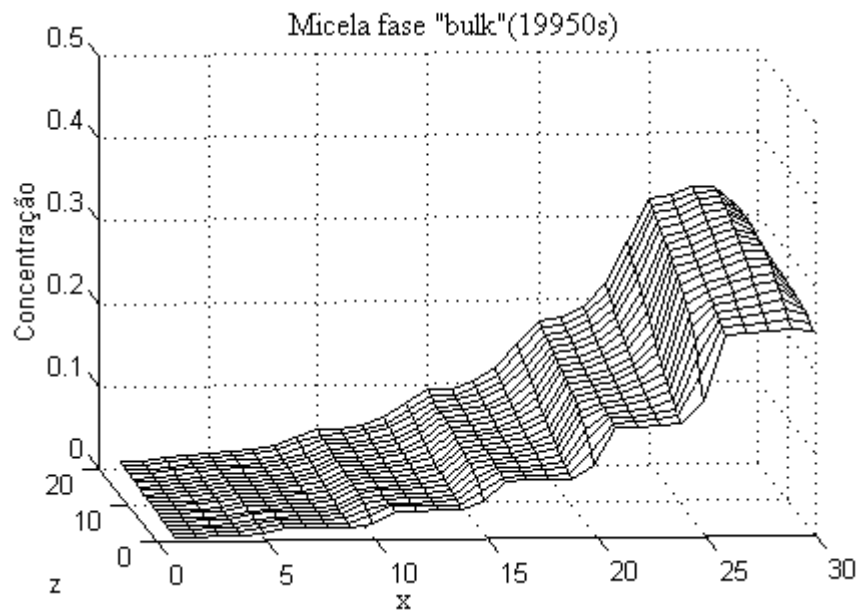
Depois da identificação do modelo matemático pode-se realizar as simulações numéricas para pesquisar as características do extrator em função dos parâmetros do regime, propriedades da matéria-prima ou parâmetros de construção. Neste item, são analisados os regimes estacionário (item 4.1) e transiente (item 4.2); a influência das variações da constante de equilíbrio (item 4.3) e do número de seções do extrator (item 4.4). Também são analisadas as alterações da vazão de matéria-prima (item 4.5) e as características da extração em função do condicionamento da matéria-prima (item 4.6).

4.1 Descrição do regime estacionário

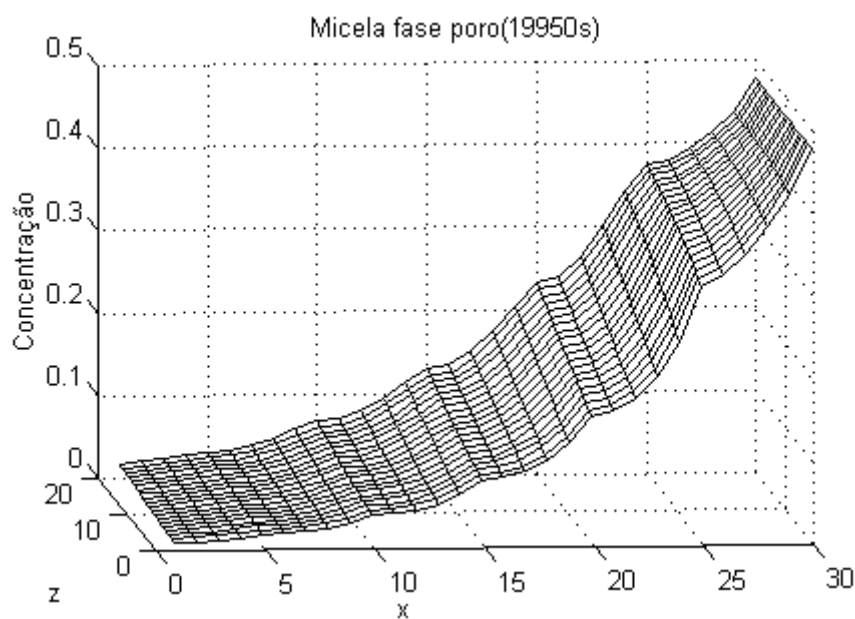
As distribuições C e C^p pelo campo de extração apresentam-se, respectivamente, na figura 4.1, através dos gráficos tridimensionais, onde o comprimento do extrator é representado pela coordenada $x = 0$ a 30 , e a altura, pela coordenada $z = 0$ a 20 . Foram realizadas as simulações numéricas até conseguir um estado estacionário (em tempo real, o extrator leva em torno de duas horas). Observando as distribuições $C = f(x,z)$, pode-se destacar:

- 1 - As concentrações C e C^p aumentam-se, à medida que a micela da zona de entrada do solvente se movimenta para a zona de sua saída;
- 2 - As distribuições C e C^p , dentro de cada seção de percolação e por todo o extrator, não são uniformes;
- 3 - A distribuição C tem a forma de uma escada, e as diferenças entre os degraus surgem nos limites entre as seções. A micela se movimenta de cima para baixo nas seções de percolação;
4. Os degraus aparecem devido às diferenças de concentrações do óleo em micela nas entradas das seções vizinhas; os degraus diminuem por causa da difusão e da transferência de óleo da fase poro.
- 5 - Na zona de saída da micela concentrada revela-se um máximo nas concentrações C e C^p .
- 6 - No campo de concentrações $C^p(x,z)$ não há degraus, mas existem evidentes quebras das derivadas dC^p/dx .
- 7 - As concentrações C^p do óleo na fase poro são mais altas por todo o campo de extração do que as concentrações C .

Todas as propriedades e particularidades do estado estacionário explicam-se levando em consideração as leis físico-químicas envolvidas e pelo esquema de funcionamento da instalação.



a) fase "bulk"



b) fase poro

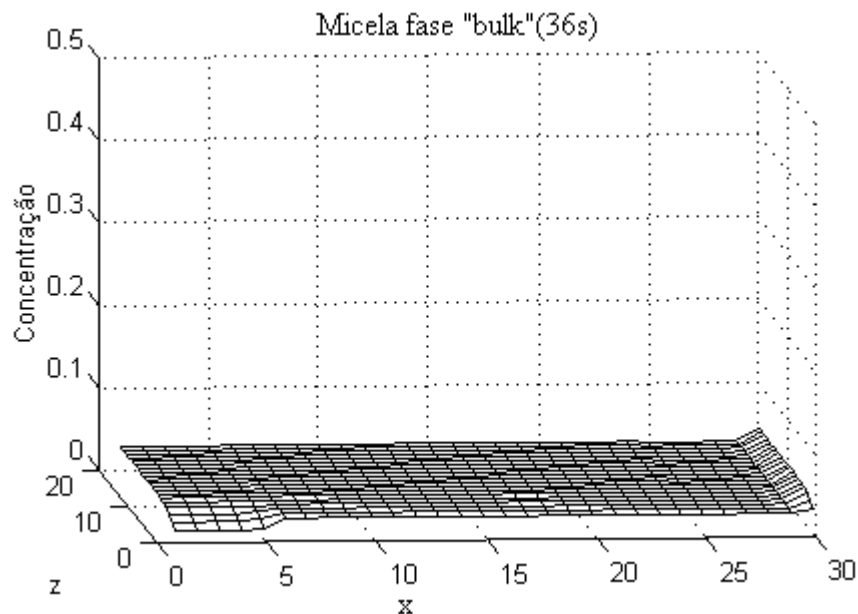
Figura 4.1 - Campo de extração em regime estacionário ($t = 19950$ s)

4.2 Descrição do regime transiente

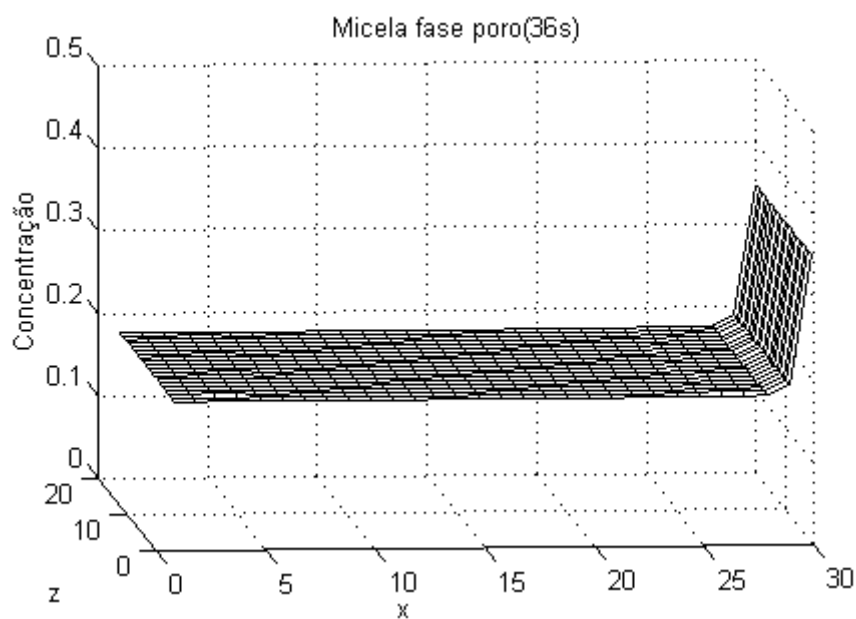
As figuras 4.2 ... 4.5 mostram as evoluções das distribuições das concentrações C (figuras 4.2a ... 4.5a) e das C^p (figuras 4.2b ... 4.5b) com concentrações iniciais $C_0 = 0,01$ e $C^p = 0,20$. Foram usados dados da tabela 3.9 com os parâmetros de cálculo: $n = 20$, $N_h = 20$ e passo de integração, $h = 2$. Nos gráficos tridimensionais, $C = f(x, z)$ e $C^p = f(x, z)$, o campo de

extração corresponde às linhas $x = 0 \dots 30$; $z = 0 \dots 20$ (com as unidades condicionais). A entrada de solvente no extrator corresponde à linha $x = 0 \dots 5$; $z = 0$; e a saída da micela concentrada corresponde à linha $x = 25 \dots 30$; $z = 20$; a entrada de matéria-prima corresponde à linha $x = 30$; $z = 0 \dots 20$; e a sua saída, a linha $x = 0$; $z = 0$ a 20 ; a primeira seção de percolação ocupa a área $x = 25 \dots 30$; $z = 0 \dots 20$; com o topo $x = 25 \dots 30$; $z = 0$.

