

**UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA  
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**ESTUDO DA DINÂMICA DE ADSORÇÃO DO ETANOL E A CO-  
ADSORÇÃO DO METANOL-ETANOL COM ZEÓLITAS 4A EM UMA  
COLUNA DE LEITO FIXO**

**ELBA GOMES DOS SANTOS**

Campina Grande - Paraíba

agosto de 2000

---

**ESTUDO DA DINÂMICA DE ADSORÇÃO DO ETANOL E A CO-  
ADSORÇÃO DO METANOL-ETANOL COM ZEÓLITAS 4A EM UMA  
COLUNA DE LEITO FIXO**

**ELBA GOMES DOS SANTOS**

Dissertação apresentada ao Curso de  
Mestrado em Engenharia Química da  
Universidade Federal da Paraíba, em  
cumprimento às exigências para obtenção  
do Grau de Mestre.

Área de Concentração: Operações e Processos

Orientadores: Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Odelsia L. Sánchez de Alsina  
Prof. Dr. Flávio Luiz Honorato da Silva

Campina Grande - Paraíba

agosto de 2000



S237e Santos, Elba Gomes dos  
Estudo da dinâmica de adsorcao do etanol e a co-adsorcao do metanol-etanol com zeolitas 4A em uma coluna de leito fixo / Elba Gomes dos Santos. - Campina Grande, 2000. 116 f.

Dissertacao (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Federal da Paraíba, Centro de Ciencias e Tecnologia.

1. Adsorcao 2. Leito Fixo 3. Etanol 4. Co-Adsorcao 5. Zeolitas 6. Metanol 7. Dissertacao - Engenharia Química I. Alsina, Odelsia Leonor Sanchez de II. Silva, Flavio Luiz Honorato da III. Universidade Federal da Paraíba - Campina Grande (PB)

CDU 541.183.2(043)

ESTUDO DA DINÂMICA DE ADSORÇÃO DO ETANOL E A CO-  
ADSORÇÃO DO METANOL-ETANOL COM ZEÓLITAS 4A EM UMA  
COLUNA DE LEITO FIXO

ELBA GOMES DOS SANTOS

DISSERTAÇÃO APROVADA EM: 18, agosto, 2000



---

Prof.<sup>a</sup>. Dr.<sup>a</sup>. Sc. Odélsia L. Sánchez de Alsina  
Orientadora

---

Prof. Dr. Flávio Luiz Honorato da Silva  
Orientador



---

Prof. Dr. Célio L. Cavalcante Jr  
Examinador



---

Prof.<sup>a</sup>. Dr.<sup>a</sup>. Maria Wilma N. C. CARVALHO  
Examinador

## DEDICATÓRIA

*Em memória de Maria das Graças Gomes, minha mãe.  
A todas as pessoas que de alguma forma contribuíram  
para a conclusão deste trabalho.*

## AGRADECIMENTOS

- Ao meu pai, Antônio Gomes e ao meu irmão, Alexandre pela paciência e ajuda, durante todo o decorrer deste trabalho.
- À Prof<sup>a</sup>. Odelsia e ao Prof. Flávio, pela dedicação, orientação e compreensão sempre prestada, durante todo o trabalho.
- A Joelma, Wilma, Zora e demais colegas de mestrado, pela força e cumplicidade durante o decorrer do curso.
- A Ilka, pela dedicação prestada durante a realização dos experimentos.
- A Everaldo e a Bruno pelo conserto dos equipamentos experimentais utilizados.
- A José Lopes e a José Nogueira pela grande ajuda prestada, durante a parte experimental no laboratório e aos demais funcionários, que contribuíram para a realização deste trabalho.
- A Maria José e Maricé, pela amizade e carinho sempre demonstrado.
- À Art Cola pelo fornecimento do tolueno, utilizado nas corridas experimentais .
- À Capes pelo apoio financeiro.

## RESUMO

A adsorção tornou-se um processo de separação bastante atraente nos últimos tempos, principalmente após a descoberta dos novos adsorventes zeolíticos. Mas para que se possa projetar e otimizar equipamentos de adsorção, é imprescindível o conhecimento da dinâmica de adsorção dos componentes em sistema experimental. O estudo da dinâmica de adsorção do etanol e da co-adsorção do metanol-etanol em uma coluna de leito fixo de pellets zeolíticos do tipo 4A foi realizado através de curvas de ruptura, obtidas mediante análise de concentrações de etanol e metanol-etanol nas soluções efluentes do topo de uma coluna de leito fixo. A coluna de leito fixo possui 2,94 cm de diâmetro interno e sensores de temperatura na entrada e na saída do leito fixo, responsáveis pelo acompanhamento térmico durante todo o processo de adsorção e co-adsorção. Através do planejamento experimental do tipo fatorial  $2^3$  mais configuração estrela, com a realização de três experimentos no ponto central foi possível um estudo mais abrangente dos fatores operacionais, como concentração de entrada da solução, vazão de operação e altura do leito fixo dos pellets zeolíticos sobre o comportamento dinâmico das corridas experimentais. As condições experimentais foram: (a) concentração de entrada entre 2,5% a 12% em peso de etanol em tolueno e 2,5% a 5,7% em peso de metanol em etanol, (b) vazões de operação entre  $2,5\text{cm}^3/\text{s}$  a  $12,0\text{cm}^3/\text{s}$  e (c) altura do leito fixo entre 6,6cm a 23,4cm. Para a análise das curvas de ruptura da adsorção do etanol foi utilizado o modelo de Thomas, aplicável a sistemas isotérmicos com isoterma de Langmuir. As curvas de ruptura experimentais se ajustaram bem às curvas do modelo de Thomas, apesar das simplificações feitas. Os valores da capacidade de adsorção obtidos a partir das curvas de ruptura são próximos aos obtidos em trabalhos anteriores, pelo método estático, com exceção dos realizados para alturas de leito fixo pequenas. As curvas de ruptura obtidas para o sistema metanol-etanol apresentam formato característico da co-adsorção sem inerte, mas com forte afastamento isotérmico, com valores da capacidade de adsorção para o metanol maiores do que os obtidos para o etanol. Mediante análise estatística dos resultados experimentais, constatou-se que o parâmetro de entrada que mais influencia a adsorção do etanol é a altura do leito fixo, enquanto que para a co-adsorção do metanol, a variável que mais influencia é a concentração de metanol, na entrada do leito fixo, dentro da faixa de valores empregados.

