

OP III / PQI3402

Transporte de massa em um estágio

Marcelo Seckler

Textos de apoio: Seader&Henley seções 3.1, 3.6, 3.7
Geankoplis seção 10.4
McCabe, Chap.22, Section "Principles of Absorption"

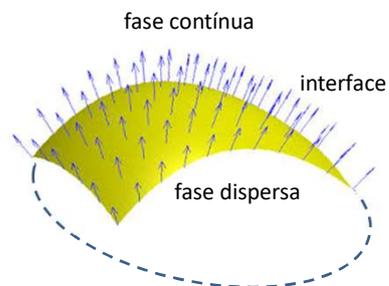
1

Definição de fluxo

- Num separador um componente C escoa entre uma fase contínua e uma fase dispersa.
- O escoamento é em direção ortogonal à interface que separa as fases
- Vazão e fluxo são assim definidos:

$$W_C = N_C A$$
$$\frac{\text{mol}C}{s} = \frac{\text{mol}C}{m^2 s} m^2$$

- W_C – vazão
- N_C – fluxo ortogonal à interface
- A – área da interface entre fases



2

Interfaces em separadores

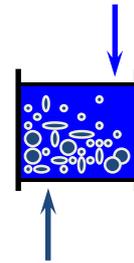
- A área da interface é normalizada com respeito ao volume de fase dispersa ou ao volume total (fase dispersa + contínua), resultando nas áreas a e a' , sendo a' de interesse para projeto:

$$a = \frac{\text{área de gotas}}{\text{volume de gotas}} = \frac{N\pi d^2}{N\pi d^3/6} = \frac{6}{d}$$

$$a' = \frac{\text{área de gotas}}{\text{volume de mistura}} = \frac{\text{área de gotas}}{\text{volume de gotas}/\varepsilon} = a\varepsilon = \frac{6\varepsilon}{d}$$

$$\varepsilon = \frac{\text{volume de gotas}}{\text{volume de mistura}}$$

- a área interfacial ($\text{m}^2 \text{ gota}/\text{m}^3 \text{ gota}$)
- a' área interfacial ($\text{m}^2 \text{ gota}/\text{m}^3 \text{ sistema bifásico}$)
- N número de gotas (#)
- d diâmetro das gotas (m)



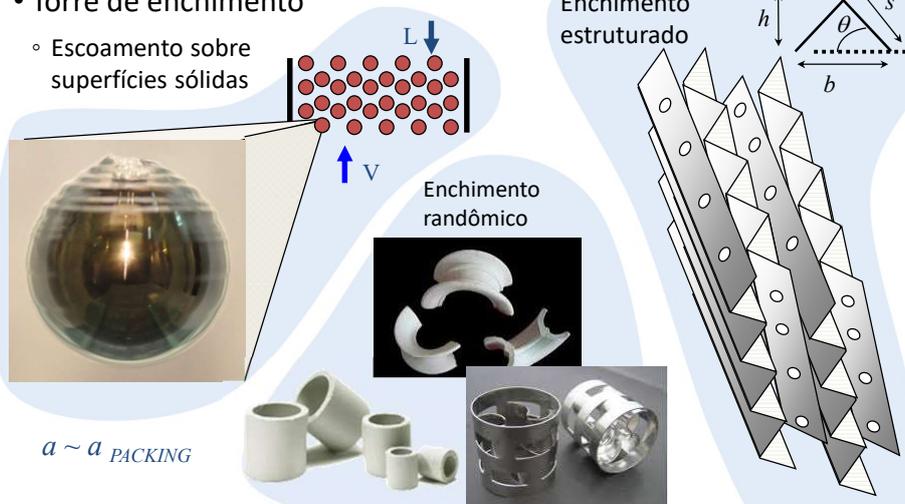
- Fase contínua
- Fase descontínua

3

Exemplos de interfaces

- Torre de enchimento

- Escoamento sobre superfícies sólidas

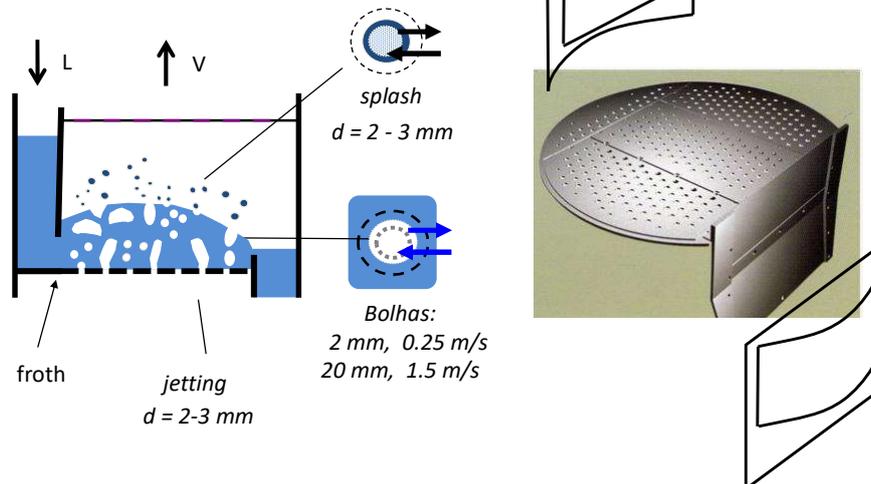


$$a \sim a_{\text{PACKING}}$$

4

Exemplos de interfaces

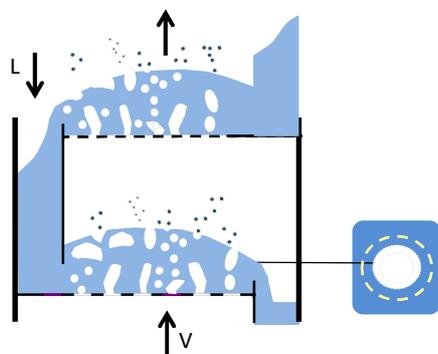
- Bandeja de uma unidade de destilação
 - Bolhas e gotas



5

Exercício 3.1: Área da interface

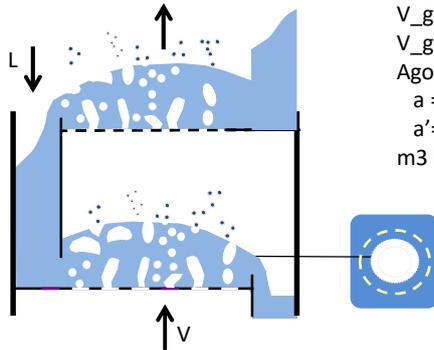
- Seja uma bandeja com diametro de 2m. A altura de líquido sem a passagem de gás é de 0.1m, com gás ela aumenta para 0.15m. Calcular a áreas específica a na bandeja. As bolhas de gás têm diâmetro médio de 0.002m.



6

Exercício 3.1: solução

- Seja uma bandeja com diâmetro de 2m. A altura de líquido sem a passagem de gás é de 0.1m, com gás ela aumenta para 0.15m. Calcular a áreas específica a na bandeja. As bolhas de gás têm diâmetro médio de 0.002m.