Nas figuras (4.2a e 4.2b) são mostradas as distribuições C e C^p , no momento $\tau = 36s$.



a) fase "bulk"

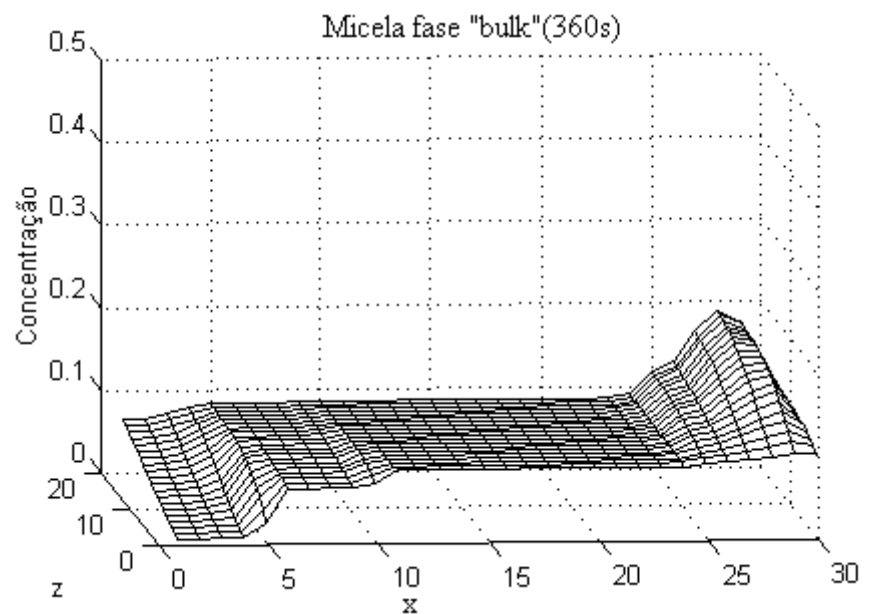


b) fase poro

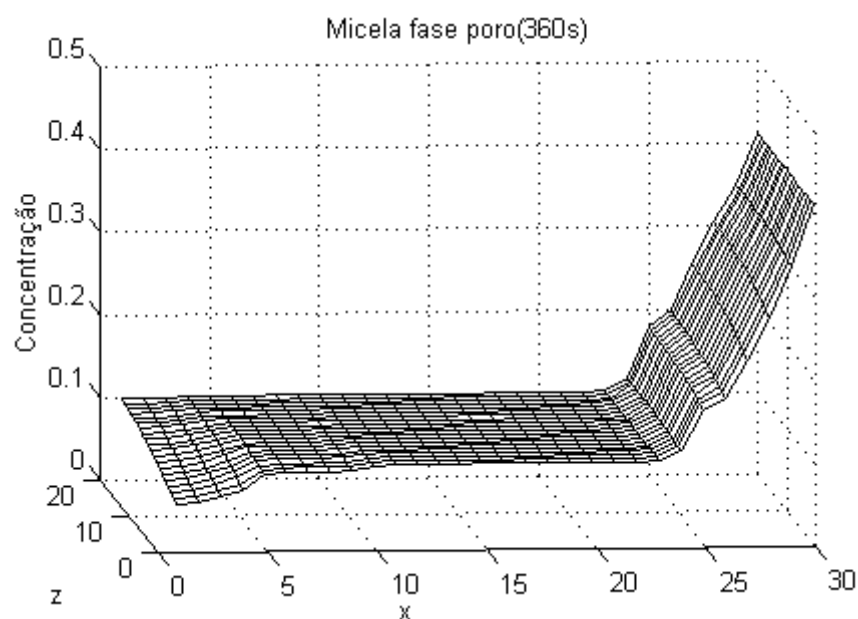
Figura 4.2 - Campo de extração em regime transiente ($t = 36s$)

Na última seção surge uma onda de baixa concentração (causada pela entrada de solvente), formando um degrau entre seções. Na zona da entrada de matéria-prima surgem algumas “deformações” das concentrações C , causadas pelo início do movimento do meio poroso, com alta concentração do óleo. Observa-se uma transferência intensa do óleo entre as fases poro e “bulk” provocando a aproximação das concentrações C ($0,01 \rightarrow 0,03$) e C^p ($0,20 \rightarrow 0,18$) no campo de extração.

Nas figuras (4.3a) e (4.3b) é mostrada a situação no campo de extração no momento $\tau = 360s$.



a) fase “bulk”



b) fase poro

Figura 4.3 - Campo de extração em regime transiente ($t = 360s$)

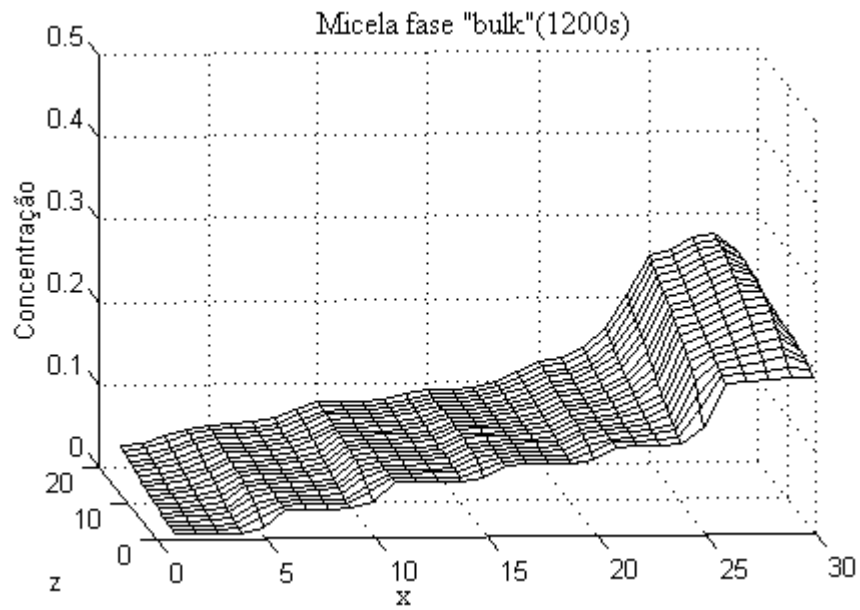
Na última seção observa-se o aprofundamento da “onda” das concentrações C , e o aparecimento de um sinal de onda na seção 5 ($x = 5 \dots 10$; $z = 0 \dots 20$). No fundo da primeira seção, a concentração C tem um máximo (entrada do refinado com micela concentrada). Continuam as aproximações das concentrações C ($0,03 \rightarrow 0,07$) e C^p ($0,20 \rightarrow 0,13$). A superfície plana diminui à medida que o campo evolui. A altura da curva das concentrações C^p na região da entrada do refinado cresce com alguma inclinação, à medida que o meio poroso se desloca pelo leito do extrator. Na última seção observa-se a diminuição da C^p por causa da transferência intensa do óleo para a fase “bulk” (entrada de solvente).

As figuras (4.4a) e (4.4b) mostram as distribuições das concentrações no campo de extração no momento $\tau = 1200s$. Na fase “bulk” já estão formados os degraus entre quase todas as seções; a superfície plana sumiu. Está revelado o máximo da C no fundo da primeira seção. A sua permanência explica-se com a ajuda da figura 2.10. É evidente que no topo e no lado direito da primeira seção ($x = 30$; $z = 0 \dots 20$) entra a micela com a concentração \bar{C}_2 . Mas na saída da seção a concentração $C_s > \bar{C}_2$. Também no lado esquerdo desta seção ($x = 25$; $z = 0 \dots 20$) a concentração C é menor do que C_s . Por isso na linha ($x = 25 \dots 30$; $z = 20$) tem que ter um máximo à medida que o campo se aproxima do estado estacionário. Na distribuição $C^p(x, z)$ é evidente que a frente se torna mais inclinada, e aparecem as quebras das derivadas $\partial C^p / \partial x$, no limite entre primeira e segunda seções. Para explicar esta propriedade é necessário analisar a forma estacionária da equação (2.56):

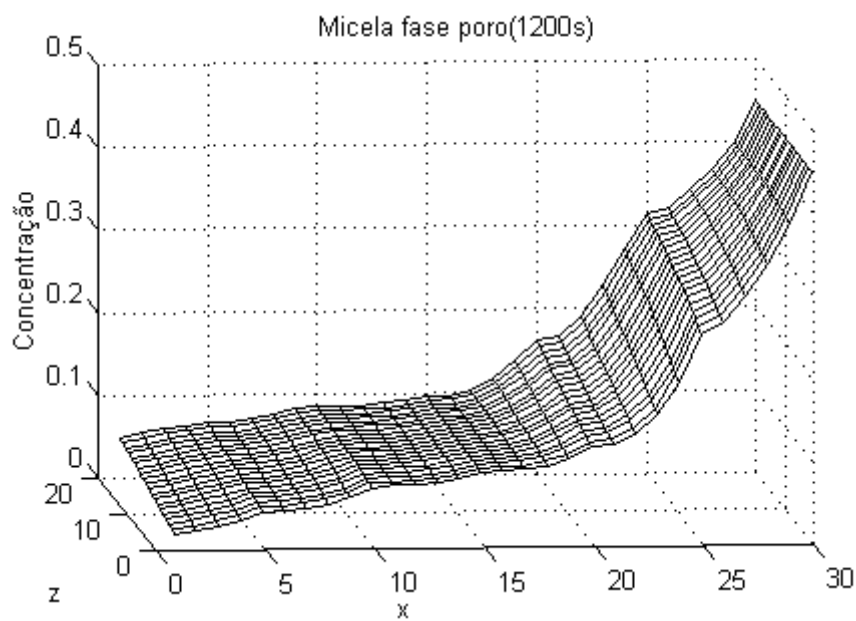
$$u \frac{\partial C^p}{\partial x} = \frac{-k_f a_p (C^p - C)}{\varepsilon_p + (1 - \varepsilon_p) E_d^v} \quad (4.1)$$

Lembrando que nas distribuições $C(x, z)$ são revelados os degraus (figura 4.4a), pode-se observar que, na passagem por um degrau surge uma quebra da derivada $\partial C^p / \partial x$.

No instante $\tau = 2520s$ (figuras 4.5a e 4.5b) já estão estabelecidas as distribuições $C(x, z)$ e $C^p(x, z)$, que caracterizam o estado estacionário: o máximo (que continua aumentado), os degraus entre seções (que se tornam mais suáveis no fundo das seções por causa da difusão do óleo pela fase “bulk”), as quebras das derivadas $\partial C^p / \partial x$ (já observadas entre todas as seções).