## ABSTRACT

The use of adsorption as separation process has become more attractive the last years, mainly after the discovery of new adsorbents such as zeolites and other molecular sieves. In order to project and optimize adsorption equipment, the knowledge of the dynamics of adsorption of the components in experimental systems is very important. In this work, a study of the dynamics of adsorption of ethanol and the co-adsorption of methanol-ethanol solutions in a fixed bed column of 4A zeolite pellets has been made. Breakthrough curves were obtained by means of analysis of ethanol and methanol-ethanol concentrations in the effluents at the top of the bed. The column of 2.94cm internal diameter had temperature sensors at the inlet and outlet of the fixed bed, to observe the thermal evolution during the process of adsorption and co-adsorption. In the order to get a more detailed study of the input variables, a  $2^3$  factorial experimental planning, plus star configuration with three experiments in the central point was employed. Influence of input concentration of the solution, operational flow rate and height of the fixed bed on the dynamic behavior of the experimental runs was investigated. The experimental conditions were: (a) input concentrations ranging from 2.5 to 12.0% (w/w) ethanol in toluene and 2.5 to 5.7% methanol in ethanol; (b) flow rates ranging from  $2.5\text{cm}^3/\text{s}$  to  $12.0\text{cm}^3/\text{s}$  and (c) height of the fixed bed ranging from 6.6 to 23.4cm. The breakthrough curves of ethanol adsorption were analyzed by Thomas model, valid for isothermal systems and Langmuir equilibrium. The experimental data showed a good fitting with the model, in spite of the inherent simplifications of the model. The values of adsorption capacity of the 4A zeolites at the equilibrium calculated from the breakthrough curves showed a good agreement with those found in previous works, obtained by the static method, except for those obtained with smaller fixed bed heights. The breakthrough curves obtained for the methanol-ethanol system presented characteristic format of the co-adsorption without inert and strong isothermal deviation as expected. The methanol adsorption capacity was higher than that obtained for ethanol. Statistic analysis of the results showed that, under the employed experimental conditions, fixed bed height is the main parameter affecting ethanol adsorption while co-adsorption is mainly influenced by the input methanol concentration.



## SIMBOLOGIA

<b>A</b>	Área da seção Transversal
<b>b</b>	Constante de Langmuir
$b_A, b_B$	Constante de Langmuir para multicomponente
<b>C<sub>0</sub></b>	Concentração inicial do soluto na solução, g/100g
$C_{0A}, C_{0B}$	Concentração inicial dos componentes A e B
<b>C</b>	Concentração do soluto no fluido, g/100g
$C_A, C_B$	Concentração dos adsorbatos A e B
<b>D<sub>AB</sub></b>	Coefficiente de Difusão
<b>D<sub>c</sub></b>	Diâmetro do cristalito
<b>D<sub>p</sub></b>	Diâmetro da partícula equivalente a uma esfera
<b>D<sub>L</sub></b>	Coefficiente de dispersão axial
<b>H</b>	Altura do leito fixo
<b>k'</b>	Constante de equilíbrio de adsorção pela lei de Henry definida em termos de P ou C
<b>k*</b>	Coefficiente efetivo de transferência de massa experimental
<b>k<sub>r</sub></b>	Coefficiente efetivo de transferência de massa
<b>K</b>	Coefficiente Global de transferência de massa
<b>L</b>	Comprimento do leito fixo
$q_A, q_B$	Massa dos componentes A e B na fase sólida por unidade de massa de sólido, g/100g
<b>q<sub>s</sub></b>	Massa do soluto na fase sólida por unidade de massa de sólido na saturação, g/100g
<b>q</b>	Massa do soluto na fase sólida por unidade de massa de sólido, g/100g
<b>q*</b>	Concentração do soluto na fase sólida por unidade de massa de sólido, no equilíbrio, g/100g
<b>q<sub>0</sub></b>	Concentração do soluto na fase sólida por unidade de massa de sólido, $t < 0$ , g/100g
<b>q<sub>0</sub></b>	Concentração do soluto na fase sólida por unidade de massa de sólido, $t = 0$ , g/100g

$\bar{q}$	Concentração mássica média do soluto na fase sólida, g/100g
$Q$	Vazão de operação
$r_c$	Raio do cristalito
$R_p$	Raio da partícula equivalente a uma esfera
$Re$	Número de Reynolds
$Sc$	Número de Schmidt
$Sh$	Número de Sherwood
$t_{1/2}$	Tempo em que o valor de $C/C_0$ é igual a metade do valor da saturação.
$t$	Tempo (segundos)
$T_1, T_2$	Temperaturas do sensor superior e inferior respectivamente
$v$	Velocidade intersticial
$X_A, X_B$	Fração molar dos componentes A e B na fase adsorvida
$Y_A, Y_B$	Fração molar dos componentes A e B na fase líquida em equilíbrio

#### Letras Gregas

$\alpha_{AB}$	Fator de separação
$\beta$	Fator de separação para sistemas com isothermas de Langmuir
$\varepsilon$	Porosidade do leito adsorvente
$\rho_{\text{sólido}}$	Densidade da partícula adsorvente, g/cm <sup>3</sup>
$\mu$	Viscosidade da solução, g/cm.s
$\theta$	Variável de tempo adimensional
$\tau, \xi$	Variáveis adimensionais

## SUMÁRIO

CAPÍTULO I – INTRODUÇÃO.....	01
1.1. Objetivos.....	03
1.1.1. Objetivo geral.....	03
1.1.2. Objetivos específicos.....	03
CAPÍTULO II – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....	04
2.1. Adsorção.....	04
2.2. Aplicações da adsorção.....	05
2.3. Adsorventes.....	06
2.3.1. Peneira Molecular do Tipo A.....	08
2.4. Desativação.....	09
2.5. Tipos de Adsorção.....	09
2.6. Propriedades de Equilíbrio.....	10
2.6.1 Teorias de Equilíbrio .....	10
2.6.2. Isoterma de Langmuir.....	11
2.7 Isotermas para Misturas de dois ou mais componentes .....	12
2.8. Resistências à Transferência de Massa.....	13
2.9. Adsorção em Leito Fixo.....	14
2.9.1 Obtenção das Curvas de Ruptura.....	16
2.9.1.1. Sistema com um único Componente.....	16
2.9.1.2. Sistemas com dois ou mais Componentes .....	17
2.9.2. Modelo Matemático para Leito Fixo.....	18
2.9.3. Classificação dos Sistemas de Transição Simples.....	19
2.9.4. Modelos para Sistemas de Transição Simples.....	21