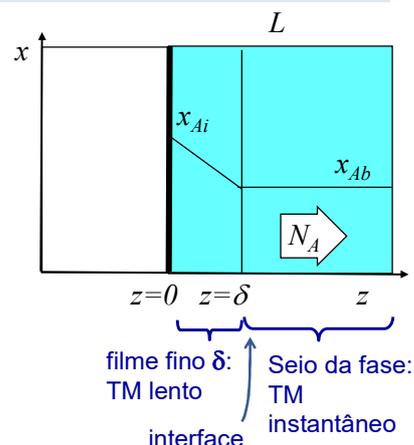


$V_{\text{gota}} = (15-10)/15 * V_{\text{mistura}}$, logo $E_{\text{ps}} = V_{\text{gota}}/V_{\text{mist}} = 5/15$.
 Agora basta usar as definições:
 $a = 6/d = 6/(2e-3) = 3000 \text{ m}^2 \text{ gota} / \text{m}^3 \text{ gota}$
 $a' = 6/d E_{\text{ps}} = 3000 * 5/15 = 1000 \text{ m}^2 \text{ gota} / \text{m}^3 \text{ bandeja}$

7

TM em reg. turbulento no interior de uma fase: teoria de filme

- Hipóteses
 - Sistema binário
 - Direção do escoamento da interface para o seio do líquido
 - TM unidimensional
 - Escoamento turbulento
 - Regime permanente
 - O seio da fase é idealmente misturado, logo: composição uniforme, não há resistência ao transporte de massa
 - Próximo à interface, há um filme estagnado de espessura δ , no qual há TM por difusão. Toda a resistência ao escoamento está neste filme.



8

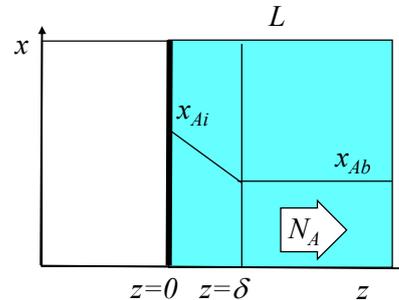
Fluxos difusivo e convectivo

- TM unidimensional, sistema binário, regime permanente

$$N_t = N_A + N_B$$

$$N_A = J_A + x_A \cdot N_t$$

$$N_B = J_B + x_B \cdot N_t$$



Fluxo total, em relação a coordenadas estacionárias

Fluxo difusivo, através de um plano movendo-se com a velocidade média molar da mistura

Fluxo convectivo, fluxo molar médio da mistura em relação a coordenadas estacionárias

$$N_t \quad \text{mol_mistura} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$N_A, J_A \quad \text{mol_A} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$x_A \quad \text{mol_A} \cdot \text{mol_mistura}^{-1}$$

Fonte: S&H seções 3.1 e 3.3

9

Componente difusivo do fluxo

- Lei de Fick:

$$J_A = -D_{AB} \frac{\partial c_A}{\partial z} = -D_{AB} c \frac{\partial x_A}{\partial z}$$

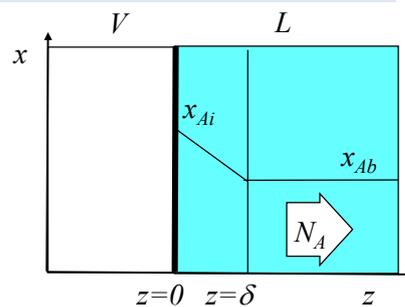
$$J_B = -D_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial z} = -D_{AB} c \frac{\partial x_B}{\partial z}$$

$$D_{AB} \quad - \quad \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

$$c_A \quad - \quad \text{mol_A} \cdot \text{m}^{-3} \text{ mist}$$

$$c \quad - \quad \text{mol_mist} \cdot \text{m}^{-3} \text{ mist}$$

$$x_A \quad - \quad \text{mol_A} \cdot \text{mol_mist}^{-1}$$



10

Condição de contorno: difusão unimolecular

- Equação geral

$$N_A = J_A + x_A \cdot N_t$$

- Condição de contorno: difusão unimolecular

$$N_B = 0, N_t = N_A$$

- Logo:

$$N_A = J_A + x_A \cdot N_A$$

$$N_A = \frac{J_A}{(1 - x_A)}$$

- Usando a lei de Fick

$$N_A = \frac{-D_{AB}c}{(1 - x_A)_{LM}} \frac{\Delta x_A}{\Delta z}$$

- Difusão unimolecular em baixa concentração de A

$$N_A = J_A$$

$$N_A = -D_{AB}c \frac{\Delta x_A}{\Delta z}$$

11

Modelo de filme

- Parâmetro do modelo é a espessura de filme δ :

$$\delta = \Delta z$$

$$N_A = \frac{-D_{AB}c}{(1 - x_A)_{LM}} \frac{\Delta x_A}{\delta}$$

- Parâmetros alternativos:

$$k_A = \frac{D_{AB}}{\delta}$$

$$k'_A = \frac{k_A}{(1 - x_A)_{LM}}$$

- Difusão unimolecular

$$N_A = \frac{-k_A c}{(1 - x_A)_{LM}} \Delta x_A = -k'_A c \Delta x_A$$

- Difusão unimolecular com baixa concentração

$$N_A = -D_{AB}c \frac{\Delta x_A}{\delta} = -k_A c \Delta x_A$$

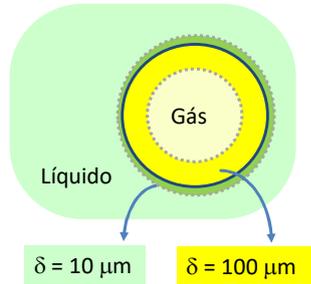
sendo

$\Delta = \text{bulk } (b) - \text{interface } (i)$

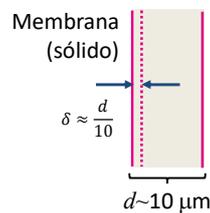
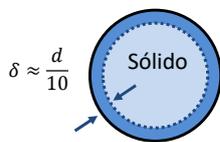
$$(1 - x_A)_{LM} = \frac{(1 - x_{Ab}) - (1 - x_{Ai})}{\ln \frac{(1 - x_{Ab})}{(1 - x_{Ai})}}$$

12

Espessuras de filme típicas



Variável	unid	Líquido	Gás
D	m^2/s	10^{-9}	10^{-5}
δ	μm	10 .. 100	100 .. 1000
$k=D/\delta$	m/s	$10^{-4} .. 10^{-5}$	$10^{-1} .. 10^{-2}$
$k c$	kg/m^2s	$10^{-1} .. 10^{-2}$	$10^{-1} .. 10^{-2}$



$$k_L c_L \approx k_V c_V$$

13

Correlações para k e δ

- Muitas correlações para k (e δ).
- Por exemplo, escoamento em torno de uma única esfera

$$Sh = 2.0 + 0.552Re^{1/2}Sc^{1/3}$$

$$2 \leq Re \leq 12,000 \quad 0.6 \leq Sc \leq 2.7$$

- Números de Sherwood (Sh), Reynolds (Re) e Schmidt (Sc)

$$Sh = \frac{kd}{D} \quad Sc = \frac{\mu}{\rho D} \quad Re = \frac{\rho dv}{\mu}$$

14

Exercício da lista TM3.1

• Gás H_2S puro é posto em contato com um jato cilíndrico laminar de água pura, e a taxa de absorção é medida (ver tabela).

• O diâmetro e a altura do jato são 1 cm e 7 cm, respectivamente.

• (a) Considerando a teoria de filme, qual a espessura do filme na fase líquida?

• (b) O que aconteceu com a espessura do filme quando a vazão aumentou? Como explicar?

• (c) Os valores encontrados são razoáveis para difusão em líquido?

Vazão do jato cm^3/s	Taxa de absorção $mol\ SO_2 \cdot s^{-1} \cdot 10^6$
0,143	1,5
0,568	3
1,278	4,25
2,372	6,15
3,571	7,2
5,142	8,75

◦ A solubilidade do H_2S na água é de $100\ mol \cdot m^{-3}$. A difusividade molecular do H_2S em água é $D_{AB} = 1,35 \times 10^{-9}\ m^2/s$ a $25^\circ C$. Admita que é nula a concentração de H_2S no seio do jato de água.