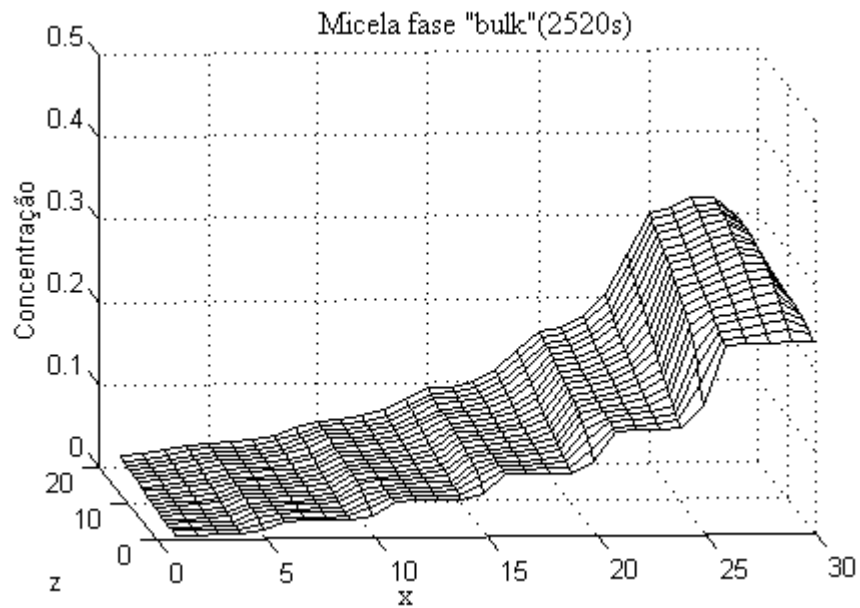
a) fase "bulk"



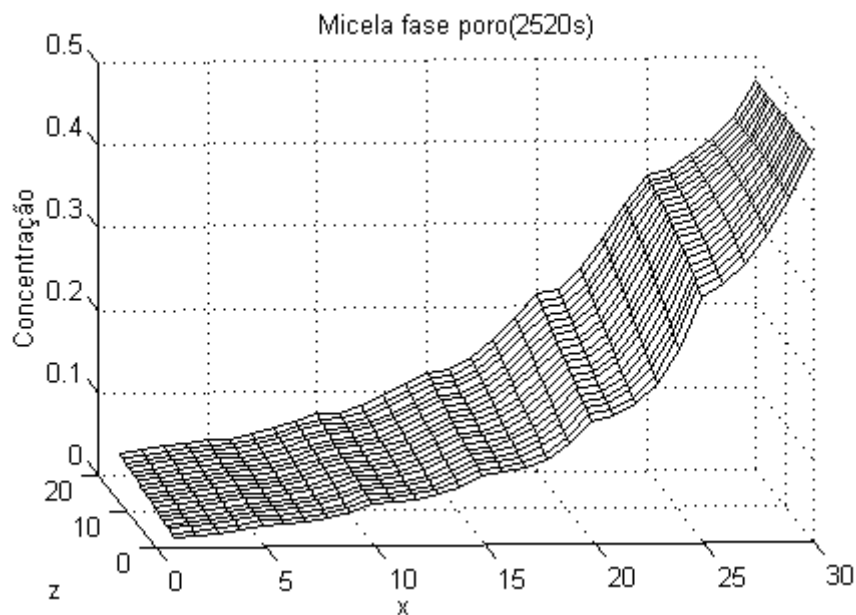
b) fase poro

Figura 4.4 - Campo de extração em regime transiente ($t = 1200$ s)

O estado estacionário é apresentado nas figuras (4.1a) e (4.1b) para um tempo $\tau = 19950$ s. Em comparação com as figuras (4.5a) e (4.5b), pode-se observar que não aconteceram alterações significativas no comportamento das distribuições.



a) fase "bulk"



b) fase poro

Figura 4.5 - Campo de extração em regime transiente ($t = 2520s$)

O código desenvolvido permite simular a influência de vários parâmetros nas características principais de um extrator típico (de regime, de matéria-prima e de construção). Nos itens seguintes, apresenta-se as simulações envolvendo a constante de equilíbrio E_d^v , o número de seções do extrator m_S e a comparação entre os resultados obtidos para flocos

laminados e expandidos. O objetivo destas simulações é determinar quais os valores de parâmetros que poderão melhorar o rendimento do extrator.

4.3 Variação da constante de equilíbrio

A constante de equilíbrio entre as fases sólida e poro, E_d^v , é um dos principais parâmetros que influi na extração. O seu valor depende da natureza da matéria-prima, do solvente e da temperatura. Quanto mais solúvel for o óleo no solvente, menor será E_d^v ocasionando uma melhor extração porque haverá mais óleo no poro da matéria-prima. Dentre os solventes mais utilizados atualmente na extração de óleo, encontra-se o hexano, mas o seu custo é elevado, e por isso, é importante estudar solventes alternativos. Neste contexto, algumas pesquisas estão sendo desenvolvidas visando a possibilidade de utilizar isopropanol, e principalmente, o etanol como solvente [Abraham et al., 1988; Bockisch, 1998], visto que: é encontrado em grandes quantidades; é mais barato que o hexano; tem possibilidade de ajustar-se em dois tipos de agroindústrias: a dos óleos vegetais e a do álcool. Outro solvente que vem sendo pesquisado para ser utilizado como alternativa nos processos de extração em escala industrial é o dióxido de carbono [LEE et al., 1986], para extração do óleo de canola; este solvente não necessita de gastos com energia no processo final de separação.

Na figura 3.10, observa-se que os resultados do modelo são mais exatos que os obtidos pelo ME, em comparação com os resultados experimentais, pois o ME não leva em conta as características da matéria-prima, do solvente e particularidades do extrator industrial. Na figura 4.6 são apresentados os resultados das simulações, em regime básico (estado estacionário) para vários valores de E_d^v . Observa-se que as concentrações de \bar{C}_m são máximas na zona de entrada da matéria-prima para todos os valores de E_d^v . Esta é uma característica dos fluxos CCC, onde a concentração da micela torna-se maior quando passa de uma seção para outra.

A figura 4.7 mostra que, no geral, há uma diminuição da concentração C_s com o aumento de E_d^v . Observa-se um máximo fraco (figura 4.6) para $E_d^v \approx 0,3$. O crescimento de E_d^v provoca uma aumento da concentração C^N na zona de carregamento, e como consequência, há uma queda da concentração inicial da fase poro C_{en}^p (equação 2.46) e da concentração C^p no campo de extração, dificultando a transferência de óleo da fase poro à “bulk”. Por isso há um crescimento das perdas de óleo P_{ol} (figura 4.8).

O aumento de E_d^v causa também o crescimento da vazão de preenchimento Q_p , pois, no mesmo espaço ε_p , da fase sólida para a fase poro, entra uma menor quantidade de óleo (Q_Σ é constante); e como resultado, temos uma queda da vazão Q_s (figura 4.7).

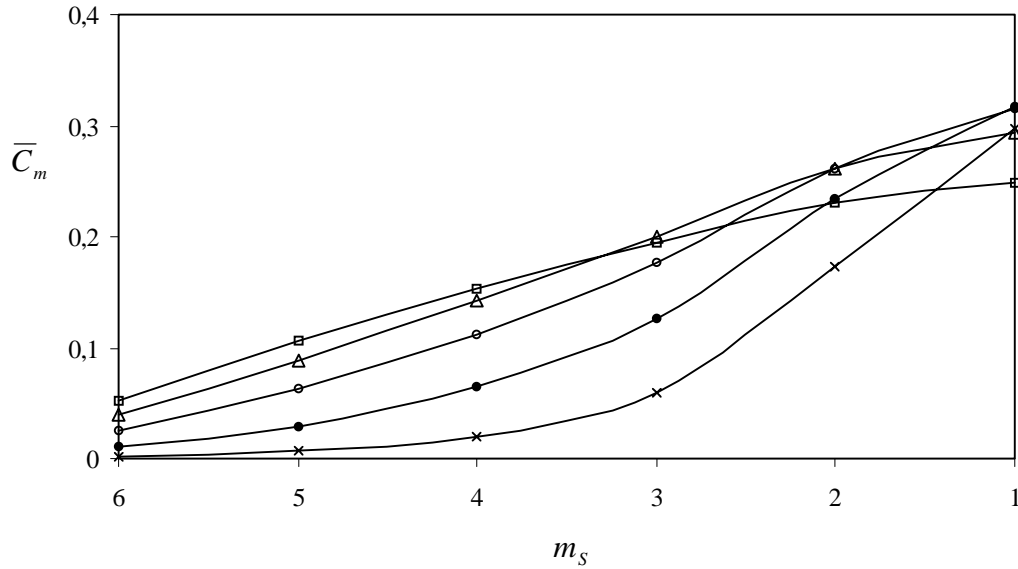


Figura 4.6 – Distribuição das \bar{C}_m em função de m para diferentes valores de E_d^v :

(x) - $E_d^v = 0,1$; (o) - $E_d^v = 0,3$; (•) - $0,5$; (Δ) - $E_d^v = 0,7$; (□) - $E_d^v = 1,0$

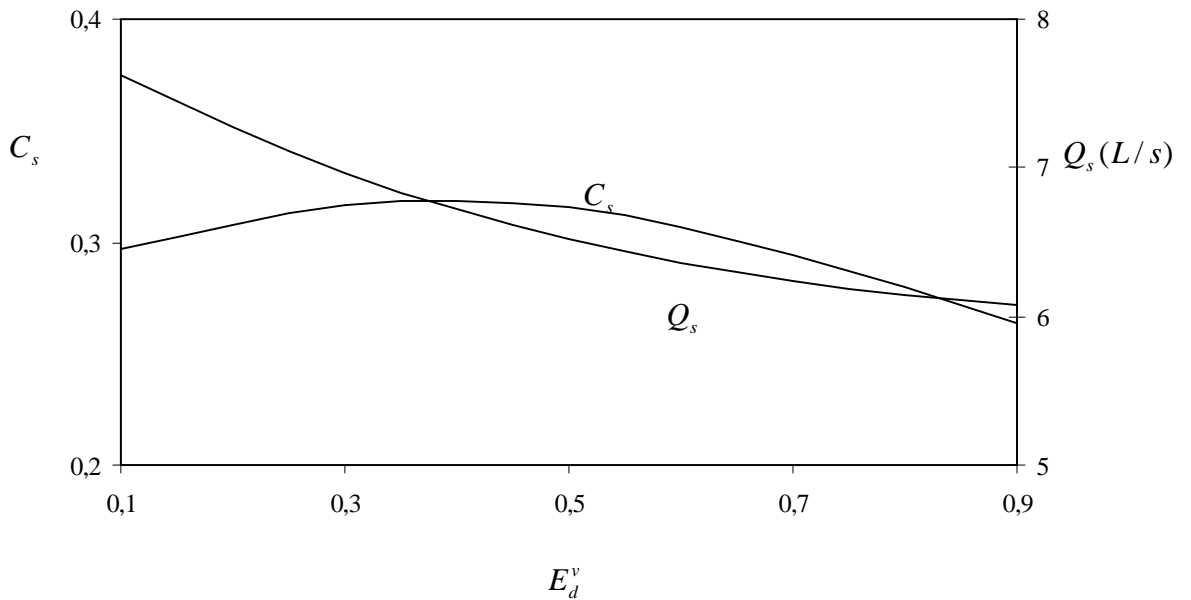


Figura 4.7 – Alteração de C_s e de Q_s em função de E_d^v

Então, há dois fatores contraditórios que influenciam a concentração C_s , quais sejam:

- com o crescimento de E_d^v , a concentração C_s tende a abaixar por causa do crescimento das perdas de óleo P_{ol} ;

- com o aumento de E_d^v , a concentração C_s tende a crescer porque Q_s diminui (lei de conservação da espécie, equação (3.21)).