2.9.5. Sistemas de Transição Múltipla .....	23
2.9.6. Classificação dos Sistemas de Adsorção .....	24
<b>CAPÍTULO III – PLANEJAMENTO EXPERIMENTAL E OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS.....</b>	<b>26</b>
3.1. Planejamento Experimental.....	26
3.1.1 Simplex Seqüencial .....	27
3.1.2 Planejamento Fatorial e Análise de Superfície de Resposta	27
<b>CAPÍTULO IV – MATERIAIS E MÉTODOS.....</b>	<b>29</b>
4.1. Produtos Químicos.....	29
4.2. Equipamentos Utilizados.....	31
4.2.1. Coluna de leito fixo.....	31
4.2.2. Refratômetro.....	32
4.2.3. Mulfla.....	32
4.2.4. Seringa.....	32
4.3. Metodologia.....	33
4.3.1. Obtenção das Curvas de Calibração.....	33
4.3.2. Tratamento das Peneiras Moleculares.....	34
4.3.3. Delineamento da Matriz Planejamento Experimental.....	34
4.3.4. Obtenção das Curvas de Ruptura .....	37
4.3.5. Modelo Matemático Utilizado .....	39
<b>CAPÍTULO V – RESULTADOS E DISCUSSÃO.....</b>	<b>40</b>
5.1. Reprodutibilidade dos Experimentais.....	40

5.2. Influência da Concentração Inicial sobre as curvas de ruptura. Efeitos Térmicos.....	43
5.2.1. Sistema Etanol – Tolueno.....	43
5.2.2. Sistema Metanol – Etanol.....	47
5.3. Influência da Vazão de Operação sobre as curvas de ruptura. Efeitos Térmicos.....	50
5.3.1. Sistema Etanol – Tolueno.....	50
5.3.2. Sistema Metanol – Etanol.....	51
5.4. Influência da Altura do Leito Fixo sobre as curvas de ruptura. Efeitos Térmicos.....	52
5.4.1. Sistema Etanol - Tolueno.....	52
5.4.2. Sistema Metanol - Etanol.....	54
5.5. Modelagem dos Dados Experimentais.....	55
5.5.1. Sistema Etanol - Tolueno.....	55
5.5.2. Sistema Metanol - Etanol.....	63
5.6. Análise das Superfícies de Resposta.....	65
5.6.1. Sistema Etanol - Tolueno.....	65
5.6.1. Sistema Metanol - Etanol.....	71
 CAPÍTULO VI – CONCLUSÃO.....	 76
 CAPÍTULO VII – PERSPECTIVAS.....	 79
 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	 80

ANEXO A – CLASSIFICAÇÃO GRANULOMÉTRICA DAS ZEÓLITAS.....	85
ANEXO B – CURVAS DE CALIBRAÇÃO.....	88
ANEXO C – ISOTERMAS DE ADSORÇÃO.....	91
ANEXO D – CORRIDAS EXPERIMENTAIS: SISTEMA ETANOL- TOLUENO.....	94
ANEXO E – CORRIDAS EXPERIMENTAIS: SISTEMA METANOL- ETANOL.....	104
ANEXO F – PARÂMETROS UTILIZADOS NA MODELAGEM DOS DADOS EXPERIMENTAIS.....	114

Segundo Ruthven (1984), entre os processos de separação de misturas de dois ou mais componentes, a destilação tem assumido um papel dominante. Mas apesar da sua simplicidade e aplicabilidade quase universal, não é um processo eficiente energeticamente, além de apresentar dificuldade em separar misturas com baixas concentrações de componentes, principalmente quando estes possuem pequenas diferenças de volatilidade, como é o caso do sistema binário etanol-metanol.

A busca por padrões de qualidade tem se tornado uma exigência cada vez maior em nossos dias, levando-nos a obter produtos com um melhor teor de pureza e um menor custo operacional. Desde 1990, o Laboratório de Transmissão de Calor e Massa em Meios Porosos e Sistemas Particulados do Departamento de Engenharia Química da UFPB vem desenvolvendo estudos de adsorção em fase líquida e já conta com vários trabalhos concluídos como:

- ➔ Coeficiente de Difusão na Adsorção do Metanol em Zeólitas (Bezerra, 1992).
- ➔ Estudos de Equilíbrio e Cinética da Adsorção de Aromáticos em Zeólitas 4A na Utilização do Método Gravimétrico (Lima, 1996).
- ➔ Adsorção de Metanol em Zeólitas 4A em Células Diferenciais (Mendes, 1996).
- ➔ Estudos de Equilíbrio e da Cinética de Adsorção de Metanol-Tolueno em Zeólitas 4A (Silva, 1993).
- ➔ Adsorção de Metanol em Aluminas Ativadas (Nascimento, 1997).
- ➔ Dinâmica de Adsorção de Metanol em Leito Fixo de Zeólitas (Pereira, 1998).
- ➔ Cinética de Co-Adsorção do Metanol e Etanol em Zeólita 4 A. (Alsina et al., 2000).

O estudo da adsorção do etanol em uma coluna de leito fixo de zeólita 4A será de grande importância e utilidade para a continuação de vários trabalhos, como também para a obtenção de produtos mais puros, com um menor consumo de energia.

## **1.1. Objetivos**

### **1.1.1. Objetivo Geral**

Estudar, em uma coluna de leito fixo de zeólitas do tipo 4A, a dinâmica de adsorção do etanol-tolueno e a co-adsorção do metanol-etanol, a partir de variáveis operacionais.

### **1.1.2. Objetivos Específicos**

- ➔ Verificar o efeito das variáveis: concentração de entrada, vazão de operação e altura do leito fixo sobre a adsorção do etanol.
- ➔ Verificar o efeito das variáveis: concentração de entrada, vazão de operação e altura do leito fixo sobre a co-adsorção do metanol.
- ➔ Modelagem fenomenológica e empírica dos dados obtidos da adsorção do etanol.
- ➔ Modelagem empírica dos dados obtidos da co-adsorção do metanol-etanol.
- ➔ Encontrar faixas ótimas de operação do sistema de co-adsorção, de forma a se obter valores minimizados de metanol no efluente, que estejam dentro da faixa permitida pela Legislação Brasileira, acerca de bebidas alcóolicas.



## CAPÍTULO II

### REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

#### 2.1. Adsorção

A adsorção pode ser definida como um fenômeno em que moléculas de uma dada espécie química irão se concentrar na superfície de um sólido devido a interações microscópicas com os constituintes do sólido.

O fenômeno de adsorção ocorre em um curto período de tempo, mas se o constituinte adsorvido começa a ser incorporado à estrutura do sólido, ocorre uma reação lenta, conhecida como absorção.

A espécie química que será adsorvida recebe o nome de soluto ou adsorbato e a superfície sólida será chamada de substrato ou adsorvente.

A adsorção tem sido aplicada desde a antigüidade em que se utilizavam sólidos para remover impurezas de soluções gasosas e líquidas, tornando-se uma ferramenta útil desde cedo para a purificação e a separação de substâncias de uso doméstico, como a descoloração do açúcar e outros alimentos por ossos queimados.

A grande vantagem da adsorção em relação aos demais processos de separação reside no fato desta possuir uma alta seletividade a nível molecular, permitindo a separação de componentes com pontos de ebulição próximos e, acima de tudo, não desperdiçando energia com refrigeradores e condensadores, como no caso da destilação.