15

15

Exercício TM3.1 – Roteiro de solução

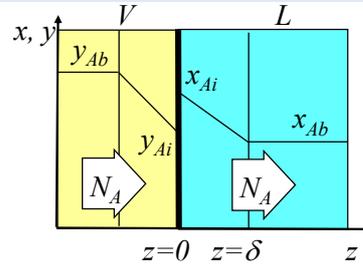
- Quais são as fases e componentes?
- Quais os componentes transportados?
- Qual a direção do escoamento? De onde para onde?
- Se houver uma fronteira de fase no caminho, o equilíbrio na fronteira é conhecido?
- A área ortogonal ao escoamento é conhecida?
- Descreva agora o TM neste sistema: escreva expressões para o fluxo e para a vazão.
- O que falta conhecer para resolver esta(s) equação(ões)?

16

16

TM através de interface: teoria de dois filmes

- Hipóteses
 - Sistema binário
 - Difusão de A em meio diluído ou contradifusão equimolecular
 - Escoamento de V (y) para L (x)
 - Interface em equilíbrio termodinâmico
 - K constante (independe da composição)
 - Regime permanente (fluxos nas duas fases são idênticos)



Seader and Henley cap 3.7
Geankoplis Cap 10, Fig. 10.4.2

17

TM através de interface: teoria de dois filmes

Fluxos de A em cada fase

$$N_A = k_V c_V (y_{Ab} - y_{Ai})$$

$$N_A = k_L c_L (x_{Ai} - x_{Ab})$$

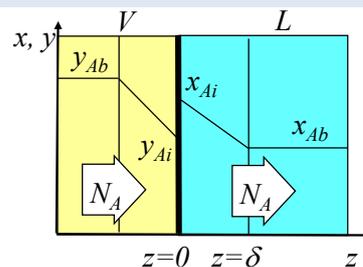
Equilíbrio na interface com

K_A constante:

$$y_{Ai} = K_A x_{Ai}$$

Símbolos

N_A	fluxo molar comp. A	$\text{mol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$	K_A – constante de equilíbrio
k_V	coef. TM na fase V	m.s^{-1}	termodinâmico (coeficiente de
k_L	coef. TM na fase L	m.s^{-1}	distribuição) para o comp. A
c_V	conc total fase V	$\text{mol mistura.m}^{-3}$	i - interface
c_L	conc total fase L	$\text{mol mistura.m}^{-3}$	b - bulk (seio da fase)
x_A, y_A	fração molar		



18

TM através de interface: teoria de dois filmes

Fluxos de A em cada fase

$$N_A = k_V c_V (y_{Ab} - y_{Ai})$$

$$N_A = k_L c_L (x_{Ai} - x_{Ab})$$

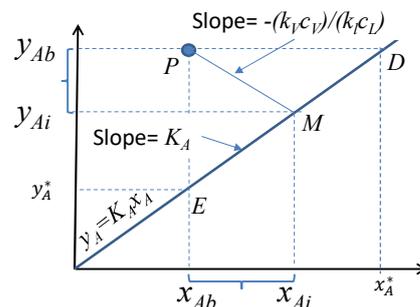
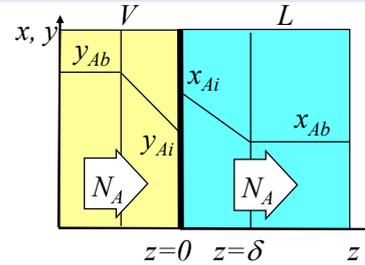
Equilíbrio na interface com

K_A constante:

$$y_{Ai} = K_A x_{Ai}$$

Combinando para eliminar a composição interfacial:

$$N_A = \left[\frac{1}{\frac{1}{k_V c_V} + \frac{K_A}{k_L c_L}} \right] (y_{Ab} - K_A x_{Ab})$$



19

TM através de interface: teoria de dois filmes

Fluxos de A em cada fase

$$N_A = k_V c_V (y_{Ab} - y_{Ai})$$

$$N_A = k_L c_L (x_{Ai} - x_{Ab})$$

Equilíbrio na interface com

K_A constante:

$$y_{Ai} = K_A x_{Ai}$$

Combinando para eliminar a composição interfacial:

$$N_A = \left[\frac{1}{\frac{1}{k_V c_V} + \frac{K_A}{k_L c_L}} \right] (y_{Ab} - K_A x_{Ab})$$

Definições

$$m_A = K_A c_V / c_L$$

$$y_A^* = K_A x_{Ab}$$

$$\frac{1}{k_{oV}} = \frac{1}{k_V} + \frac{m_A}{k_L}$$

k_{oV} coef. global de TM baseado na fase gasosa

m_A coef. de distribuição molar

Expressão para o fluxo através da interface, baseada em **composições na fase vapor**:

$$N_A = k_{oV} c_V (y_{Ab} - y_A^*)$$

20

Sistemas não diluídos

- Para concentrações elevadas, levamos em conta convecção e curva de equilíbrio não linear ($K = K(x)$).

- Para escoamento unimolecular com convecção:

$$k'_V = \frac{k_V}{(1 - y_A)_{LM}} \quad k'_L = \frac{k_L}{(1 - x_A)_{LM}}$$

- daí $\frac{1}{k'_{oV}} = \frac{1}{k'_V} + \frac{m'_A}{k'_L}$

- m'_A fica: $m'_A = \frac{y_{Ai} - y_A^*}{x_{Ai} - x_{Ab}} \cdot \frac{c_V}{c_L}$

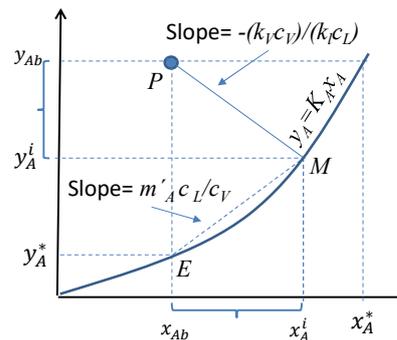
- Dedução em Geankoplis cap 10

- Os fluxos ficam:

$$N_A = k'_{oV} c_V (y_{Ab} - y_A^*)$$

$$N_A = k'_V c_V (y_{Ab} - y_{Ai})$$

$$N_A = k'_L c_L (x_{Ai} - x_{Ab})$$



21

Exemplo k_{oV} : Absorção de O_2 em água

- Seja o transporte de oxigênio do ar para a água a 1 atm e 298 K, conhecidos os coeficientes de TM individuais, dados por $k_x = D_x / 0.01 \text{ cm}$, $x=L,V$.
- (1) Indicar em qual fase a resistência ao TM é mais importante
- (2) Determinar o fluxo através das fases considerando oxigênio atmosférico e água já contendo fração molar de O_2 de $1e-6$.
- (3) O que aconteceria de o valor K fosse 10 x menor? Explicar.
- (4) E se k_V fosse 10x maior?
- (5) E se k_L fosse 10x maior?

