

## RESUMO

O objectivo principal deste trabalho consistia na tentativa de evidenciar a riqueza da solução encontrada para a optimização da extracção líquido-líquido quando encarada sob a perspectiva multicritério, face à postura ainda muito usual da optimização guiada por um só objectivo. Utilizando a aproximação da soma ponderada dos critérios de decisão, pretendia-se obter não só a optimização paramétrica (definida pelas melhores condições de operação: tempo de residência, velocidade de agitação e razão de fases) como também informação útil para a optimização estrutural (sintetizada pelo melhor diagrama de fluxos: número de andares de extracção, estrutura de fluxos e razão de recirculação).

O exemplo tomado para levar a cabo este propósito consistiu na extracção por solvente de dois metais com propriedades químicas muito próximas, o zinco e o cádmio, espécies encontradas frequentemente juntas nos lixiviados de minérios complexos, e os misturadores-decantadores, vulgarmente utilizados nas indústrias mínero-metalúrgicas, como equipamento de extracção.

O modelo matemático representativo da unidade de extracção resultou do acoplamento de dois modelos já existentes, ambos para o estado estacionário: o que resultou dos trabalhos de Ruiz (1985) e Padilla (1996), caracterizador do comportamento hidrodinâmico de decantador e o de Guimarães (1989), representativo da hidrodinâmica e da transferência de massa no misturador. Ambos os modelos foram reestruturados em dois algoritmos interligados: o primeiro caso, e por só dispormos de informação relativa ao modelo matemático propriamente dito, levou à criação de raiz de uma estrutura de resolução; o misturador, e dada a disponibilidade das fontes do código informático original, exigiu alterações para a inclusão da reacção química (nas circunstâncias de o processo ser controlado pela difusão) e a extracção de dois componentes.

O código computacional criado para o decantador foi testado com os resultados experimentais e numéricos publicados pelos autores. Numa instalação piloto criada para o efeito, obtivemos resultados experimentais relativos ao comportamento hidrodinâmico da banda de dispersão no

decantador que permitiram a sua confrontação com os resultados numéricos provenientes do algoritmo resultante do acoplamento dos dois modelos. Em ambos os casos, os resultados numéricos revelaram uma boa concordância com os dados experimentais.

Numa fase posterior, o modelo do misturador-decantador foi introduzido numa subrotina independente de um simulador de *flowsheeting*, o *Simul*, criado por Durão (1988), com a finalidade de procedermos à desejada análise de circuitos com várias unidades associadas entre si de diversas formas.

Na fase de análise de resultados propriamente dita, começámos por debruçar-nos sobre o estudo da sensibilidade dos critérios de decisão antagónicos (recuperação e pureza em zinco) às condições operatórias (tempo de residência, velocidade de agitação e razão de fases), tomando como parâmetro, alternadamente, uma dessas condições. Três conclusões principais tornaram-se desde logo evidentes: i) os efeitos opostos da razão de fases na pureza e na recuperação, ii) a elevada sensibilidade de curtos tempos de residência óptimos à variação da velocidade de agitação, iii) a capacidade das associações de unidades em contra-corrente para amortecerem flutuações no peso relativo dos dois critérios de decisão (eventualmente provocadas por alterações de mercado ou políticas ambientais).

Por último, procedemos à optimização global paramétrica (i.e., sem parametrização de nenhuma das condições operatórias), recorrendo a um método de optimização multivariável com restrições: o método de Lagrange-Newton. Os resultados obtidos, além de reiterarem as conclusões anteriores, evidenciaram i) a riqueza e a maior abrangência das soluções obtidas pela perspectiva da optimização multicritério, quando comparadas com as obtidas se o ponto de vista inicial fosse o de um critério único, ii) o facto de a optimização multicritério incorporar naturalmente a análise de sensibilidade, útil para prever e/ou evitar afastamentos entre a implementação e as especificações de projecto e flutuações incontroláveis, tanto na composição e caudais da alimentação do processo como nas circunstâncias de mercado e ambientais.

## ABSTRACT

The main objective of the present work is an attempt to produce substantive evidence about the conceptual wealth of the solutions of a liquid-liquid extraction problem within the framework of multi-criterion optimization, as compared to the more conventional single-objective stance. By using the weighed sum approach to the definition of the decision criterion, parametric optimization (i.e., defining the best operating conditions: residence time, agitation speed and phase flow ratio) is attained as well as significant information about structural optimization (i.e., defining the best flow diagram: number of stages, flow structure and recycle ratio).

As a case study for displaying this methodology, the solvent extraction of two chemically similar metals – zinc and cadmium, two species commonly found in ore leach liquors – was chosen, as well as the most common extraction equipment used in the metallurgical industry – the mixer settler combination.

The mathematical model representing the extraction stage was obtained by coupling two steady-state models described in the literature: the model developed by Ruiz (1985) and Padilla (1996) describing the hydrodynamic behaviour of the settling unit, and Guimarães' (1989) model describing the hydrodynamics and mass transfer in the mixer. Both models were restructured into a combined algorithm where the former received a whole new – and simpler but not less accurate – resolution structure and the latter – given the availability of the source code – was simply extended to accommodate two-component extraction and chemical reaction at the drop surface under diffusion controlled transport kinetics.

The computational code created for the settler was tested against the original authors' data as well as against fresh experimental data. A purpose-designed-and-built experimental set-up was used to obtain detailed new data for the geometry of the dispersion band in the settler. In both instances, numerical results showed good agreement with experimental data.

At a later development stage, the mixer-settler algorithm was incorporated as an autonomous subroutine in the flow-sheeting simulator, SIMUL, developed by Durão (1988), in order to obtain proper design data for circuits combining several units in different topologies.

At the analysis stage, the sensitivity of the two opposed design criteria (purity and recovery) to the operating conditions (residence time, agitation speed and dispersed phase hold-up), using, in succession, each one of these as a parameter. Three major conclusions became immediately evident: i) the opposed effects of the hold-up on purity and recovery; ii) the strong sensitivity of short optimum residence times to agitation speed; iii) the ability of counter-current associations to dampen down variations of the relative weight of the two design criteria, eventually generated by market and/or environmental policy fluctuations.

Finally, global parametric optimization (i.e., without parameterization of any of the operating conditions) was performed, using a well-known multi-criterion optimization strategy with constraints, the Newton-Lagrange method. The emerging results confirmed the previous analysis and brought forward: i) the wealth and breadth of the solutions, when compared with the more common single-criterion outlook; ii) the fact that multi-criterion optimization automatically incorporates sensitivity analysis and is useful to predict/avoid harmful effects of unavoidable departures of the implementation from the design specifications as well as uncontrolled fluctuations of feed composition and flow-rate and/or market conditions and/or environmental policies.