

## Resumo

Neste trabalho é tratada a modelagem e simulação computacional de operações de extracção líquido-líquido em andares, operando em contracorrente.

Inicialmente e numa perspectiva histórica são sucessivamente referidas as contribuições mais relevantes para a descrição de unidades de separação. Os métodos algébricos simplificados, em regra limitados à descrição da separação de misturas binárias, dão lugar a métodos gráficos e estes a métodos computacionais. É referida a evolução dos meios de cálculo automático sendo salientada a importância decisiva desse facto na aplicação de métodos matemáticos evoluídos à descrição da maioria das operações do âmbito da engenharia química.

Após serem apontadas as razões próprias que distinguem as operações de destilação e de extracção líquido-líquido e que justificam um tratamento diferenciado, a operação de extracção é descrita com detalhe.

São indicados os arranjos mais comuns de operação de extractores em andares e citados alguns dos exemplos mais relevantes de utilização industrial da operação de extracção. Segue-se a sua descrição em termos matemáticos sendo apresentados os modelos dinâmico e estacionário respectivos; são ainda enumerados alguns dos métodos de projecto e simulação que têm sido propostos, merecendo particular destaque os métodos de simulação computacional.

O equilíbrio de fases desempenha um papel essencial na caracterização das unidades de extracção líquido-líquido. Na revisão dos métodos disponíveis para descrever o equilíbrio líquido-líquido, são particularmente referidos os esforços recentes para o estabelecimento de métodos simplificados de aproximação de propriedades termodinâmicas, tendo em vista uma redução do importante esforço de cálculo associado à avaliação dessas propriedades quando estão em causa sistemas complexos com comportamento fortemente não ideal.

Este tema é desenvolvido com algum detalhe, sendo propostos e testados alguns modelos locais não lineares particularmente adaptados à descrição das relações de equilíbrio líquido-líquido.

A resolução numérica do sistema de equações que constitui o modelo matemático dum extractor e naturalmente de importância primordial. A dificuldade em encontrar métodos de convergência segura tem estado na origem de vários trabalhos de aperfeiçoamento dos métodos existentes e de desenvolvimento de novas estratégias. De entre estas refere-se o método chamado de continuação ao qual têm sido atribuídas importantes qualidades, entre as quais a de possuir um domínio de convergência particularmente vasto. Por esta razão foi desenvolvido um novo algoritmo de simulação de extractores, que utiliza a técnica de continuação.

Este algoritmo, juntamente com alguns outros já anteriormente descritos na literatura, foram incluídos num programa geral de simulação de extractores também desenvolvido.

Este programa que possui uma estrutura fortemente modular, foi projectado para permitir seleccionar a estratégia mais adequada à caracterização de cada problema, através de uma escolha criteriosa do

método de descrição do equilíbrio (de entre os cinco disponíveis), do algoritmo de simulação (de entre cinco alternativas possíveis) e até do método de inicialização das variáveis. Dois aspectos importa ainda referir a propósito deste programa, designado por LILISP - "Liquid-Liquid Simulation Package": (i) a existência de meios que permitem que sejam fixados valores por defeito para um conjunto importante de variáveis de controle da simulação libertando dessa tarefa o utilizador e (ii) a possibilidade de adicionar facilmente novos módulos contendo procedimentos específicos ou métodos de cálculo diferentes.

As facilidades proporcionadas pelo programa LILISP foram utilizadas na avaliação dos métodos relativos dos cinco algoritmos de simulação nele incluídos, tendo ficado mais uma vez demonstrada a enorme robustez dos métodos pseudo dinâmicos. A utilização de um destes métodos na fase inicial da resolução combinada com a utilização posterior de um algoritmo do tipo Newton-Raphson, com a sua convergência quadrática, mostrou ser a estratégia mais eficaz disponível neste momento.

Finalmente, o programa LILISP foi utilizado para simular com sucesso o funcionamento de uma unidade industrial de extracção existente na Fábrica de Aromáticos da Petrogal e utilizada para separar hidrocarbonetos aromáticos de hidrocarbonetos não aromáticos.