Dados:
 $DO_2, H_2O, L = 2,1e-5 \text{ cm}^2/s$
 $DO_2, ar, V = 0,23 \text{ cm}^2/s$
 $K = 44000$

- Fonte: Cussler ex.8.5.1, simplificado aqui

22

Solução 1/2

- Etapa limitante

D_L	2,10E-05	cm ² /s	dado
K	4,40E+04	-	dado, coeficiente de distribu
$k_v = D_v/\delta_v$	2,30E-01	m/s	
$k_L = D_L/\delta_L$	2,10E-05	m/s	
C_v	40,9	mol/m ³	ar a 25 C e 1 atm (gas ideal)
C_L	55556	mol/m ³	água (O ₂ diluído)
$m' = K c_v/c_L$	32,4		
$koV(k_v, k_L, m') =$	6,48E-07	m/s	
k_v/kov	3,55E+05	kl/m'/kov	1,00
$k_v \gg kov$, logo a resistência ao TM está na outra fase, a fase L.			
y_{Ab}	2,00E-01	fr molar	O ₂ no ar
$y_{A^*} = K x_{Ab}$	4,40E-02	fr molar	definição
x_{Ab}	1,00E-06	fr molar	contorno
$x_{A^*} = y_{Ab}/K$	4,55E-06	fr molar	definição

$$k_v c_v = 9,4$$

$$k_L c_L = 1,2$$

23

23

Solução 2/2

$y_{A^*} = K x_{Ab}$	4,40E-02	fr molar	definição
x_{Ab}	1,00E-06	fr molar	contorno
$x_{A^*} = y_{Ab}/K$	4,55E-06	fr molar	definição
--> NA	4,1E-06	molA/m²s	eq fluxo global
y_{Ai}	2,00E-01	fr molar	eq fluxo lado vapor
x_{Ai}	4,55E-06	fr molar	eq fluxo lado liq
(3)	Refazendo os cálculos para K menor		
$K/K_{inicial}$	0,1		
K	4.400		
$NA =$	5,2E-05	molA/m ² s	
$NA/NA_{inicial} =$	13		
Logo, dividindo K por 10 provoca um aumento no fluxo de 13 vezes.			
(4)	Refazendo os cálculos para k_v 10x maior		
$NA/NA_{inicial} =$	1,0E+00		
k_v não afeta o fluxo, logo o controle não está na fase vapor			
(5)	Refazendo os cálculos para k_L 10x maior		
$NA/NA_{inicial} =$	1,0E+01		
o aumento de k_L provoca aumento do fluxo, logo o líquido controla o fluxo			

24

24

Resumo 1/2

- Num separador, massa é transportada dentro de uma fase em direção à interface

- Fluxo é ortogonal à interface



- Fluxo tem componentes **difusivo** e **convectivo**.

$$N_A = J_A + x_A N$$

- Para escoamento unimolecular ----->

$$N_A = J_A / (1 - x_A)$$

- Em soluções diluídas a convecção pode ser desprezada

$$N_A = J_A$$

- A área interfacial (a') é determinada pela fração volumétrica (ε) e tamanho das partículas (d) da fase dispersa

$$a' = \frac{6\varepsilon}{d} \frac{\text{m}^2 \text{ interface}}{\text{m}^3 \text{ mistura}}$$

- A vazão de componente transportado é obtida a partir do fluxo e da superfície.

$$W_A = N_A \cdot a' \cdot Vol$$

25

Resumo 2/2

- Taxa de TM para escoamento dentro de uma fase é descrita com modelo de filme.

$$J_A = \frac{D_{AB}}{\delta} \Delta c = k_A \Delta c$$

$$N_A = k_V c_V (y_A^i - y_A)$$

- Tal modelo pode ser estendido para escoamento através de 2 fases.

$$N_A = k_{oV} c_V (K x_A - y_A)$$

- A força motriz para o fluxo é o afastamento do equilíbrio termodinâmico.

26

Exercício da lista TM 3.2

Considere o processo do exercício anterior, absorver H_2S em água, exceto que o gás é uma corrente de ar com 1% molar de H_2S .

(a) Estime o coeficiente de distribuição K_{H_2S} a partir da solubilidade dada, admitindo que em baixa conc. de líquido H_2S segue a lei de Henry.

(b) Calcule o valor do coeficiente global de troca de massa a partir dos coeficientes individuais. Para a fase líquida use a espessura da camada já calculada, para o vapor adote $1000 \mu m$.

(c) Qual fase controla o TM?

(d) Calcule a taxa de absorção em água. Compare com o caso do exercício anterior. A difusividade molecular do H_2S no ar é $D_{AB}=1,3 \cdot 10^{-5} m^2/s$ a $25^\circ C$. Admita concentração nula de H_2S no seio do Jato.

27

27

OP III / PQI3402 Balanços em um estágio

Marcelo Seckler

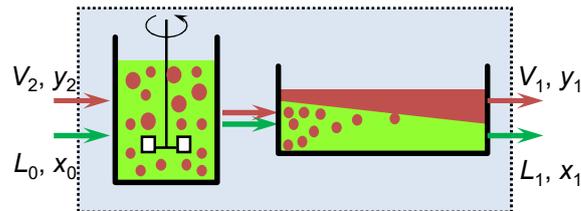
*Textos de apoio: Seader&Henley seções 3.1, 3.6, 3.7
Geankoplis seção 10.4
McCabe, Chap.22, Section "Principles of Absorption"*

28

Balanço de massa em estágio de equilíbrio

- Exemplo:

- extração L-L em um estágio, com transporte da fase principal (L) para a auxiliar (V)



29

Balanços de massa em estágio de equilíbrio

- Conhecidos a alimentação (vazões molares L e V , frações molares x_0 e y_2) e o equilíbrio (K), indicados em preto abaixo

- Balanço de massa em torno da fase auxiliar para o componente:

- $Vy_2 + NA = Vy_1$ (1)

- Balanço de massa no estágio para o componente:

- $V(y_2 - y_1) = L(x_1 - x_0)$ (2)

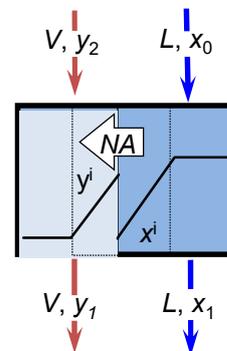
- Hipóteses: regime permanente, baixas concentrações, apenas 1 componente é transportado (não são necessárias equações para outros componentes)

- Equilíbrio termodinâmico

- $y_1 = K x_1$ (3)

3 equações
3 desconhecidas
(em azul)

- Hipótese: correntes na saída em equilíbrio. O TM se dá até o equilíbrio, ele não precisa ser calculado.



30

Balanço de massa em estágio de equilíbrio

- Combinando as equações (2) e (3) e rearranjando obtemos a saída do estágio:

$$x_1 = \frac{S y_2 + K x_0}{K(S + 1)}$$

Útil só em condições específicas, mais fácil resolver o balanço

$$y_1 = K x_1$$

$$N_A = V(y_2 - y_1)$$

- sendo $S = KV/L$

S é o fator de stripping

- A recuperação (R) e a fração não extraída (f) são obtidas de suas definições, considerando transporte do componente de interesse de L a V

$$R \equiv \frac{V y_1}{L x_0}$$

Redefinir conforme o objetivo da separação e a direção do fluxo

$$f \equiv 1 - R$$

- f = massa não extraída / massa alimentada = $L x_1 / L x_0$

- Se fase auxiliar V pura ($y_2=0$):

$$R = \frac{S}{1 + S}$$

Útil só em condições ainda mais específicas

31

31

Concentrações elevadas

- Usamos frações molares e vazões livres de soluto. Para componentes A,B,C ...:

$$z_A \equiv \text{mol}_A / \text{mol}_{A+B+C...}; \quad F \equiv \text{mol}_{A+B+C...} / S$$

$$z_A' \equiv \text{mol}_A / \text{mol}_{B+C+...}; \quad F' \equiv \text{mol}_{B+C+...} / S$$

$$\begin{aligned} \text{Logo} \quad z_A' &= z_A / (1 - z_A) & F' &= F (1 - z_A) \\ z_A &= z_A' / (1 + z_A') & F &= F' (1 + z_A') \end{aligned} \quad (4)$$