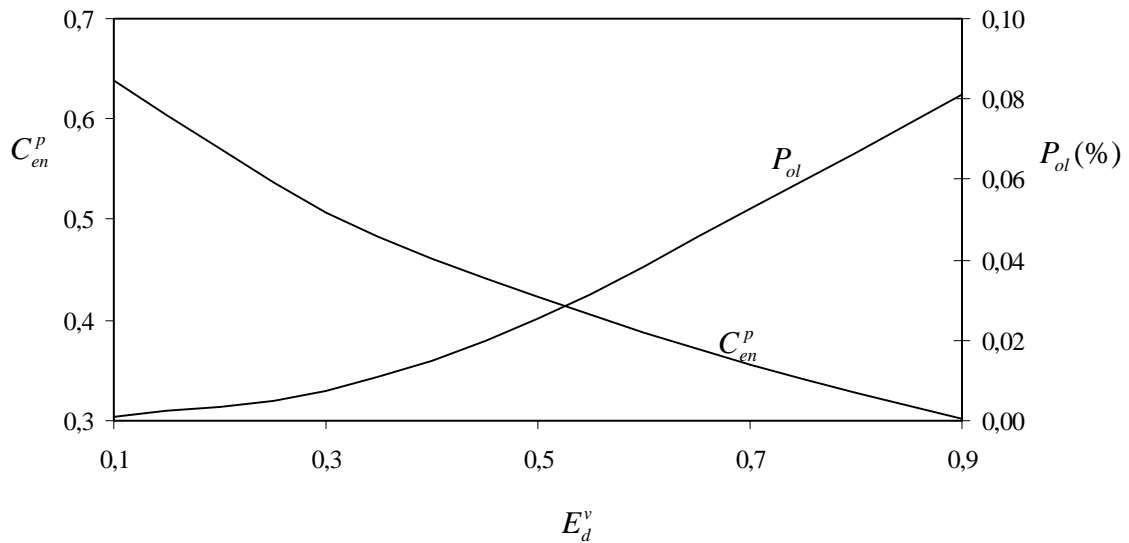


Figura 4.8 - Alteração de C_{en}^p e as perdas de óleo P_{ol} em função de E_d^v

A influência destes dois fatores contraditórios podem gerar o máximo na curva de $C_s = f(E_d^v)$, como mostra a figura 4.7.

4.4 Variação do número de seções m_S

Com a redução do número de seções m_S , os custos de fabricação e do consumo de energia (menor número de bombas) dos extratores são menores. Ao mesmo tempo, com a diminuição de m_S , as perdas de óleo crescem. O código desenvolvido pode ajudar com mais segurança na busca do número ótimo de seções, mantendo os outros dados constantes.

A figura 4.9 mostra as evoluções das concentrações C_s para extratores com diferentes números de seções m_S . Nela observa-se que as concentrações passam por alguns máximos enquanto estão em regime transiente (os estados estacionários são atingidos em $\tau \approx 6000s$). Os máximos surgem porque a quantidade de óleo no início do processo é maior do que no estado estacionário. Por isso, é necessário retirar do campo de extração o excesso de óleo antes de atingir o estado estacionário, que conduz a formação do máximo.

Observa-se também que para um número pequeno de seções os valores de C_s são baixos, e à medida que m_S aumenta, a concentração C_s cresce. A figura 4.10 evidencia que, no regime estacionário, com a redução do número de seções as perdas aumentam, pois o tempo de contato entre o meio poroso e a micela diminui, e portanto, a taxa de extração diminui.

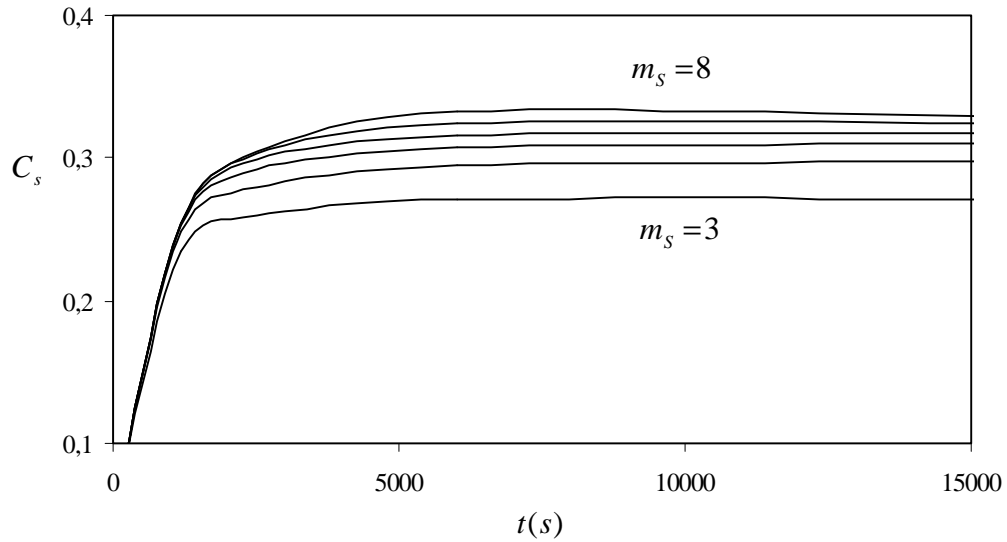


Figura 4.9 – Evolução das concentrações C_s em função do número de seções

Também observa-se que para $m_s = 3$ as perdas de óleo são grandes. Mas, para $m_s > 6$, o custo do extrator e gastos de energia crescem, porém, as perdas de óleo diminuem somente um pouco. Provavelmente por isso, neste extrator foi estabelecido 6 seções de percolação.

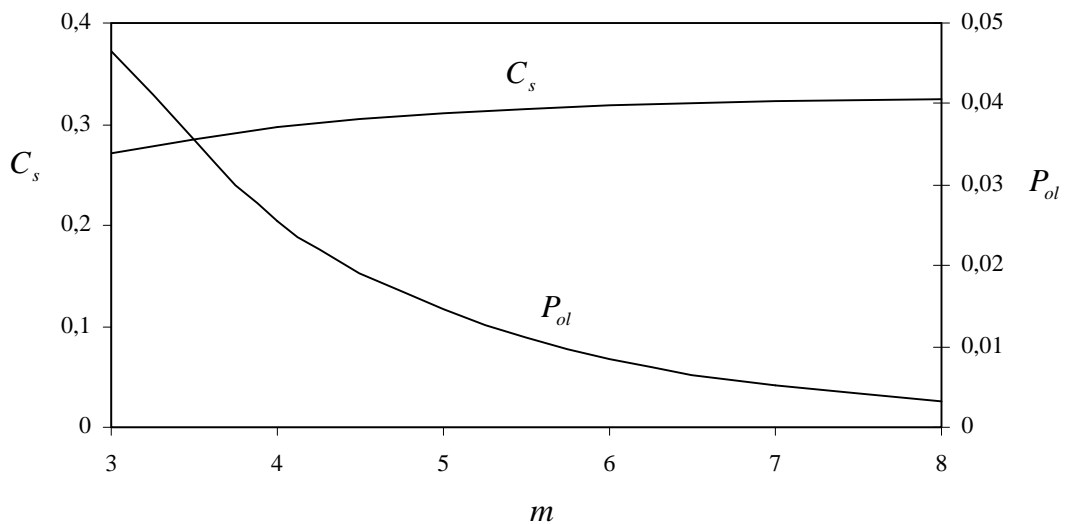


Figura 4.10 – Variação da concentração C_s e das perdas de óleo P_{ol} em função de m_s

A figura 4.11 mostra as distribuições das concentrações \bar{C}_m para extratores com $m_s = 3$ até $m_s = 8$. Nesta figura observa-se que, no estado estacionário, as concentrações médias nas bandejas são aproximadamente iguais mas, para $m_s = 3$, as perdas de óleo são muito grandes pois o tempo de contato entre o meio poroso e a micela é muito pequeno.

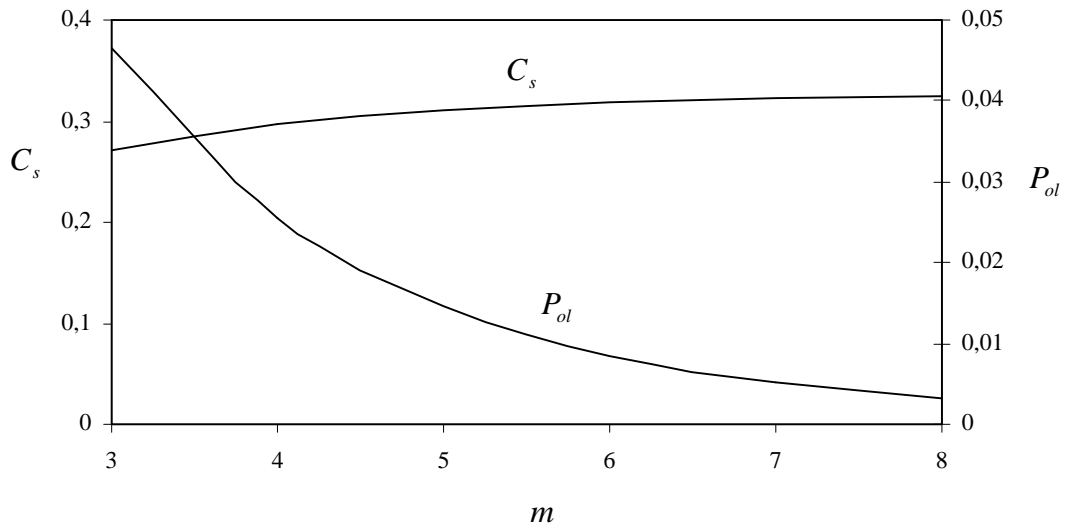


Figura 4.11 – Alteração das concentrações médias das bandejas \bar{C}_m em função de m_s

Na figura 4.12 estão apresentadas as distribuições Q_s , C_{en}^p e \bar{C}_2 para os extratores com diferentes m_s . É visível que \bar{C}_2 cresce com o aumento de seções.

Pelo esquema do extrator (figura 2.1), uma parte da micela da segunda seção de percolação passa para a zona de carregamento para formar a concentração inicial da fase poro C_{en}^p . Com o aumento da concentração \bar{C}_2 , vai crescer a concentração C_{en}^p , o que pode ser percebido pela equação (2.44), aumentando a vazão Q_P (equação 2.47). Neste caso, o fluxo Q_s diminui-se (equação 2.48) que é mais um fator para o crescimento da concentração C_s (além da queda das perdas P_{ol}) com o aumento de m_s .