A viabilidade dos processos de adsorção depende, em geral, do fator de separação. Este pode ser representado pela seguinte relação.

$$\alpha_{AB} = \frac{X_A X_B}{Y_A Y_B} \quad (2.1)$$

onde  $X_A$  e  $Y_A$  são respectivamente a fração molar do componente A na fase adsorvida e na fase líquida em equilíbrio, e  $X_B$  e  $Y_B$  são a fração molar do componente B na fase adsorvida e na fase líquida em equilíbrio, respectivamente (Cracknell, & Nicholson, 1994).

## 2.2. Aplicações da adsorção

Inúmeros são os processos de separação e purificação que utilizam a adsorção. Estes são relativamente recentes e seu grande desenvolvimento se deu no início da década de 70 com o aparecimento de novos adsorventes, principalmente os de natureza sintética, como as zeólitas.

Os processos de adsorção são amplamente utilizados em todos os ramos da indústria, desde as farmacêuticas até as petroquímicas (Marra, 1991).

Alguns exemplos citados pela literatura mostram o grande número de aplicações da adsorção. Entre estes processos, pode-se citar:

- Adsorção de poluentes de soluções aquosas para o tratamento de efluentes (McKay et al., 1987).
- Purificação do metano, etileno e outros hidrocarbonetos leves, separação de olefinas dos gases craqueados, recuperação do acetileno e outros petroquímicos de misturas diluídas com outros hidrocarbonetos (Costa et al., 1981).
- Remoção de componentes perigosos e venenosos de gases e líquidos (Keller, 1995).

### 2.3. Adsorventes

Os adsorventes são substâncias naturais ou sintéticas que possuem estruturas microcristalinas cuja superfície interna dos poros é acessível a uma combinação seletiva entre o sólido e o soluto (Perry & Chilton, 1980).

Segundo Ruthven (1988), um dos primeiros requisitos para o desenvolvimento de um processo de separação por adsorção é a escolha, ou até mesmo o desenvolvimento de adsorventes adequados para se obter a separação desejada. Este deve possuir as seguintes características:

- ➔ Alta seletividade – O adsorvente deve ser capaz de adsorver preferencialmente um ou mais componentes semelhantes.
- ➔ Boa capacidade de adsorção – Este deve ser capaz de adsorver grande quantidade de soluto. Para isso necessita possuir uma área específica elevada, caso contrário, o equipamento necessário para o processo de separação se torna grande e dispendioso. Esta propriedade é apresentada pelos sólidos microporosos.
- ➔ Estabilidade – Esta propriedade é necessária para que o adsorvente tenha capacidade de resistir aos impactos mecânicos sofridos durante o manuseio, e a elevações de temperatura durante o processo de dessorção.

Os principais adsorventes, utilizados comercialmente, são o carvão ativado, a sílica gel e a alumina ativada e mais recentemente as zeólitas.

O termo zeólita foi inicialmente utilizado para designar uma família de minerais que apresentavam como propriedades a troca de íons e a dessorção reversível da água. Esta última propriedade deu origem ao nome genérico de zeólita, o qual deriva das palavras gregas "zeo", que ferve, e "lithos", pedra (Gianneto, 1990).

As zeólitas são um grupo de aluminossilicatos porosos cristalinos, cuja estrutura consiste, em uma montagem de tetraedros de  $\text{SiO}_4$  e  $\text{AlO}_4$ , unidos em várias combinações regulares através de átomos de oxigênio, como mostrado na figura 2.1, formando uma janela, contendo poros de dimensões moleculares nos quais as moléculas podem penetrar. Estas podem ser classificadas em alguns grupos de acordo com o tamanho dos poros: zeólitas de poros grandes, com 12

átomos de oxigênio, como as zeólitas X e Y; zeólitas de poros intermediários, como 10 átomos de oxigênio, como a ZSM-5; zeólitas de poros pequenos, com 8 átomos de oxigênio, como a zeólita A, erionita e chabazita; e zeólitas que apresentam 6 átomos de oxigênio, como a sodalita (Xiao & Wei, 1991).

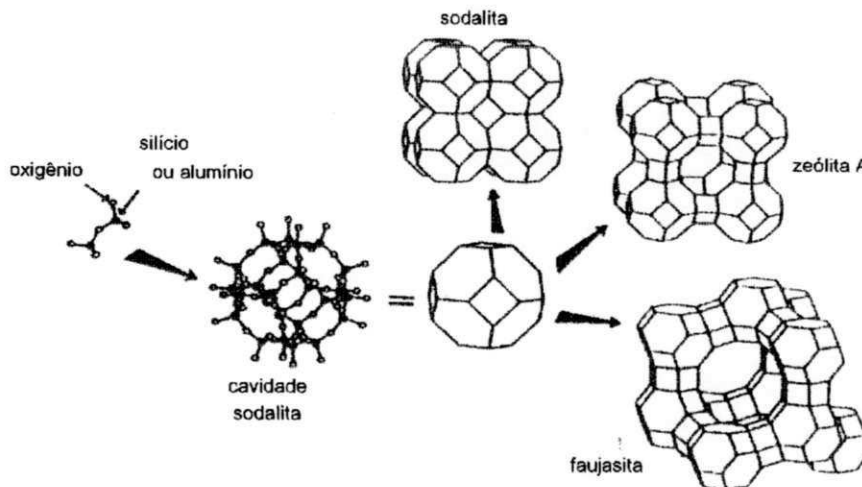


Figura 2.1. Estrutura de algumas zeólitas. (Davis, 1991).

As zeólitas têm revolucionado as indústrias químicas e petroquímicas, sendo utilizadas como adsorventes, suporte de catalisadores e trocadores iônicos,

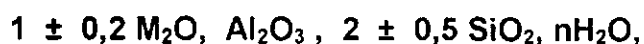
Desde que a primeira zeólita foi sintetizada em 1950, tem ocorrido, ao longo dos anos, uma busca contínua para o desenvolvimento de novas estruturas e composições; com isso, obtém-se as seguintes propriedades para o controle e caracterização das zeólitas (Gianneto, 1990).

- Estabilidade – São termicamente estáveis acima de 500°C.
- Reutilização – Podem ser regeneradas, aquecendo-as para remover materiais adsorvidos, ou com uma mudança de pressão para remover gases adsorvidos.
- Flexibilidade – Podem ser modificadas por vários métodos, obtendo-se então novas características.
- Viabilidade – Estão disponíveis, como pó ou como produtos estruturados.
- Segurança – São seguras e fáceis de se utilizar.