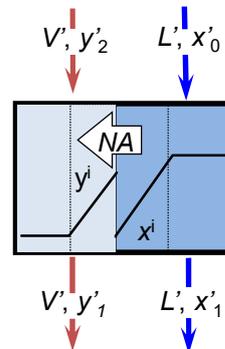
- O balanço de massa e o equilíbrio ficam:

$$V'(y_2' - y_1') = L'(x_1' - x_0') \quad (5)$$

$$y_1' / (1 + y_1') = K x_1' / (1 + x_1') \quad (6)$$

- Hipóteses:

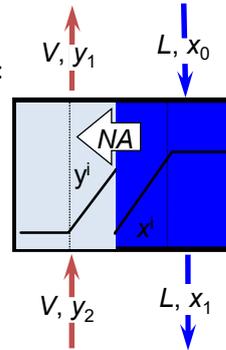
- apenas o soluto é transportado, logo V' e L' são iguais na entrada e saída
- regime permanente
- correntes na saída em equilíbrio termodinâmico.



32

Balanços de massa em estágio com TM: mistura ideal nas 2 fases (mix-mix)

- Conhecidas variáveis e parâmetros que definem alimentação, TM, equilíbrio e área interfacial, indicadas em preto abaixo.
- Balanços de massa p/comp na fase auxiliar e no separador:
 - $Vy_2 + NA = Vy_1$ (1)
 - $V(y_2 - y_1) = L(x_1 - x_0)$ (2)
 - Hipóteses: regime permanente, baixas concentrações
- Taxa de TM
 - $N = J + Nx_1 = J$
 - $N = k_{OV} c_V (Kx_1 - y_1)$ (3)
- Interface como antes: $A = 6 V_{\text{separador}} \varepsilon / d$ (4)

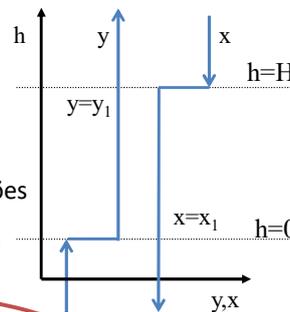


4 equações
4 desconhecidas
(em azul)

33

Balanços de massa em estágio com TM: mistura ideal nas 2 fases (mix-mix)

- Conhecidas variáveis e parâmetros que definem alimentação, TM, equilíbrio e área interfacial, indicadas em preto abaixo.
- Balanços de massa como antes:
 - $Vy_2 + NA = Vy_1$ (1)
 - $V(y_2 - y_1) = L(x_1 - x_0)$ (2)
 - Hipóteses: regime permanente, baixas concentrações
- Taxa de TM unimolecular por difusão sem convecção
 - $N = J + Nx_1 = J$
 - $N = k_{OV} c_V (Kx_1 - y_1)$ (3)
- H: sistema binário, transporte unimolecular, curva de equilíbrio é uma reta: $y = Kx$ (K independente de x, T, P)
- Interface como antes: $A = 6 V_{\text{separador}} \varepsilon / d$ (4)



H: escoamento
mix - mix!

34

Balanços de massa em estágio com TM: mistura ideal nas 2 fases (mix-mix)

- Definimos os adimensionais:

- Number of Transfer Units (NTU)* expressa a efetividade do TM:

$$NTU = A k_{ov} c_v / V$$

- Fator de stripping*

$$S = K V / L$$

- Usando-se essas definições, os balanços de massa e as equações de transporte do estágio (eq 1 a 3) fornecem:

$$y_1 = \frac{y_2(1 + NTU \cdot S) + x_0 NTU K}{NTU(S + 1) + 1}$$

$$x_1 = x_0 + \frac{V}{L}(y_2 - y_1)$$

- Portanto, a composição na saída é calculada a partir do: desempenho do transporte de massa (expresso pelo NTU); equilíbrio de fases (expresso por S); vazões (também S).

- Estas equações também podem ser usadas para obter o tamanho do estágio requerido (NTU embute A) para uma tarefa especificada (composição na saída x_1 conhecida).

Útil só em condições específicas, alternativamente resolver os balanços

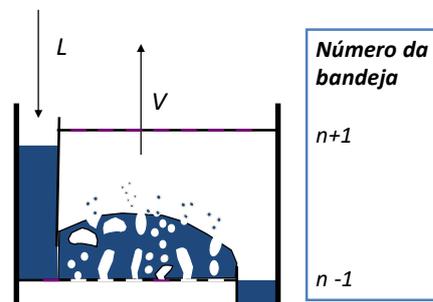
35

Balanços de massa em estágio com TM: 1 fase em escoamento pistonado: mix-plug

- Exemplo: bandeja para absorção ou destilação

- Assume-se:

- Fase L em mistura ideal e V pistonado, com TM
- Transporte da fase principal (L) para a auxiliar (V) de 1 só componente
- Correntes diluídas ($V_1 = V_2 = V$, $L_1 = L_2 = L$), sem efeitos térmicos
- Sistema binário, transporte unimolecular, sem convecção
- Curva de equilíbrio é uma reta: $y = Kx$, K independente da composição, T e P



36

Mix-plug

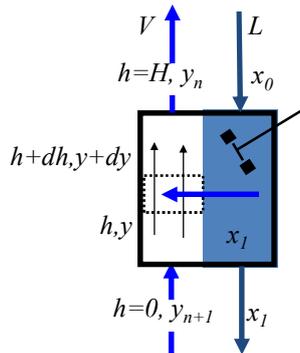
- Balço de massa em fatia diferencial da fase auxiliar (V), para o componente sendo transportado:

$$Vdy = N_A dA$$

$$Vdy = [k_{oV} c_V (Kx_1 - y)] [a' A_{cross} dh]$$

$$\frac{dy}{dh} = \frac{NTU}{H} (Kx_1 - y) \quad (1)$$

(na fase L, em todo o separador $x=x_1$)



$$NTU = (a' A_{cross} H) k_{oV} c_V V^{-1}$$

NTU – number of transfer units

37

Mix-plug

- Balço de massa em torno do estágio como um todo (ambas as fases e altura total), para o componente sendo transportado:

$$Vy_2 + Lx_0 = Vy_1 + Lx_1 \quad (2)$$

- (2) em (1) para eliminar x_1 e integrando de $h=0$ a $h=H$

$$\int_{y=y_2}^{y=y_1} \frac{1}{c-y} dy = \int_{h=0}^{h=H} \frac{NTU}{H} dh \quad c = S(y_2 - y_1) + x_0 K, \quad S = KV/L$$

$$-\ln \frac{(c-y_1)}{(c-y_2)} = -NTU$$

$$y_1 = \frac{K(1-\lambda)x_0 + (S-\lambda S + \lambda)y_2}{1+S-\lambda S}$$

$$\lambda = \exp(-NTU)$$

- Isolando x_1 em (2):

$$x_1 = (V/L)(y_2 - y_1) + x_0$$

Útil só em condições específicas

38

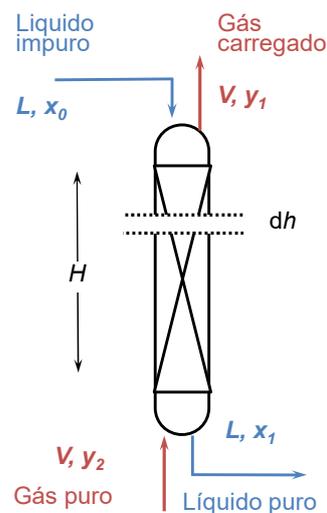
Simbologia

- V, L vazão molar, mol/s
- x, y frações molares do componente A nas fases L e V, respect
- x', y' frações molares livres de solvente
- K coeficiente de distribuição para o componente A, mol/mol
- N_A fluxo molar do componente A entre as fases
- k_{oV} coef global transporte de massa base vapor, m/s
- c_v densidade molar da mistura fase V, mol mist/m³ mist
- h, H altura infinitesimal e altura total do contator
- a' área de troca por unidade de volume de contator
- $A_{cross} dh$ volume infinitesimal do contator
- NTU number of transfer units, nr. de unidades de transferência