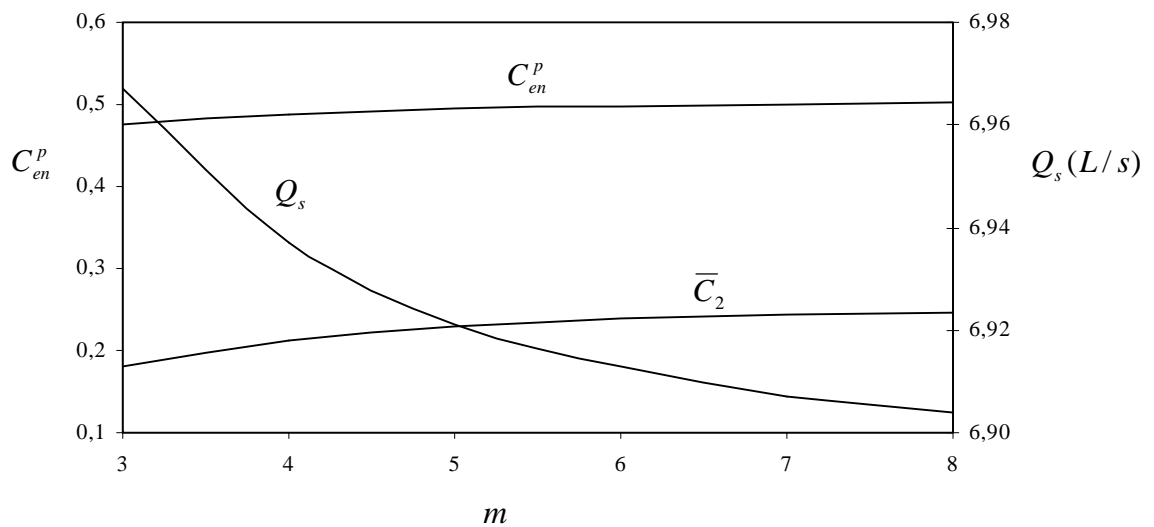


Figura 4.12 – Variação de C_{en}^p , \bar{C}_2 e Q_s em função do número de seções

4.5 Alteração da vazão de matéria-prima

Neste item, apresenta-se uma análise da capacidade de produção do extrator em função da vazão de matéria-prima (através da variação da velocidade horizontal u). A velocidade u é alterada mantendo-se constantes: a velocidade V_m , a vazão total no extrator Q_Σ e a espessura das seções típicas de percolação X_s . Nestas condições, para assegurar V_m constante (e conseqüentemente, a vazão Q_Σ constante) é necessário alterar a vazão Q_{so} pela equação:

$$Q_{so} = Q_\Sigma - \varepsilon_b c_w u H L_r \quad (4.2)$$

É evidente que, à medida que u cresce, a vazão de matéria-prima M_n , dentro do extrator, aumenta. Em conseqüência, haverá um crescimento da concentração C_s , na saída do extrator (figura 4.13), o que possibilita diminuir o custo da produção do óleo, pois conduz a menores gastos de energia para evaporar o hexano na micela concentrada.

Também, com o crescimento de óleo dentro do extrator, é natural que a concentração de óleo C_D , na seção de drenagem, aumente (figura 4.14), provocando um maior custo na produção por causa das perdas de óleo. Estes dois fatores são principais para a escolha de um melhor regime de funcionamento do extrator.

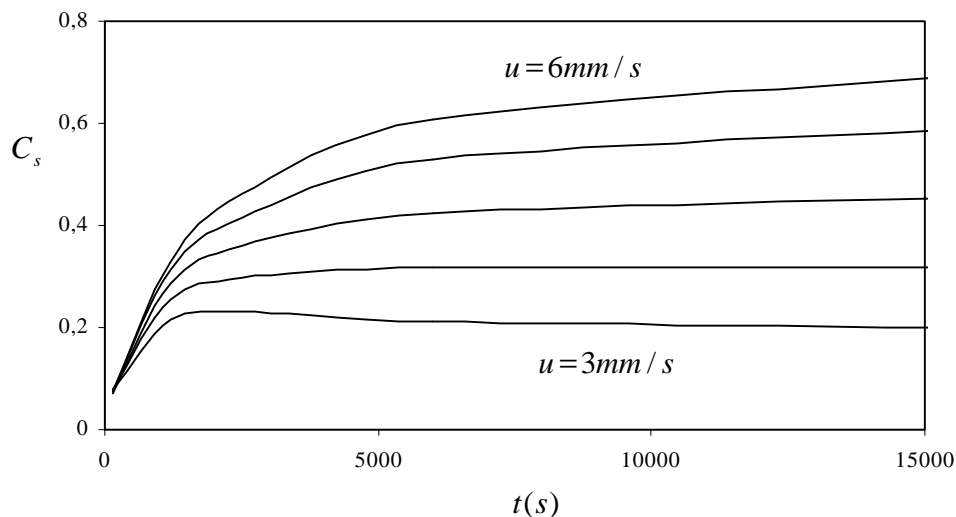


Figura 4.13 – Evolução da concentração C_s para diferentes velocidades u

Nas figuras 4.13 e 4.14, pode-se observar:

- a existência de um máximo da concentração C_s na linha $u = 3 \text{ mm/s}$;
- a existência de um mínimo da concentração C_D na linha $u = 6 \text{ mm/s}$;

c) o crescimento quase uniforme das concentrações C_s (no estado estacionário, $\tau \approx 6000s$, figura 4.13), e um aumento não linear das concentrações C_D (figura 4.14), e conseqüentemente das perdas de óleo (figura 4.15).

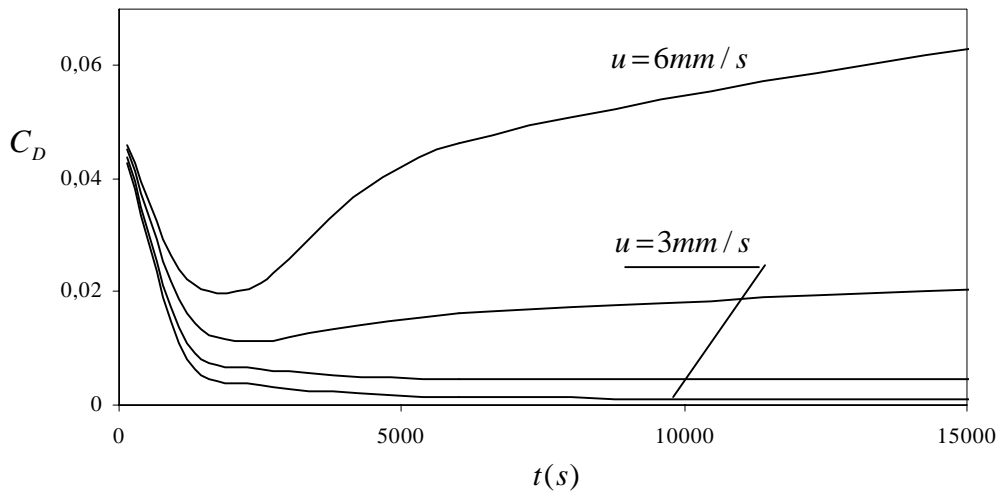


Figura 4.14 – Evolução da concentração C_D para diferentes velocidades u

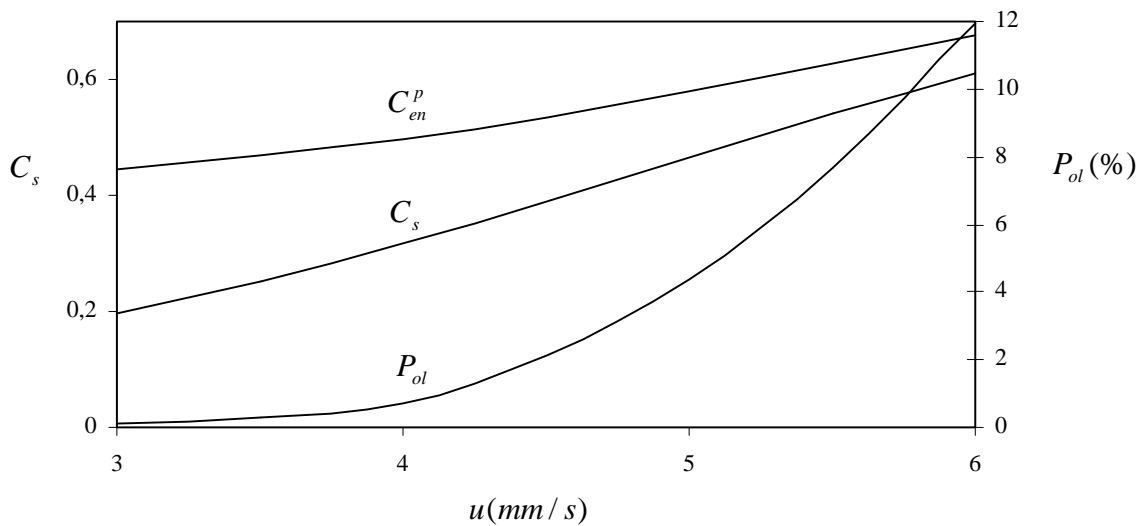


Figura 4.15 – Alteração de C_s , C_{en}^p , e P_{ol} em função da velocidade u

As causas dos efeitos a) e b), já foram descritas nos itens anteriores (item 4.5), e são provocadas por diferentes razões entre as quantidades e distribuições de óleo no campo de extração no momento inicial e no estado estacionário.

O efeito c), ou seja, o crescimento brusco das perdas de óleo P_{ol} , ocorre quando elas aumentam-se em aproximadamente 10 vezes com a alteração u de 4mm/s até 6mm/s. A análise das equações (2.55 e 2.56) do modelo e das figuras 4.15 e 4.16, mostra que com o aumento de u evidencia-se três fatores de crescimento das perdas que são adicionadas:

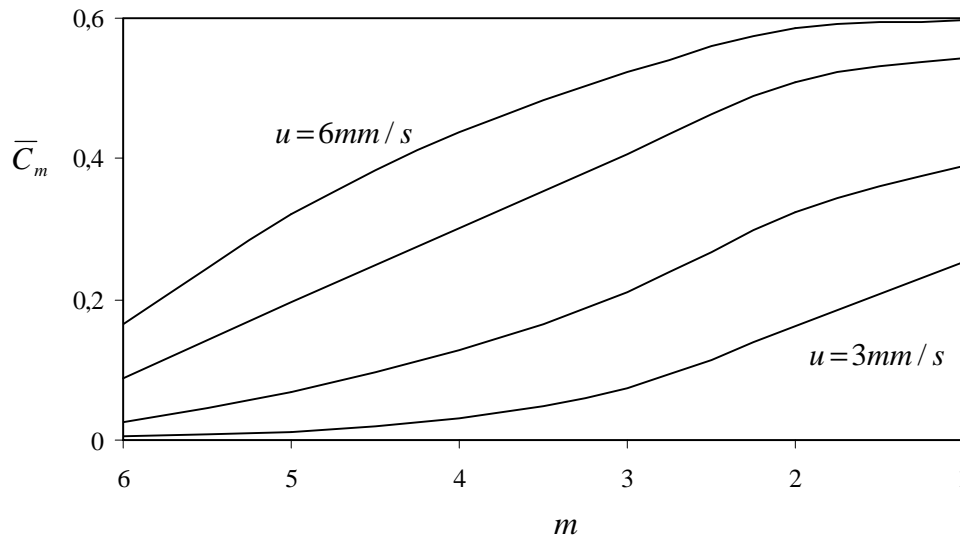


Figura 4.16 – Variação das concentrações médias \bar{C}_m em função da velocidade u

- a redução do tempo de permanência da matéria-prima no campo de extração ($\approx 1,5$ vezes);
- a diminuição (≈ 3 vezes, figura 4.15) da diferença $(C_{en}^p - C_s)$ e portanto $(C^p - C)$ que é proporcional a taxa de transferência do óleo da fase poro à “bulk”;
- a tendência da alteração das curvaturas das linhas $\bar{C}_m = f(m)$ com o aumento das velocidades u ; esta tendência reflete a diminuição ainda maior da diferença $(C^p - C)$.

No resultado da ação acoplada destes fatores ocorre o brusco crescimento das perdas. Então, pode-se destacar que é preciso ter cuidado com as tentativas de aumentar a produção de óleo nos extratores atuais, pois, pode ocorrer um crescimento extremamente rápido das perdas de óleo.