### 2.3.1. Peneira Molecular do tipo A

Com o avanço das técnicas de síntese de novos materiais, especialmente aqueles com propriedades catalíticas, são obtidos sólidos com estrutura cristalina cada vez mais ordenada e uniforme. Estes sólidos permitem separações mais seletivas, proporcionando a retenção ou exclusão de determinadas substâncias a nível molecular. Devido a esta particularidade, são denominados "peneiras moleculares", pois retêm no interior de sua rede cristalina moléculas de dimensões inferiores às de seus poros e cavidades (Azevêdo, 1993).

As peneiras moleculares do tipo A são sintetizadas como cela unitária, como mostrado abaixo, segundo Becila (1980).



onde M é um metal alcalino ou alcalino terroso presente na estrutura que define o tipo de zeólita e o seu diâmetro de poros. Sendo este metal o potássio, o diâmetro da passagem do cristal será de aproximadamente 3,3A° e a zeólita será do tipo 3A. Se o metal for o sódio, o diâmetro passa a ser de 3,9A° e a zeólita será do tipo 4A. Quando o metal é o cálcio, o diâmetro será de 4,3A° e esta será do tipo 5A. As fórmulas estruturais destes adsorventes zeolíticos, em sua forma desidratada, podem ser representadas por (Bezerra, 1992).

Zeólita		
3 A	4 A	5 A
$K_{12}(AlO_2SiO_2)_{12}$	$Na_{12}(AlO_2SiO_2)_{12}$	$Ca_6(AlO_2SiO_2)_{12}$

A forma sódica da zeólita A adsorve materiais, tais como água, dióxido de carbono, dióxido de enxofre e todos os hidrocarbonetos que contém um ou dois átomos de carbono. O propano e outros hidrocarbonetos mais elevados são fisicamente excluídos, com exceção do propileno, o qual é adsorvido lentamente. Quando os íons de sódio são trocados por íons de cálcio, o tamanho dos poros aumenta em aproximadamente 30%, e esta zeólita irá adsorver compostos como parafinas, olefinas, álcoois e ciclopropano, mais as isoparafinas como o isobutano ou aromáticos. Se os íons do sódio são trocados por íons de potássio, o efeito

oposto ocorre; o tamanho dos poros é diminuído e a zeólita não irá adsorver nenhum hidrocarboneto ou oxigênio a baixas temperaturas (Barry, 1960).

Para um sistema do tipo etanol-metanol em benzeno, a seletividade da zeólita 4A é acrescida à medida que os íons de sódio são trocados por íons de potássio. Isto faz com que os tamanhos dos poros diminuam à medida que a quantidade de potássio na estrutura da zeólita aumente, de forma que esta se torna mais seletiva para o metanol do que para o etanol (Becila, 1981).

#### **2.4. Desativação**

A desativação de um adsorvente envolve a perda da capacidade de adsorção no equilíbrio ou um aumento na resistência à transferência de massa. Ocorre durante a operação, como resultado da formação de coque e perda da cristalinidade, devido à peneira molecular ser utilizada em vários ciclos térmicos, como dessecante, ou quando a água está presente como uma impureza na alimentação e é adsorvida primeiramente em lugar da substância desejável.

Tais efeitos tendem a ser mais sérios com a zeólita do tipo X, devido à sua baixa estabilidade hidrotérmica. Todavia, com a zeólita do tipo A, pode ocorrer fechamento parcial dos poros, produzindo uma redução da difusividade intracristalina e um aumento indesejado na zona de transferência de massa (Ruthven, 1984).

#### **2.5. Tipos de Adsorção**

Podem-se distinguir dois tipos de adsorção sobre superfícies sólidas, dependendo da interação entre o sólido e as moléculas adsorvidas: a adsorção física ou fisisorção, e a adsorção química ou quimissorção.

A adsorção física, ou de Van der Waals, ocorre quando entre o adsorbato e a superfície sólida atuarem apenas forças de Van der Waals. É um processo rápido e facilmente reversível devido à fraca interação intermolecular entre o adsorvente e as moléculas adsorvidas.

A adsorção química ocorre quando a união entre o adsorvente e o adsorbato é muito intensa. Neste tipo de adsorção ocorre a formação de ligação química que tanto pode ser eletrostática ou a que envolve a partilha de elétrons (Coulson & Richardson, 1985).

## **2.6. Propriedades de Equilíbrio**

A determinação do equilíbrio estabelecido entre um fluido e um adsorvente, ou seja, a quantidade de soluto que pode ser retirada pelo sólido, é uma das etapas fundamentais necessárias para o projeto de equipamentos de adsorção.

O comportamento de equilíbrio dos adsorventes a uma temperatura constante é dado por uma isoterma de adsorção. Uma isoterma representa a relação entre a quantidade adsorvida por unidade de massa de sólidos e sua concentração na fase fluida em equilíbrio (Silva, 1993).

Um método para obter isotermas de adsorção consiste em alcançar o equilíbrio de soluções com concentrações diferentes de um adsorbato com quantidades conhecidas de um adsorvente. As medidas são realizadas a uma temperatura constante e as concentrações resultantes do adsorbato em soluções são representadas graficamente contra as concentrações do adsorbato na fase adsorvente.

O comportamento das isotermas de adsorção depende do adsorvente, do adsorbato ou das espécies adsorvidas, e das propriedades físicas da solução, como temperatura, pH, forças iônicas das demais espécies presentes na solução, etc (Garth, 1995).

### **2.6.1. Teorias de Equilíbrio**

Em 1940 foi proposta uma classificação das isotermas conhecidas, a qual consistia em cinco formas distintas como apresentado na figura 2.2.

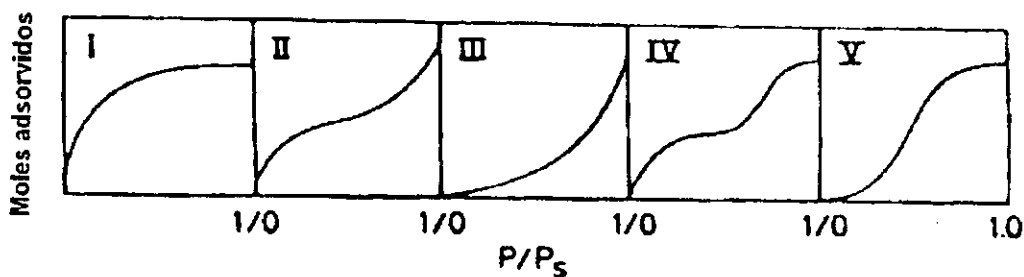


Figura 2.2. Classificação das Isotermas de Brunauer (Ruthven, 1984)

As isotermas características para adsorventes microporosos são normalmente do tipo I devido ao limite de saturação corresponder ao total preenchimento dos poros do adsorvente. As isotermas do tipo II e III são geralmente observadas em adsorventes com tamanho grande dos poros. Para a adsorção em multicamadas, tem-se a isoterma do tipo IV. A isoterma do tipo V é observada quando ocorrem efeitos de atração intermolecular sorbato-sorbato (Ruthven, 1984).