39

Ambas as fases em escoamento pistonado: plug-plug

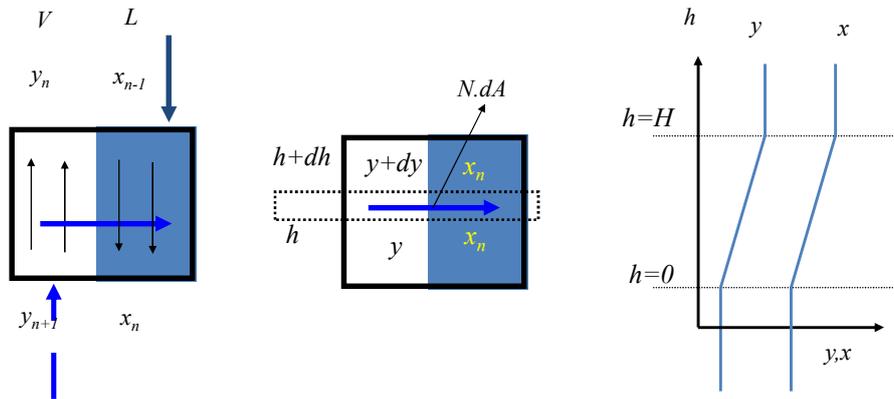
- Estágio com TM
- Exemplo: absorção ou extração L-L
- Operação contínua em contracorrente.
- Assume-se:
 - Correntes diluídas ($V_1 = V_2 = V, L_1 = L_2 = L$)
 - Apenas um componente é transportado de V a L (antes era de L a V!)
 - Linha de equilíbrio é uma reta



Texto de Apoio: McCabe, Chap.22, Section "Principles of Absorption"

40

Plug-plug



41

Plug-plug

- Balanço de massa para o componente sendo transportado, em torno de uma fatia diferencial do lado V:

$$V dy = N_A dA \quad y_A^* = K x_A$$

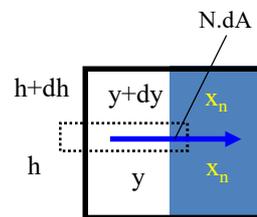
$$V dy = [\Rightarrow k_{ov} \Rightarrow c_V \Rightarrow (y_A^* - y_A)] \Rightarrow [a \Rightarrow A_{cross} dh]$$

- Isolando a altura da coluna

$$\frac{V}{A_{cross}} \frac{1}{c_V a k_{ov} (y_A^* - y_A)} dy = dh$$

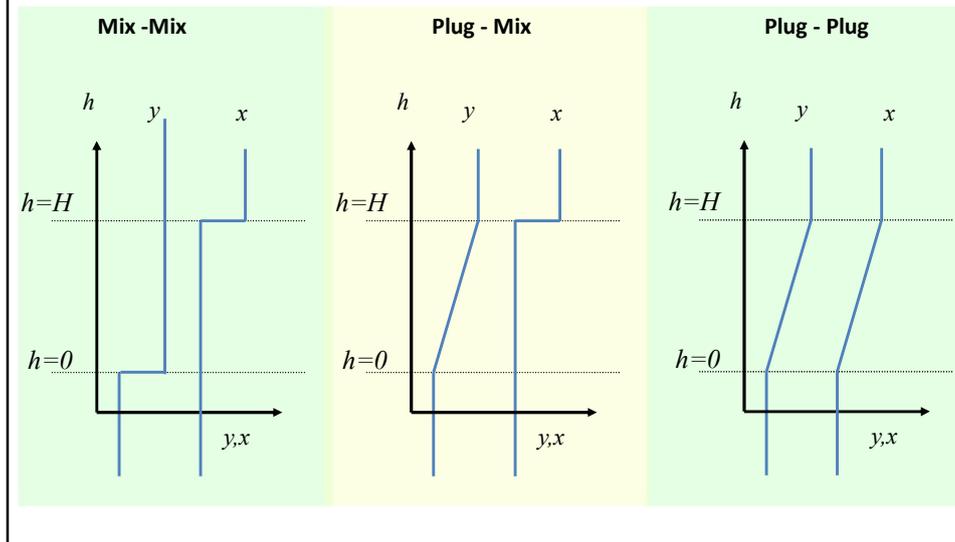
- Integrando sobre o toda a coluna

$$\frac{V}{A_{cross}} \int_{y_2}^{y_1} \frac{1}{(y_A^* - y_A)} dy = \int_0^H dh$$



42

Comparação entre tipos de escoamento



43

Exercício 3.3 – TM em configuração mix-mix

- Uma solução aquosa contendo $x_0=1\%$ molar de ácido acético deve ser tratada para recuperar o ácido e evitar sua emissão ao ambiente. Será usado um estágio de extração L-L do tipo mixer-settler (isopropil-eter é o solvente).
- Avalie o desempenho em termos do rendimento e da pureza obtidos. Compare o desempenho do estágio real com um estágio de equilíbrio. Dados:
 - Volume do separador 1 m³
 - Fração volumétrica da fase dispersa 0.3
 - Diâmetro de bolha 1 mm
 - Vazões e densidades nas 2 fases: 10 mol/s, 10⁶/18 mol/m³
 - Concentrações de entrada: $x_0=0.01$ $y_2=0$
 - Constante de equilíbrio: $K=5$
 - Coeficiente de TM em cada filme: $k_L = k_V = 10^{-6}$ m/s

44

Solução – TM em configuração mix-mix

- Mix-mix com transporte de massa

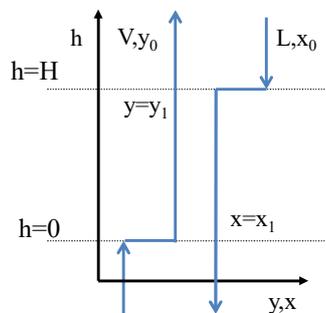
0.0076	0.01
0.0076	0.0024
0	0.0024

R=0,76

- Mix-mix estágio de equilíbrio

0.0083	0.01
0.0083	0.0016
0	0.0016

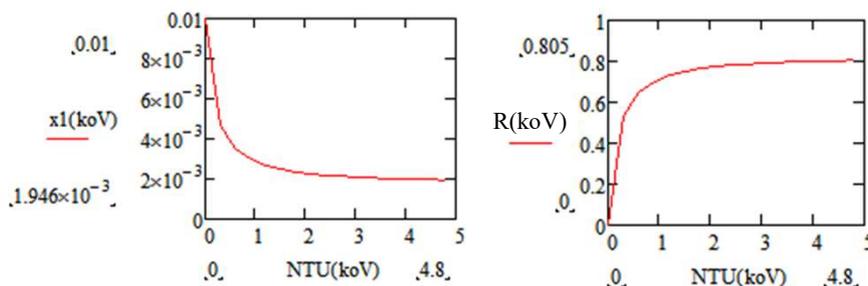
R=0,83



Tempo de residência =
46 min

45

Discussão – TM em configuração mix-mix



Ao aumentarmos o NTU, o TM aumenta. Entretanto, a partir de um certo valor de NTU, o TM não é mais determinante, de forma que não há aumento adicional na taxa de TM.