4.6 Flocos expandidos e laminados. Comparação das características de extração.

Para ocorrer uma extração eficiente do óleo contido nas sementes oleaginosas, é necessário fazer um condicionamento prévio do material a extrair, caso contrário, seria um processo excessivamente lento. O objetivo do condicionamento é liberar o óleo na massa a extrair. O condicionamento de soja para a extração por solvente pode ser feito de duas maneiras: por laminação e por extrusão (aglomerados expandidos) [Miyasaka et al., 1981].

Em extratores contemporâneos, a matéria-prima usada são os flocos expandidos [Erickson,1995] e os flocos laminados [Karnofski,1987] e, frequentemente, a sua mistura. Todas as simulações apresentadas até aqui nesta tese foram realizadas com flocos expandidos. É interessante, na prática, comparar as características da extração na mesma instalação com flocos diferentes. O código desenvolvido permite realizar esta comparação. Mas, neste caso, é necessário determinar algumas propriedades (ρ_n , ε_p , ε_b) dos flocos laminados [Thomas et al., 2002]. No relatório desenvolvido pela empresa Ruris Tecnal [Sirur, 1990], foi encontrada a informação de que quando o extrator usa flocos laminados a concentração $C_s(l)$ é menor em comparação com a concentração $C_s(e)$ de flocos expandidos, na proporção $C_s(l) : C_s(e) \approx 1,7$, com as perdas de óleo aproximadamente iguais. Estas informações são suficientes para fazer simulações com flocos laminados. Na tabela 4.1 são apresentados os dados iniciais do regime básico que foram alterados em relação à tabela (3.9).

O valor Q_{so} foi determinado por ajuste até encontrar a igualdade: $C_s(l)$ (teórico) = $C_s(l)$ (experimental). O coeficiente de arraste c_w e a consumo M_n foram diminuídos na proporção da redução da densidade dos flocos ($\rho_n(e) = 521 \text{ kg/m}^3$ e $\rho_n(l) = 370 \text{ kg/m}^3$). Os outros dados iniciais, que são considerados constantes, estão mostrados na tabela 3.9. Na figura 4.17 apresentam-se as evoluções das concentrações $C_s(l)$ e $C_s(e)$.

Tabela 4.1 – Dados iniciais alterados para flocos laminados

Matéria-prima	ε_b	ε_p	M_n (kg/s)	Q_{so} (L/s)	c_w
expandida	0,4	0,3	9,4	9,0	0,6
laminada	0,42	0,5	7,1	12,5	0,4

A linha de $C_s(l)$ apresenta um máximo. A causa deste efeito é explicado pela diferença entre as quantidades de óleo no leito do extrator no estado inicial (V_{in}^{es}) e do estado estacionário (V_{est}^{es}). Se $V_{in}^{es} > V_{est}^{es}$ (para o caso de flocos laminados) as concentrações C_s evoluem com um máximo. Se $V_{in}^{es} < V_{est}^{es}$ (para o caso de flocos expandidos), a linha de C_s pode ser monotona. A figura 4.18 mostra as evoluções das perdas de óleo P_{ol} para ambos os tipos de matéria-prima. No início do processo, as perdas de óleo são mais altas para os flocos laminados do que as perdas dos flocos expandidos. A causa principal desta diferença é o maior valor da porosidade interna: $\varepsilon_p(l) > \varepsilon_p(e)$, pois, para ε_p maiores, é mais difícil extrair óleo para a fase

“bulk”. Mas quando as concentrações C , no campo de extração, começam a diminuir ($C(l) < C(e)$), as evoluções de P_{ol} aproximam-se entre si.

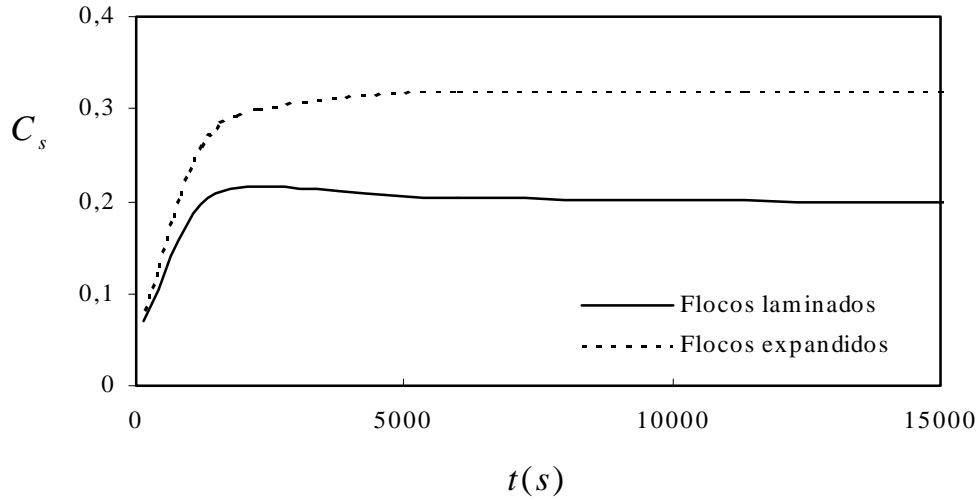


Figura 4.17 – Evolução das concentrações C_s na saída do extrator

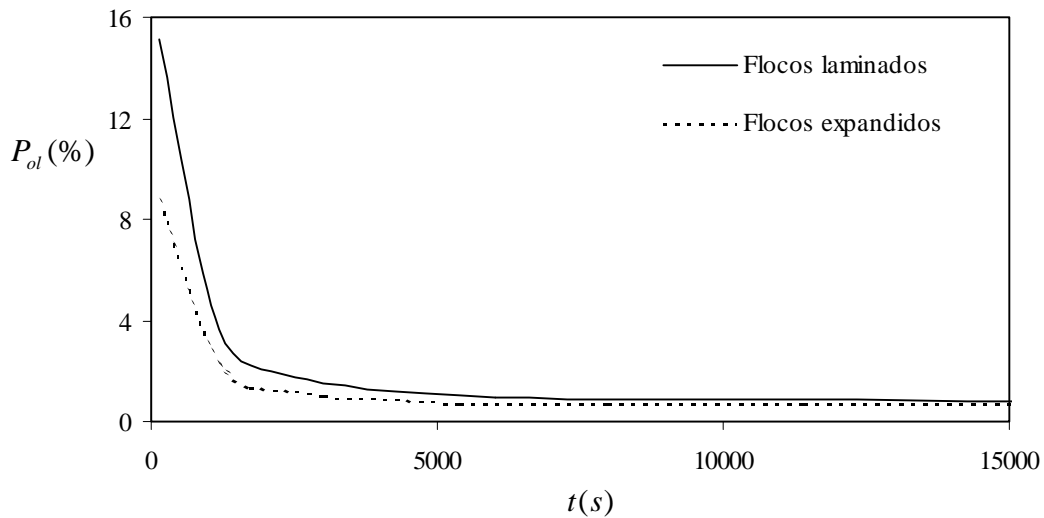


Figura 4.18 - Evolução das perdas de óleo P_{ol} no extrator para flocos laminados e expandidos

Na figura 4.19 apresenta as distribuições $\bar{C}_m = f(m)$ no regime estacionário. Observa-se que nas primeiras seções, os valores de $\bar{C}_m(e)$ são bem maiores que os $\bar{C}_m(l)$ pois, tem uma vazão maior (para flocos expandidos) de matéria-prima.

Outras características comparadas (em regime estacionário) estão mostradas na tabela 4.2. Analisando esta tabela pode-se observar:

a) a concentração $C_s(l)$ é consideravelmente menor que $C_s(e)$, por dois motivos:

- quanto menor a vazão de matéria-prima laminada e, portanto, um menor fluxo de óleo no extrator;
- quanto maior a vazão de hexano no extrator, $Q_{so}(l) > Q_{so}(e)$ ocasionando um maior valor de $Q_s(l)$.

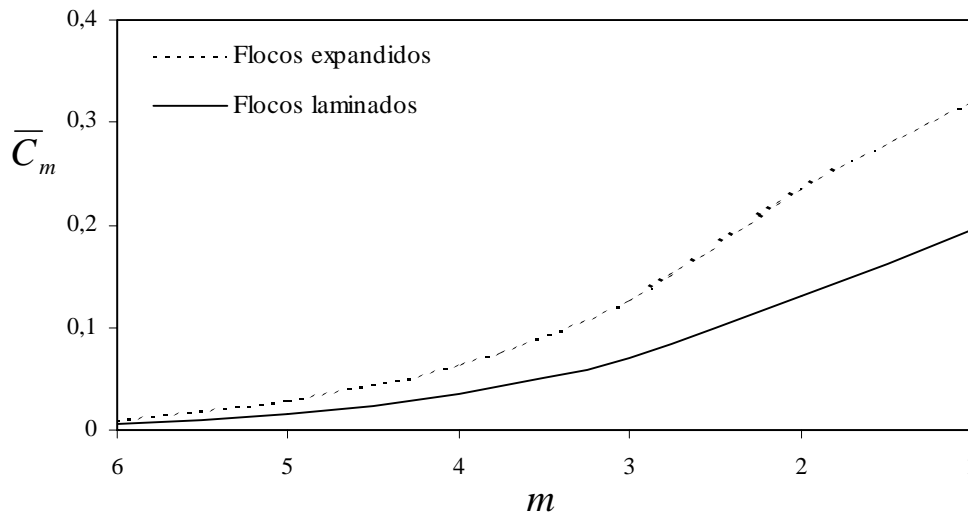


Figura 4.19 – Distribuições \bar{C}_m nas bandejas

Tabela 4.2 – Características da extração para diferentes tipos de matéria-prima

Matéria-prima	C_{en}^p	C_s	$Q_s (L/s)$	$Q_\Sigma (L/s)$	$Q_P (L/s)$	$P_{ol} (\%)$	$F_{ol} (cm^3 /s)$
Expandida	0,497	0,3195	6,195	13,22	6,975	0,715	57,69
Laminada	0,328	0,1956	8,516	15,46	6,94	0,820	49,89

b) As vazões de preenchimento Q_P são quase iguais pelos seguintes motivos:

- as porosidades externas ε_b são quase iguais (tabela 4.2), não influenciando em Q_P ;
- a porosidade interna $\varepsilon_p(l) > \varepsilon_p(e)$, que contribui para o crescimento de Q_P ;
- as concentrações $C_s(l) < C_s(e)$ que provoca a diminuição de Q_P ;
- o coeficiente de arraste $c_w(l) < c_w(e)$ que ocasiona uma redução de Q_P ;

Então, no valor de Q_P atuam diferentes fatores que provocam alterações contrárias.

Isto pode conduzir a: $Q_P(l) \approx Q_P(e)$.

c) a retenção de hexano no DT (Q_R) junto com a matéria-prima é calculado pela equação de conservação de hexano:

$$Q_R = Q_{so} - Q_s(1 - C_s) \quad (4.4)$$

e substituindo os valores, resulta: $Q_R(l) = 5,665 L/s > Q_R(e) = 4,785 L/s$ que corresponde ao esquema físico adotado. Nele considera-se que a retenção é provocada por hexano situado na fase poro, no fim do processo de extração.