### 2.6.2. Isoterma de Langmuir

A isoterma de Langmuir foi desenvolvida em 1918 para a adsorção de gases em superfícies sólidas. Para isso, foram consideradas as seguintes hipóteses:

- ➔ As moléculas são adsorvidas em um número fixo de sítios definidos;
- ➔ Cada sítio adsorve apenas uma molécula de adsorbato;
- ➔ Todos os sítios são energeticamente equivalentes;
- ➔ Não há interação entre as moléculas adsorvidas com os sítios adjacentes.

A equação da isoterma é dada por:

$$\frac{q}{q_s} = \frac{bc}{1+bc} \quad (2.2)$$



---

Esta expressão mostra o comportamento assintótico para adsorção em monocamada

Para baixas concentrações de sorbato, a lei de Henry é observada:

$$\lim_{c \rightarrow 0} \left( \frac{q}{c} \right) = bq_s = K' \quad (2.3)$$

## 2.7. Isotermas para Misturas de dois ou mais Componentes

A adsorção preferencial de um ou mais componentes a partir de uma mistura multicomponente é a base dos processos de separação adsortivos de grande porte, de forma que estes devem ser inteiramente compreendidos para que as previsões do projeto e aumento de escala sejam realizados de forma correta (Buarque et al., 2000).

Os processos de separação por adsorção que utilizam materiais microporosos, tais como zeólitas e carbono ativado, são amplamente utilizados na indústria química. Para o projeto destes processos, é essencial conhecer o equilíbrio de adsorção das misturas. Porém, dados experimentais para isotermas da adsorção multicomponentes são escassos e difíceis de se obter, e são muito limitados, mesmo para sistemas binários. A necessidade de informações deve, desta forma, ser deduzida principalmente de isotermas de componentes individuais (Chiang et al., 1996).

Quando um fluido contém dois sorvatos A e B, cada um dos quais obedece à equação de Langmuir para a adsorção em monocamadas, pode-se assim obter uma equação estimada da isoterma binária.

Para os constituintes A e B, tem-se então:

$$\theta_A = \frac{q_A}{q_s} = \frac{b_A c_A}{1 + b_A c_A + b_B c_B} \quad \theta_B = \frac{q_B}{q_s} = \frac{b_B c_B}{1 + b_A c_A + b_B c_B} \quad (2.4)$$

## 2.8. Resistências à transferência de massa

Muitos adsorventes comerciais possuem pequenos cristais microporosos formados dentro de pellets macroporosos. Tais adsorventes oferecem dois tipos diferentes de resistência à transferência de massa: a resistência nos cristais do adsorvente ou micropartículas e a resistência no pellet macroporoso.

Quando está presente na fase fluida do sistema mais de um componente, existe uma resistência adicional à transferência de massa associada com o transporte de massa no fluido ao redor da partícula (Ruthven, 1984).

A figura 2.3 ilustra os três tipos de resistências: a resistência ao filme externo (líquido ou gasoso), a resistência no macroporo e a resistência no microporo.

Dependendo das condições a que esteja submetido um determinado sistema, a difusão pode ser controlada pela combinação de todas as resistências mencionadas anteriormente ou por apenas uma resistência dominante.

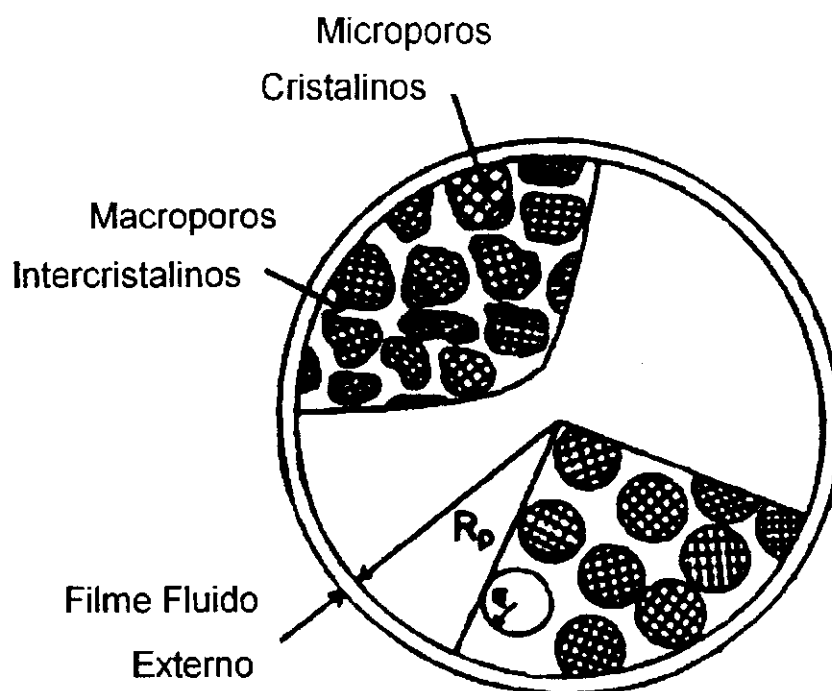


Figura 2.3. Diagrama esquemático do pellet adsorvente mostrando as três resistências principais à transferência da massa (Ruthven, 1984).

Um grupo adimensional característico da transferência de massa no filme externo é o Número de Sherwood, definido por:

$$Sh = \frac{2R_p k_f}{D_{ab}} \quad (2.5)$$

o qual é análogo ao Número de Nusselt para a transferência de calor (Ruthven, 1984).

O Número de Sherwood expresso em função do Número de Reynolds e do número de Schmidt, pode ser calculado pelas seguintes expressões:

Correlação de Petrovic e Thodos para gases:

$$Sh = \frac{0,357}{\varepsilon} Re^{0,64} Sc^{0,33} \quad \text{para } 3 < Re < 2000 \quad (2.6)$$

Correlação de Wilson e Geankopolis para líquidos:

$$Sh = \frac{1,09}{\varepsilon} Re^{0,33} Sc^{0,33} \quad \text{para } 0,0015 < Re < 55 \quad (2.7)$$

$$Sh = \frac{0,25}{\varepsilon} Re^{0,69} Sc^{0,33} \quad \text{para } 55 < Re < 1050 \quad (2.8)$$

## 2.9. Adsorção em Leito Fixo

A adsorção em leito fixo representa uma técnica amplamente utilizada nos processos de adsorção. Esta pode ser empregada em processos de separação em grande escala, como também para estimar parâmetros em escala laboratorial (Gutsche & Hartmann, 1996).