Esta tendência pode ser vista tanto a partir da evolução da concentração na fase principal (x_1) quanto da recuperação (R).

46

Exercício 3.4 – TM em configuração mix-plug

- Avalie o desempenho de uma bandeja para extração líquido-líquido com escoamentos mix-plug com transporte de massa e:
 - (a) compare com um estágio de equilíbrio.
 - (b) compare com escoamento mix-mix.
- Mesmas condições que o exercício anterior, isto é:
 - Fração molar de ác. acético na alimentação 0.01
 - Volume do reator 1 m^3
 - Fração volumétrica da fase dispersa 0.3
 - Diâmetro de bolha 1 mm
 - Vazões e densidades nas 2 fases: 10 mol/s , $10^6/18 \text{ mol/m}^3$
 - Concentrações de entrada: $x_0=0.01$ $y_2=0$
 - constante de equilíbrio: $K=5$
 - Coeficiente de TM em cada filme: $k_L = k_V = 10^{-6} \text{ m/s}$

47

Stage with one phase mixed and the other in plug flow

Problem

Given a tray for liquid-liquid extraction (flow from L to V) in continuous operation, evaluate the stage performance and compare to an equilibrium stage.

Given :

reactor area, interface area $A_c := \pi \cdot 1.5^2 \text{ m}^2$ $a := 1800 \text{ m}^{-1}$ $H := 0.15 \text{ m}$

flows of both phases (equivalent to 640 kg/h water):

$V := 10 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$ $L := 10 \frac{\text{mol}}{\text{s}}$ $c_V := \frac{10^6}{18} \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$ $c_L := \frac{10^6}{18} \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$

inlet concentrations: $x_0 := 0.01$ $y_2 := 0$

equilibrium constant: $K := 5$ $S := K \cdot V \cdot L^{-1}$ $S = 5$

mass transfer coefficient in each film: $k_L := 10^{-6} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ $k_V := 10^{-6} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

48

Solution

$$m := K \cdot \frac{cV}{cL} \quad m = 5 \quad koV := \left(\frac{m}{kL} + \frac{1}{kV} \right)^{-1} \quad koV = 1.667 \times 10^{-7} \frac{m}{s}$$

$$NTU := a \cdot Ac \cdot koV \cdot \frac{H \cdot cV}{V} \quad NTU = 1.767 \quad \lambda := \exp(-NTU) \quad \lambda = 0.171$$

$$y1 := \frac{K \cdot (1 - \lambda) \cdot x0 + (S - S \cdot \lambda + \lambda) \cdot y2}{1 + S - S \cdot \lambda} \quad y1 = 8.057 \times 10^{-3}$$

$$x1 := \frac{V}{L} \cdot (y2 - y1) + x0 \quad x1 = 1.943 \times 10^{-3}$$

$$Y := V \cdot \frac{y1}{L \cdot x0} \quad Y = 0.806$$

e

49

Equilibrium stage:

(Equilibrium stage is the same as for mix-mix)

$$x1es := \frac{\left(x0 + \frac{V}{L} \cdot y2 \right)}{1 + S} \quad x1es = 1.667 \times 10^{-3}$$

$$y1es := K \cdot x1es \quad y1es = 8.333 \times 10^{-3}$$

$$Yes := S \cdot \frac{x1es}{x0} \quad Yes = 0.833$$

Yield obtained is close to theoretical. This can be understood from the long residence time, as shown bellow

$$Vol := Ac \cdot H \quad Residtime := \frac{Vol}{\frac{V}{cV}} \quad Residtime = 5.89 \times 10^3 s$$

50

Exemplo mix-plug: solução

- Mix-mix $R=0,76$

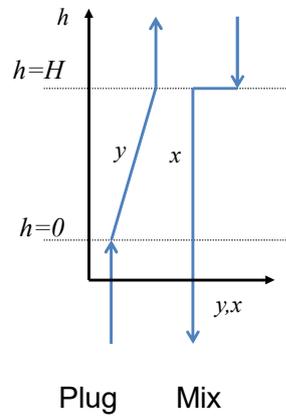
0.0076	0.01
0.0076	0.0024
0	0.0024

- Plug-mix $R=0,81$

0.0081	0.01
Perfil !	0.0019
0	0.0019

- Estágio de equilíbrio $R=0,83$

0.0083	0.01
0.0083	0.0016
0	0.0016



51

Exercício da lista TM3.3

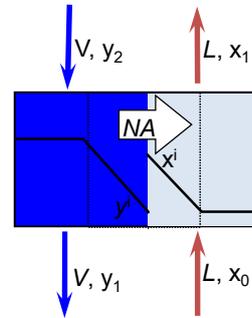
- Nos exercícios anteriores, foi considerado o fluxo de SO_2 entre 2 fases considerando condições fixas a montante e jusante do escoamento. Deseja-se agora caracterizar um separador contínuo de um único estágio, admitindo mistura ideal em ambas as fases, nas condições abaixo. Pede-se:
 - (a) as composições das fases líquida e vapor na saída do estágio.
 - (b) a recuperação da absorção do H_2S na água.
 - (c) Compare com a operação de um estágio de equilíbrio.

Variável	Valor	Unidade	Descrição
y_2	0.01	-	fração molar de H_2S em V na entrada
x_0	0	-	fração molar de H_2S em L na entrada
A	2	m^2	área de contato entre as fases
L	2	mol/s	vazão de água
V	0.001	mol/s	vazão de ar
k_{ov}	$9.7\text{E}-05$	m/s	coeficiente global de TM
K	555.56	-	coeficiente de distribuição
cV	40.92	gmol/m^3	densidade molar do gás, $P=1\text{atm}$ e $T=298\text{K}$

52

52

Exercício TM 3.3



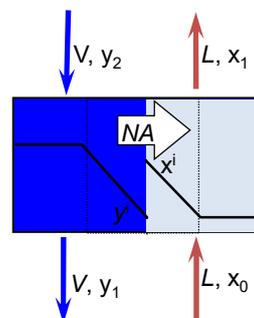
53

53

Exercício da lista TM 5.1

- Deseja-se remover 85% do NO_2 contido numa corrente de ar empregando-se adsorção em sílica gel num adsorvedor contínuo em mistura ideal. A corrente a ser tratada tem vazão de 0,5 kg/s e fração mássica de NO_2 de 0.025. Qual a vazão da corrente de gel requerida? Assuma que ela é pura na entrada. O sistema opera a pressão atmosférica. O NO_2 no gel segue a lei de Henry com $H_{\text{NO}_2} = 1,05 \text{ atm}$.

unidades	
V	kg ar+NO ₂ /s
L	kg gel+NO ₂ /s
y	kg NO ₂ / kg ar+NO ₂
x	kg NO ₂ / kg gel+NO ₂
R	kg NO ₂ recuperado/alimentado
H	atm kg/kg



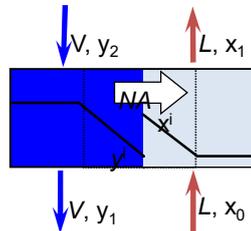
Solução ver planilha excel

54

54

Exercício TM 5.1 – Roteiro

- Antes de iniciar os cálculos
 - Identificar fases e componentes. Qual a fase principal e a auxiliar?
 - Quais componentes são transportados entre as fases? Qual a direção do transporte?
 - Processo contínuo ou em bateladas?
 - Há limitação de TM?
 - Quais modelos termodinâmicos para cada componente transportado?
 - Meio diluído?
 - Efeitos térmicos?
- Cálculos
 - Definir/escolher indicador de desempenho
 - Definir eqs. para BM, TM, EQ consistentes com definições/hipóteses
 - Identificar graus de liberdade
 - Montar estratégia de cálculo