Finalizando este item, destacam-se os seguintes momentos:

a) determinando as propriedades da matéria-prima pelos experimentos em laboratório pode-se (usando o código desenvolvido), prever as características da extração para uma instalação industrial;

b) a desvantagem da extração com flocos expandidos (necessidade de gastar uma quantidade de energia complementar na etapa de preparação da matéria-prima) é compensada de maneira satisfatória pelos gastos de energia na etapa da extração dos flocos laminados pelas seguintes causas:

- a necessidade da evaporação da maior quantidade do hexano na micela concentrada, pois, $C_s(l) < C_s(e)$;

- a necessidade da dessolventização da maior quantidade do hexano do farelo branco pois, $Q_R(l) < Q_R(e)$;

- em algumas industrias já é usada a matéria-prima formada pela mistura de flocos laminados com flocos expandidos com o objetivo de buscar um regime ótimo do ponto de vista de gastos de energia. O código desenvolvido pode ajudar nesta busca.

5. CONCLUSÃO E CONTRIBUIÇÕES

Os estudos de transferência de massa em meios porosos têm grande interesse na indústria de alimentos (óleo vegetal, café, açúcar, etc.). Esta indústria existe há mais de 20 anos, e utiliza grandes extratores: “De Smet”, “Rotocell” e “Crown Model”. No seu campo de extração, o meio poroso e a micela interagem através de fluxos contracorrente cruzados (CCC).

Os modelos matemáticos fenomenológicos destes fluxos não foram encontrados na bibliografia, apesar de que o uso da modelagem matemática contribui no projeto e otimização do funcionamento de equipamentos.

Neste estudo foi elaborado um modelo acoplado dos processos em extrator de leite horizontal. Este modelo considera:

- o movimento da matéria-prima e micela pelo esquema de fluxos contracorrente cruzados;
- a extração do óleo em seções de percolação;
- dois tipos de porosidades da matéria-prima;
- a difusão do óleo na fase “bulk” por todo o campo de extração;
- a existência das bandejas acumuladoras em cada seção de percolação;
- as particularidades das seções de carregamento e drenagem;
- as perdas de óleo no extrator;

E compõe-se por:

- o submodelo das seções de percolação, apresentado por um sistema de duas equações em derivadas parciais 2D evolutivas;
- o submodelo das bandejas apresentado por equações íntegro-diferenciais ordinárias;
- os submodelos da drenagem e do carregamento, incluindo as perdas de óleo;
- as condições de contorno as quais ligam todos os submodelos.

Para resolver o sistema de equações do modelo acoplado, foram elaborados:

- o algoritmo de resolução baseado no método de linhas (discretizando as derivadas espaciais e deixando as derivadas temporais) com aplicação posterior do método Runge-Kutta de 4ª ordem.
- o código escrito em linguagem C⁺⁺, com a visualização dos resultados de cálculo (por meio do pacote MATLAB).

Na avaliação do modelo e aplicativo, foram realizados:

- os testes mostraram a capacidade de prever as características do extrator e, que são coerentes com os processos que ocorrem no extrator industrial;

- a pesquisa para o estabelecimento dos tamanhos da malha e do passo de integração, envolvendo os números de Courant, a análise de Von Neumann e áreas de estabilidade dos métodos numéricos;
- a comparação dos resultados obtidos (para uma seção de percolação) por dois esquemas numéricos: Volumes Finitos e método de linhas, onde foi mostrado a alta concordância dos resultados;
- a verificação dos resultados obtidos pelo modelo com a lei de conservação da espécie, de onde foi revelada uma boa concordância, com erro de 0,1%;
- o estabelecimento de um estado estacionário das concentrações das fases poro e “bulk” independentemente das suas distribuições iniciais. Os testes foram realizados para três tipos de distribuições iniciais (regime suave, regime de micela forte e, regime industrial);
- A comparação dos resultados obtidos pelo modelo com os dados experimentais (coletados no extrator “De Smet”) que mostrou a boa concordância entre eles; ao mesmo tempo, observou-se uma diferença considerável entre os dados experimentais e o método de estágios ideais;

Para as simulações numéricas foi necessário estabelecer algumas propriedades da matéria-prima. Uma parte delas foi avaliada indiretamente a partir dos dados coletados na empresa e, portanto, devem conter incertezas. Neste contexto, tornou-se necessário realizar um estudo da influência das propriedades da matéria-prima nas características principais do modelo. As porosidades “bulk” e poro são bastante próximos dos seus valores coletados na bibliografia que foram aceitos para as simulações de operação. Outro parâmetro de difícil determinação é o coeficiente de dispersão. A análise de sensibilidade realizada, mostrou que este coeficiente não tem influência significativa nos resultados dos regimes pesquisados; porém, neste modelo a difusão foi considerada pois, para outros extratores (por exemplo, “Crown Model”), este fenômeno pode ser importante. A área de contato entre as fases poro e “bulk” foi determinada por identificação através de “experimentos numéricos” aceitando-se $a_p = 63 \text{ m}^{-1}$.

As simulações numéricas dos regimes estacionário e transiente revelam as particularidades na distribuição das concentrações C e C^p do campo de extração, e mostraram a concordância dos resultados com as leis físico-químicas envolvidas e com os fenômenos observados no extrator.

Foi realizado um estudo dos efeitos que a variação da constante de equilíbrio provoca nas características principais da extração, mantendo os outros parâmetros constantes. No resultado geral, um aumento da constante de equilíbrio causa maiores perdas de óleo, em virtude do crescimento da concentração C^N na matéria-prima.

Foi simulada a variação do número de seções de percolação do extrator. No geral, um número pequeno de seções conduz a um extrator mais barato com as perdas de óleo notáveis. Um número grande de seções torna o extrator um equipamento caro, mas com perdas de óleo pequenas. As simulações realizadas confirmam que o extrator em estudo nesta tese possui o número de seções ótimo (seis).

O estudo da influência da vazão da matéria-prima dentro do extrator torna evidente que é necessário ser cuidadoso com esta vazão, pois um crescimento insignificante dela, pode provocar grandes perdas de óleo.

Atualmente os extratores operam com matéria-prima extrusada (flocos expandidos) ou laminada (flocos laminados). Os resultados obtidos confirmam os dados da indústria, que as concentrações na saída do extrator são maiores para flocos expandidos por causa de uma maior vazão de matéria-prima que entra no extrator e uma menor vazão volumétrica de solvente.

No geral, a modelagem matemática aplicada para prever o comportamento dos processos da extração de óleo vegetal começou a se desenvolver na década de 50 [Karnofsky, 1950; Abraham et al., 1988]. As abordagens dos modelos desenvolvidos são unidimensionais, não prevêm as distribuições espaciais das concentrações ou são modelos empíricos baseados em dados experimentais que são limitados por regiões estreitas de alteração dos parâmetros geométricos, de regime ou características da matéria-prima.

No projeto e simulação dos processos em extratores, até hoje são usadas amplamente as diferentes versões do método de multi-estágios [Lydersen, 1983; Vian et al., 1972] que considera uma distribuição uniforme das concentrações de óleo nas seções. A abordagem deste método não é sensível às dimensões das seções, às velocidades dos componentes, e às porosidades da matéria-prima.

Na análise comparativa com outros modelos existentes, por exemplo, [Karnofsky, 1987; Chien et al., 1990; Majumdar et al., 1995; Bewaji-Adedeji et al., 1996], pode-se destacar as seguintes contribuições do modelo desenvolvido nesta tese:

- a distribuição bidimensional evolutiva das concentrações de óleo nas fases “bulk” e poro;
- a consideração acoplada das características da matéria-prima, do solvente, da micela bem como os fenômenos envolvidos (difusão, transferência de óleo entre as fases, o arraste da micela e da espécie junto com o meio poroso, as perdas de óleo nas fases poro e sólida) em condições dos fluxos CCC. Por isso, o modelo permite simular diferentes solventes, diferentes tipos de matéria-prima e tamanhos das partículas.
- o modelo considera a existência das bandejas acumuladoras, da zona de drenagem e da zona de carregamento;

Futuramente o tema desta tese pode ser desenvolvido nos seguintes sentidos:

- melhorar os submodelos de drenagem e carregamento através da aquisição de novos dados experimentais, adaptando-os para regimes dinâmicos;
- desenvolver o modelo para outros tipos de extratores;
- desenvolver um estudo do ponto de vista econômico do processo, com o objetivo de implantar o modelo numa empresa;
- desenvolver pesquisas com solventes alternativos e outras oleaginosas;
- criar uma instalação experimental para estudar o efeito da mistura de flocos expandidos com laminados;
- desenvolver estudos envolvendo os aspectos hidrodinâmicos (quando, por exemplo, uma parte do leite não contém micela).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abraham G., Hron R.J., Koltun S.P., 1988. "Modeling the Solvent Extration of Oilseeds", **The Journal Of The American Oil Chemists' Society - JAOCS**, Campaign, vol. 65, pp. 129-135.

Adrover A., Giona M., 1996. "A predictive model for permeability of correlated porous media", **Chemical Engineering Journal**, vol. 64, pp. 7-19.

Alves S. B. L., et al., 2001. "Covalidation of Integral Transforms and Method of Lines in Nonlinear Convection-Diffusion with Mathematica", **J. of the Braz. Soc. Mechanical Sciences**, vol. XXIII, n.3, pp. 303-319.

Bear, Jacob., 1972. "**Dynamics of fluids in porous media**", American Company. New York: Elsevier, 762p.

Benadda B., et al., 1996. "Influence of pressure on the gas/liquid interfacial area and the coeficient $K_L a$ in a counter-current packed column", **Chemical Engineering and Processing**, vol. 35, pp. 247-253.

Bernardini E., 1985. "**Oilseeds – Oils and fats**", Publishing House B. E. Oil, Romes.

Bewaji-Adedeji E.O., Best R.J., 1996. "Flowsheet simulation of coffee extraction: a continuous cyclic process", **Computers & Chemical Engineering**, vol. 20, pp. S485 – S490.

Bistolfi M., Malandrino A., Mancini N., 1996. "The use of different modelling approaches and tools to support research activities: an industrial example", **Computers & Chemical Engineering**, vol. 20, pp. S1487 – S1491.

Bockisch M., 1998. "Fats and Oils Handbook". **AOCS Press**, Illinois.

Borges P.A.P., Khatchatourian O.A., Vielmo H.A., 2001. "Modelagem Matemática de Secagem de Grãos: Aplicação do Método dos volumes Finitos." Vol. 2, pp. 33 – 42.

Bott R., Langeloh T.H., Ehrfeld E., 2000. "Dynamic cross flow filtration", **Chemical Engineering Journal**, vol. 80, pp. 245-249.

Brooker D. B., 1969. "Computing air pressure and velocity distribution when air flows through a porous medium and nonlinear velocity-pressure relationship exist". **Transaction of the ASAE**, St. Joseph, Michigan, 12, p.118-120.

Carman P. C., 1937. "Fluid flow though a granular bed", **Trans. Inst. Chem. Eng.**, n.3, p.150-156.