Dentre os diversos exemplos que utilizam a adsorção em leito fixo, pode-se citar:

- ➔ A adsorção de compostos orgânicos de soluções aquosas em leito fixo de carvão ativado para tratamento e purificação de água (Calleja et al., 1998).
- ➔ A recuperação de solventes valiosos contido em gases e remoção de substâncias tóxicas de efluentes (Coulson & Richardson, 1995).

A figura 2.4 mostra o funcionamento de um leito fixo em que uma solução líquida ou gasosa com concentração  $c_0$  atravessa continuamente de cima para baixo um leito poroso adsorvente inicialmente isento de adsorbato. Ao penetrar no leito, o soluto é adsorvido rapidamente e, antes de sair, todo o soluto será removido pelo adsorvente.

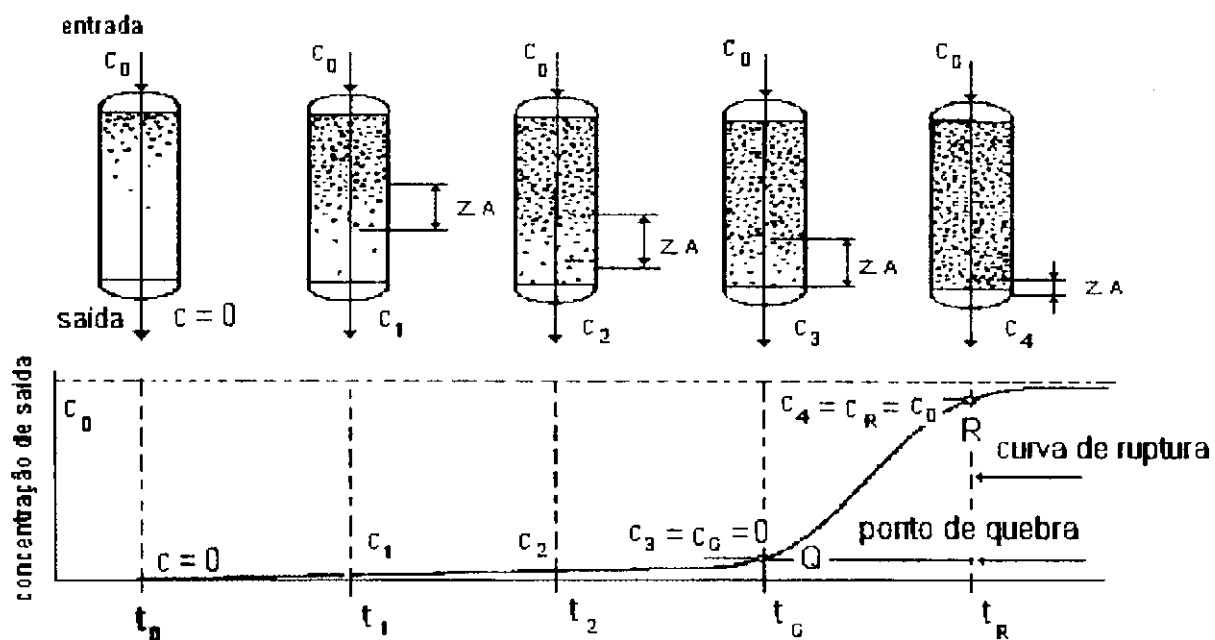


Figura 2.4. Funcionamento de um leito fixo: Curva de Ruptura. (Gomide, 1988)

O gráfico da parte inferior da figura 2.4 mostra a variação da concentração  $c$  de saída a cada instante durante a operação, com uma quantidade  $m$  de efluente recolhido até aquele instante. As primeiras porções do efluente têm concentração de soluto igual a zero. No instante  $t_1$  a parte superior do leito já encontra-se saturada e o restante continua adsorvendo soluto, mas não há mais adsorvente puro no leito. Desta forma a concentração  $c_1$  de saída não é mais

igual a zero. A maior parte da adsorção tem lugar em uma camada relativamente pouco espessa do leito, chamada *zona de adsorção* e na qual a concentração da solução decresce rapidamente desde  $c_0$  até  $c_1$ . No instante  $t_2$  a concentração  $c_2$  de saída ainda é bastante pequena e metade do leito já se encontra saturada. No instante  $t_Q$  a zona de adsorção atinge o fundo do leito e a concentração  $c_Q$  de saída já tem um valor apreciável. Este instante será caracterizado como ponto de *ruptura* e daí em diante a concentração de saída aumenta rapidamente, até que no instante  $t_R$  a solução sai com a concentração praticamente igual a de entrada. A parte da curva entre os instantes  $t_Q$  e  $t_R$  constitui a *curva de ruptura* ou "*breakthrough*". Se a solução continuar a passar pelo leito após o instante  $t_R$  haverá muito pouca adsorção adicional, uma vez que o leito se encontra praticamente em equilíbrio com a solução alimentada (Gomide, 1988).

A grande vantagem de um leito fixo é o de ser simples e barato na construção e provocar uma abrasão mínima no adsorvente. Mas possui a desvantagem de ser descontínuo e usar mais adsorvente do que o necessário, uma vez que é preciso ter um leito de prevenção para garantir a zona de adsorção. Como os adsorventes têm baixa condutividade térmica, a regeneração é lenta e todo o calor de regeneração se perde a cada ciclo. Os leitos fixos devem ser suficientemente longos, não só para conter a zona de adsorção, mas também para lhe permitir um bom tempo de permanência (Coulson & Richardson, 1985).

### **2.9.1. Obtenção de curvas ruptura**

#### **2.9.1.1 Sistema com um único componente**

Um meio simples e útil para a análise de curvas de ruptura ou curvas "*breakthrough*" como mostrada na figura 2.4, é através de um balanço material global. Este tem como objetivo a determinação da capacidade de adsorção e a seletividade do leito adsorvente.

A equação do balanço material global, Entrada – Saída = Acúmulo, pode ser aplicada aos dados experimentais, de forma que:

$$\int_0^t vA \varepsilon c_o dt - \int_0^\infty vA \varepsilon c dt = LA (1 - \varepsilon) q_0 + LA \varepsilon q_0 \quad (2.9)$$

A equação (2.9) pode ser resolvida para obter:

$$\frac{v}{L} \int_0^t \left(1 - \frac{c}{c_0}\right) dt = 1 + \left(\frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon}\right) \frac{q_0}{c_0} \quad (2.10)$$

onde a integral do primeiro termo da equação (2.10) representa a área sobre a curva de ruptura da figura 2.4 e o termo  $v/L$ , o inverso do tempo de residência. O segundo termo, representa o tempo estequiométrico ou tempo de retenção (Ruthven, 1996).