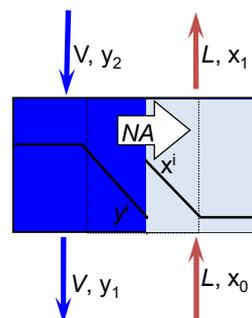
55

55

Exercício da lista TM 5.2

- Uma corrente de ar contaminada com benzeno escoava com 40 mol/s e 0,08 mol/mol_ar a 1 atm e 300 K. Deseja-se recuperar o benzeno por absorção numa corrente de óleo com 10 mol/s e 0,05 mol/mol_ar. Quais as concentrações na saída do separador? Qual a recuperação do benzeno na corrente de óleo? Admita que há mistura ideal em ambas as fases e que o benzeno em solução tem comportamento ideal (pressão de vapor do benzeno a 300 K é 0,136 atm).

unidades	
V	kg ar+NO ₂ /s
L	kg gel+NO ₂ /s
y	kg NO ₂ / kg ar+NO ₂
x	kg NO ₂ / kg gel+NO ₂
R	kg NO ₂ recuperado/alimentado
H	atm kg/kg



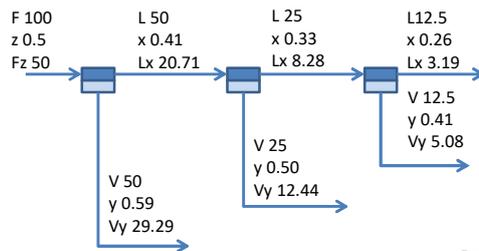
Solução ver planilha excel

56

56

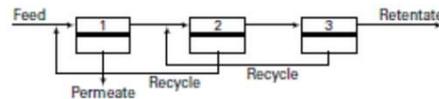
Cascatas: membranas

- Unidades em série aumentam pureza, mas diminuem recuperação

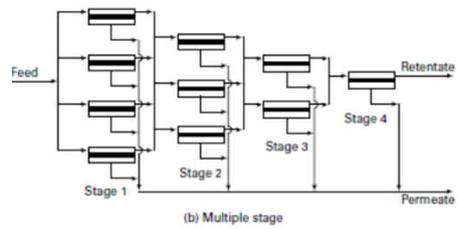


$$\alpha = 2; y = \frac{\alpha x}{1 + x(\alpha - 1)} = \frac{2x}{1 + x(2 - 1)} = \frac{2x}{1 + x}$$

- Unidades em série + reciclo para obter alta pureza e alta recuperação



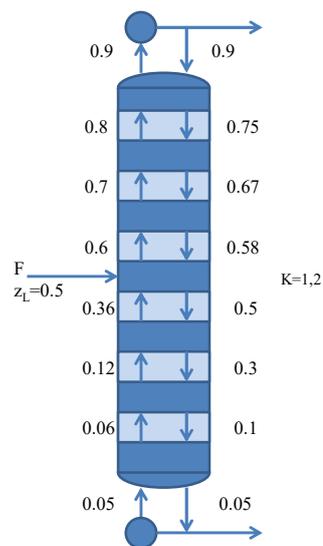
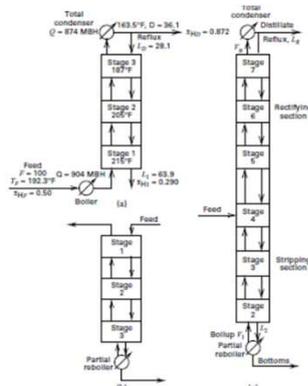
- Unidades em paralelo aumentam capacidade



57

Cascatas: destilação

- Cascatas com duas seções
 - Permitem obter duas correntes com alta pureza
 - Usadas em destilação



58

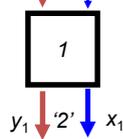
Cascatas – método de grupo de Kremser

Hipóteses

N estágios de equilíbrio
K, L e V constantes (diluído)
1 só comp. transportado L→V
 $y_2=0$

Co-corrente

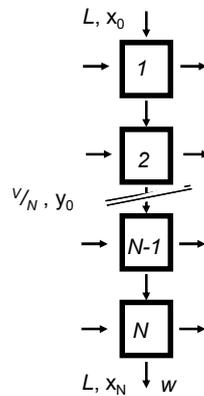
V, y_0 '0' x_0, L



$$f = \frac{x_N}{x_0} = \frac{1}{1+S}$$

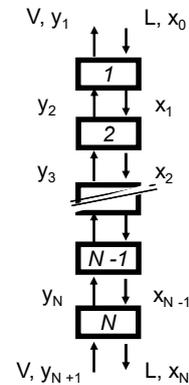
$$S = KV/L$$

Corrente cruzada



$$f = \frac{x_N}{x_0} = \frac{1}{(1+S/N)^N}$$

Contra-corrente



$$f = \frac{x_N}{x_0} = \frac{S-1}{S^{N+1}-1}$$

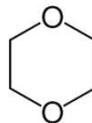
Texto de apoio para o tema “cascatas”: Seader & Henley seções 5.3 e 5.4.

59

59

Exercício 3.5: cascata

◦ Deseja-se extrair p-dioxano de uma solução aquosa usando-se benzeno puro como solvente. Compare os contatos cocorrente, cruzado e contra corrente para 5 estágios de equilíbrio. Sabe-se:



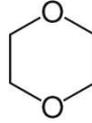
- Teor de p-dioxano na solução aquosa e no benzeno são 5% e 0% em massa, respectivamente
- Vazão de solução aquosa= 4.000 kg/h
- Vazão de solvente= 7.000 kg/h
- O coeficiente de partição para o dioxano na mistura situa-se entre 1.0 e 1.4 a 25 °C.
- Benzeno e água são mutuamente insolúveis.

60

60

Exercício 3.5 – roteiro

- Deseja-se extrair p-dioxano de uma solução aquosa usando-se benzeno puro como solvente. Compare os contatos cocorrente, cruzado e contra corrente para 5 estágios de equilíbrio. Sabe-se:
 - Teor de p-dioxano na solução aquosa e no benzeno são 5% e 0% em massa, respectivamente
 - Vazão de solução aquosa= 4.000 kg/h
 - Vazão de solvente= 7.000 kg/h
 - O coeficiente de partição para o dioxano na mistura situa-se entre 1.0 e 1.4 a 25 °C.
 - Benzeno e água são mutuamente insolúveis.



- Identificar fases e componentes transportados
- Montar fluxograma do processo e identificar variáveis conhecidas e desconhecidas
- Escolher indicador de desempenho a ser calculado
- Avaliar simplificações aplicáveis
- Escolher modelo para representar o processo para escoamentos cocorrente e contracorrente
- Calcular o desempenho

61

61

Resumo

- Estágio com limitação de TM é descrito por balanços de massa + modelo de 2 filmes.
- Recuperação e pureza no estágio depende da forma de contato: mix-mix < plug-mix < plug-plug
- Estágios em contra corrente melhor que correntes cruzadas
 - Para estágio de equilíbrio, K constante, diluído e alimentação de fase auxiliar pura ($y_2=0$) e contra-corrente Kremser:

$$f = \frac{x_N}{x_0} = \frac{S - 1}{S^{N+1} - 1}$$

62