Chien J. T., Hoff J. E., 1990. "Oil extraction of dried ground corn with ethanol", **The Chemical Engineering Journal, Netherlands**, vol. 3, pp. 103-113.

Coast k., Smith B. D., 1964. “Dead-end pore volume and dispersion in porous media”, **Journ. Soc. Petrol. Eng.**, n.3, p.73-84.

Cussler, E.L., 1997. “**Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems**”, Cambridge University Press, New York.

Di Giovacchino, L.,1996. “Olive Harvesting and Olive Oil Extraction, in Olive Oil, Chemistry and Technology.” **American Oil Chemists’ Society - AOCS Press**, Champaign,Il, pp. 12-52.

Erickson, D.R., 1995. “**Practical Handbook of Soybean Processing and Utilization**”, AOCS Press, Illinois, pp. 56-116.

Estel L, Bagui F., Abdelghani-Idrissi M.A., Thenard C., 2000. “Distributed state estimation of a countercurrent heat exchanger under varying flow rate”, **Computers & Chemical Engineering**, vol. 24, pp. 53 – 60.

Ferziger, J.H. and Peric, M., 1997. “**Computational Methods for Fluid Dynamics**”, Springer.

Fogler H. S., 1987. “**Elements of chemical reaction engineering**”. Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences, pp.543-601.

Foust S.A., Wenzel A.L., Clump W.C., Maus L., Anderson B.L., 1982. “**Princípios das Operações Unitárias**”, Livros Técnicos e Científicos.

Guo G., Thompson K. E., 2001. “Experimental analysis of local mass transfer in packed beds”, **Chemical Engineering Science**, vol. 56, pp. 121-132.

Higler, A. P., Krishna R., Ellenberger J., Taylor R., 1999. “Counter-current operation of a structured catalytically packed-bed reactor: Liquid phase mixing and mass transfer”, **Chemical Engineering Science**, vol. 54, pp. 5145-5152.

Hossain M.D.A., Yonge D.R., 1999. “Simulating advective-dispersive transport in groundwater: an accurate finite difference model”, **Applied Mathematics and Computation**, vol. 105, pp. 221-230.

Houwen P. J., 1996. “The development of Runge-Kutta methods for partial differential equations”, **Applied Numerical Mathematics**, vol. 20, pp. 261-272.

Huang S., Carr R. W., 2001. “A simple absorber dynamics approach to simulated countercurrent moving bed reactor performance”, **Chemical Engineering Journal**, vol. 82, pp. 87-94.

Johansson L., Westerlund L., 2000. “An open absorption system installed at a sawmill description of pilot plant used for timber and bio-fuel drying”, **Energy**, vol. 25, pp. 1067-1079.

Karnofsky G., 1950. "The theory of solvent extraction". **The Journal Of The American Oil Chemists' Society - JAOCS**, Campaign, n.10, pp.564-569.

Karnofsky G., 1986. "Design of oilseed extractors", **The Journal Of The American Oil Chemists' Society - JAOCS**, Campaign, vol. 63, pp. 1011-1016.

Karnofsky, G., 1987. "Design of oilseed extractors. I Oil extraction (Supplement)". **The Journal Of The American Oil Chemists' Society - JAOCS**, Campaign, vol. 64, pp.1533-1536.

Kreiss H.A., Scherer, G., 1992. "Method of Lines for Hyperbolic Differential Equations", **Journal SIAM – Society for Industrial and Applied Mathematics**, vol. 29, pp. 640 – 646.

Krupiczka R., Rotkegel A., 1997. "An experimental study of diffusional cross-effects in multicomponent mass transfer", **Chemical Engineering Science**, vol. 52, pp. 1007-1017.

Lafolie F., Hayot C., 1993. "One-dimensional solute transport modelling in aggregated porous media. Model Description and Numerical Solution", **Journal of Hidrology**, vol. 143, pp. 43-83.

Lajara, J., 1990. "Solvent extraction of oil from oilseeds: the real basics." In World Conference Proceedings, Edible Fats and Oils Processing: Basic Principles and Modern Practices. **American Oil Chemists' Society - AOCS**, Champaign, IL.

Lambert J.D., 1993. "**Numerical Methods for Ordinary Differential Systems – the Initial Value Problem**", John Wiley, New York.

Lasseran J.C., Courtois F.A., 1993. "CAD – Software to improve the Heat Energy Efficiency of Mixed-flow Maize Dryers", **Proceedings of Latin American Technical Meeting on Grain Drying and Storage**, Porto Alegre, Brazil, pp. 1-17.

Lee, A. K. K., 1986. "Modelling of Supercritical carbon dioxide Extraction of Canola Oilseed in Fixed Beds", **JAOCS**, vol. 63, pp. 921-925.

Lydersen L. A., 1983. "**Mass transfer in Engineering Practice**", John Wiley & sons Ltd..

Majumdar G.C., Samanta A.N., Sengupta S.P., 1995. "Modelling Solvent Extraction of Vegetable Oil in a Packed Bed", **The Journal Of The American Oil Chemists' Society - JAOCS**, vol. 7, pp. 971-979.

Mikhailov M. D., Ozisik M. N., 1984. "**Unified analysis and solutions of heat and mass diffusion**", John Wiley, New York.

Maliska C. R., 1995. "**Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacionais**", LTC S/A.

- Marchi C.H., Maliska C. R., Bortoli A. L., 1989. “The use of co-located variables in the solutions of supersonic flows” In: **X Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, Rio de Janeiro, p.124-128.
- Marrone C., Poletto M., E. Reverchon, A. Stassi, 1998. “Almond oil extraction by supercritical CO₂: experiments and modeling”, **Chemical Engineering Science**, vol. 53, pp. 3711-3718.
- Miyasaka S., Medina J. C., 1981. “A soja no Brasil”, **Embrapa**, p.916–963.
- Othmer, D. F., Agarwal, J. C.,1955. “Extraction of Soybeans”. **Chemical Engineering Progress**, vol. 51, n. 8, p. 372-378.
- Patankar, S. V., 1980. “**Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**”, McGraw Hill, New York.
- Pires, A., Moreira, L.G., & Veloso, G.O., 2000. “Coleta de dados experimentais do extrator “De Smet” e sua análise”. Relatório de pesquisa, **UNIJUÍ – Grupo Zaffari**, Ijuí-RS, Brasil, 14p.
- Pfeiffer B. M., Marquardt W., 1996. “Symbolic semi-discretization of partial differential equation systems”, **Mathematics and Computers in Simulation**, vol. 42, pp. 617-628.
- Pressmann R. S., 1995. “**Engenharia de software**”, McGraw Hill, São Paulo.
- Qi J.S., Krishnan C., 1996. “Mathematical modeling of continuous cross-flow diffusion-controlled dryers”, **Chemical Engineering Science**, vol. 51, pp. 4769-4780.
- Ramanand S. B., Rao D. P., 1996. “Modelling and simulation of NO_x absorption into water in a countercurrent flow packed column”, **Computers & Chemical Engineering**, vol. 20, pp. 1059 – 1063.
- Rees D. A. S., Pop I., 2000. “Vertical free convection in a porous medium with variable permeability effects”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 43, pp. 2565-2571.
- Rieger R., Weiss C., Wigley G., Bart H.J., Marr R., 1996. “Investigating the process of liquid-liquid extraction by means of computational fluid dynamics”. **Computers & Chemical Engineering**, vol. 20, pp. 1467 – 1475.
- Rumsey T. R., Rovedo C. O., 2001. “Two-Dimensional simulation model for dynamic cross-flow rice drying”, **Chemical Engineering and Processing**, vol. 40, pp. 355 – 362.
- Santos L. C. C., 1998. “Introdução à mecânica dos fluidos computacional”. **USP**, XXI congresso nacional de matemática aplicada e computacional, p43-56.

Schneider G. E., Zedan M. A., 1981. "Modified strongly implicit procedure for the numerical solution of field problems, numerical heat transfer", **Head end mass transfer**, vol.4 p.1-19.

Silva J. A., Valle B., 1997. "Simulação de uma coluna de absorção utilizando método de elementos finitos", **XX Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional**, Gramado - RS, p.1820-1828.

Simeonov E., Tsibranska I., Minchev A., 1999. "Solid-liquid extraction from plants - experimental kinetics and modeling", **Chemical Engineering Journal**, vol. 73, pp. 255-259.

Simewsen J., Foss B. A., 1996. "A concept for modeling batch plant operation". **Computers & Chemical Engineering**, Vol. 20, pp. S1245-S1250.

Sirur G. V., 1990. "Benefits of tecnal integrated expander systems (ties) for improved overall operational performance of solvent extraction plants". **Ruris Tecnal Extractin Systems PVT. Ltd.**, 14p.

Sissom L. E., Pitts D. R., 1998. "Fenômenos de transporte", Ed. Guanabara, Rio de Janeiro.

Stynes M., 1995. "Finite volume methods for convection-diffusion problems", **Journal of Computational and Applied Mathematics**, VOL. 63, pp. 83-90.

Thomas G.C., & Veloso G.O., 2002. "Determinação experimental das propriedades da micela e dos flocos expandidos de grãos de soja usados no extrator industrial". Relatório de pesquisa, **UNIJUÍ** –Camera LTDA, Ijuí – RS, Brasil.

Toutain J., Lann J.M. Le, Gourdan C., Joulia X., 1998."Maxwell-Stephan approach coupled with drop population for dynamic simulation of liquid-liquid extraction pulsed column". **Computers & Chemical Engineering**, Vol. 22, pp379-387.

Treybal, R.E., 1963. "**Liquid Extraction**", McGraw-Hill, New York.

Veloso, G. O., 1999."Modelo matemático evolutivo 2D na extração de óleo vegetal por solvente em extrator industrial do tipo "De Smet" ", Dissertação de mestrado. UNIJUÍ, Ijuí-RS, Brasil.

Versteeg, H.K. & Malalasekera, W., 1995. "An Introduction to Computational Fluid Dynamics – The Finite Volume Method", **Longman Scientific & Technical**.

Vetterling W.T. et all, 1992. "**Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing**", Cambridge University.

Vian Á., Ocón J., 1972. "**Elementos de Ingeniería Química (operaciones básicas)**", Aguilar, Madrid.

Wang W., Jia X., Davies G.A., 1995. "A theoretical study of unsteady cross-flow filtration using force balance analysis", **Chemical Engineering Journal**, vol. 60, pp. 55-62.

Wang Z.H., Chen G., 1999. "Heat and mass transfer in fixed-bed drying", **Chemical Engineering Science**, vol. 54, pp. 4233-4243.

Wrobel, I. C. et al, 1989. "**Métodos Numéricos para Recursos Hídricos**", Associação Brasileira de Recursos Hídricos, Rio de Janeiro.

Wronski S., Molga E., 1998. "Mass transfer model for the film countercurrent flow of two liquid phases in a packed bed column", **Chemical Engineering and Processing**, vol. 37 , pp. 47-54.

Zamponi G. et al., 1996. "Simulation of the transient behaviour of a stirred liquid/liquid extraction column", **Computers Chemical engineering**, vol. 20, pp. 5963-5968.