### 2.9.1.2. Sistema com dois ou mais componentes

A figura 2.5 a seguir mostra um leito fixo em que dois componentes A e B entram com uma concentração inicial,  $c_{OA}$  e  $c_{OB}$ , com uma velocidade intersticial,  $v$ . O leito fixo possui porosidade  $\varepsilon$  e comprimento  $L$ .

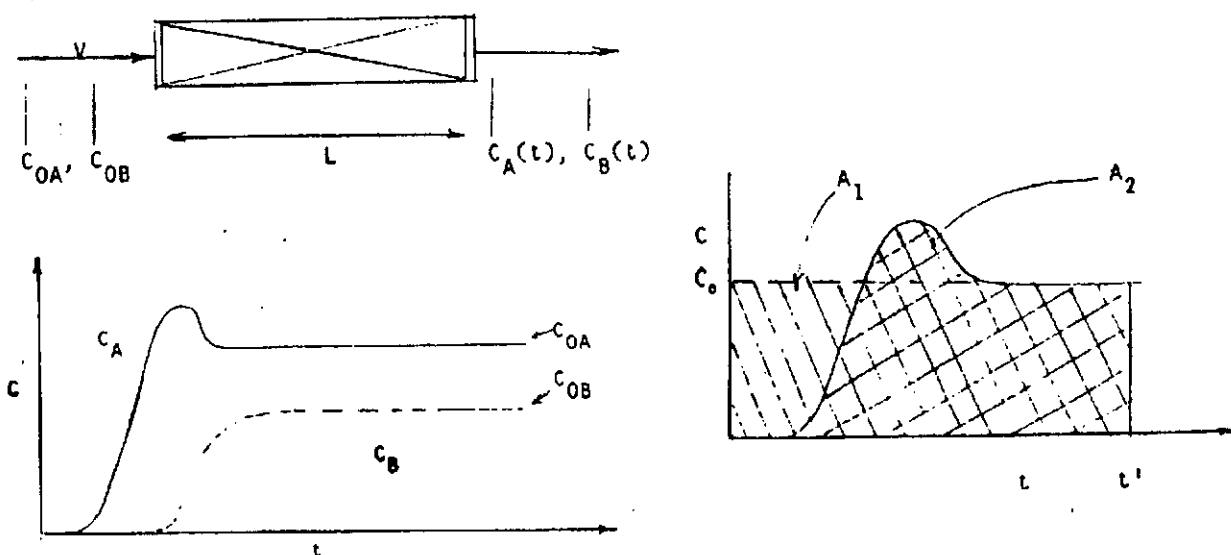


Figura 2.5. Curva Breakthrough para um sistema multicomponente, (Ruthven, 1996)

Através da equação do balanço de matéria para ambos os componentes (Saída – Entrada = Acúmulo) tem-se a seguinte relação para um sistema multicomponente:

$$v_{\varepsilon} A(tc_{0A}) - v_{\varepsilon} A \int_0^t c \cdot dt = (1 - \varepsilon) LAq_A + LA\varepsilon c_{0A} \quad (2.11)$$

onde o primeiro e segundo termos do primeiro membro da equação (2.11) representa a área  $A_1$  e a  $A_2$  do gráfico mostrado na figura 2.5.

Desta forma é possível calcular a capacidade de adsorção para ambos os componentes A e B através da seguinte equação:

$$(A_1 - A_2) \frac{\varepsilon v}{(1 - \varepsilon)L} = q_A + \frac{\varepsilon}{(1 - \varepsilon)} c_{0A} \quad (2.12)$$

### 2.9.2. Modelo Matemático para Leito Fixo

Considerando um elemento de leito como mostrado na figura 2.6 em que um fluido de concentração  $c(z, t)$  cruza o leito adsorvente com porosidade  $\varepsilon$  e velocidade  $v$ , é possível descrever um modelo matemático para representar o comportamento dinâmico do sistema.

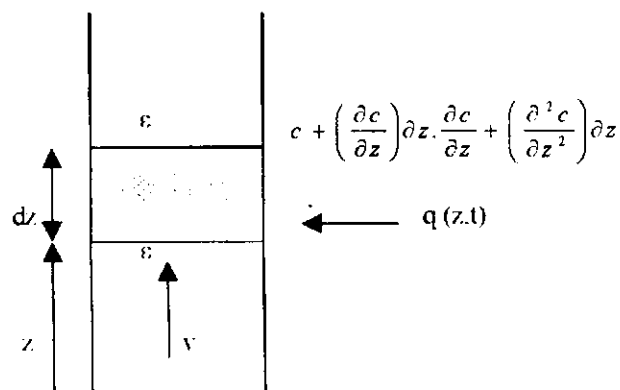


Figura 2.6. Elemento de leito fixo, (Ruthven 1984)

A equação que mostra este comportamento é dada por:

$$-D_L \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial z}(vc) + \frac{\partial c}{\partial t} + \left( \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right) \frac{\partial \bar{q}}{\partial t} = 0 \quad (2.13)$$

O balanço de massa para uma partícula adsorvente dá a taxa de adsorção na partícula:

$$\frac{\partial \bar{q}}{\partial t} = f(q, c) \quad (2.14)$$

Embora seja escrita como uma simples equação, a expressão da taxa de transferência de massa é constituída geralmente de uma série de equações, envolvendo uma ou mais equações de difusão com condições de contorno associadas, incorporando hipóteses simplificatórias para as quais a expressão da taxa de transferência de massa pode ser reduzida em tempos suficientemente longos (Ruthven, 1984).

Neste modelo os efeitos de todos os mecanismos que contribuem para a dispersão axial são agrupados em um coeficiente de dispersão axial efetivo ( $D_L$ ), o qual se encontra presente em uma grande variedade de processos de adsorção em fase líquida. Os modelos mais detalhados, os quais incluem, por exemplo, a dispersão radial, geralmente não são necessários e, em muitos casos, é possível dispensar a dispersão axial e assumir um fluxo pistonado ideal (Ruthven, 1984).

### 2.9.3. Classificação dos Sistemas de Transição Simples

O comportamento dinâmico dos sistemas de adsorção pode ser classificado de acordo com a natureza da transferência de massa, determinada pela forma das relações de equilíbrio, e pela complexidade do modelo matemático requerido para descrever o sistema, o qual depende da concentração dos componentes possíveis de serem adsorvidos, presentes no sistema.



Com relação às isotermas de equilíbrio pode-se distinguir três casos gerais, dependendo da faixa de concentração correspondente à transição desejada: equilíbrio favorável, equilíbrio linear e equilíbrio desfavorável.

O efeito da forma da isoterma de equilíbrio para uma coluna de leito fixo pode ser convenientemente expressa em termos das variáveis  $(q^* - q_0) / (q_0 - q_0')$  e  $(c - c_0) / (c_0 - c_0')$ , como mostrada na figura 2.7 (Ruthven 1984).

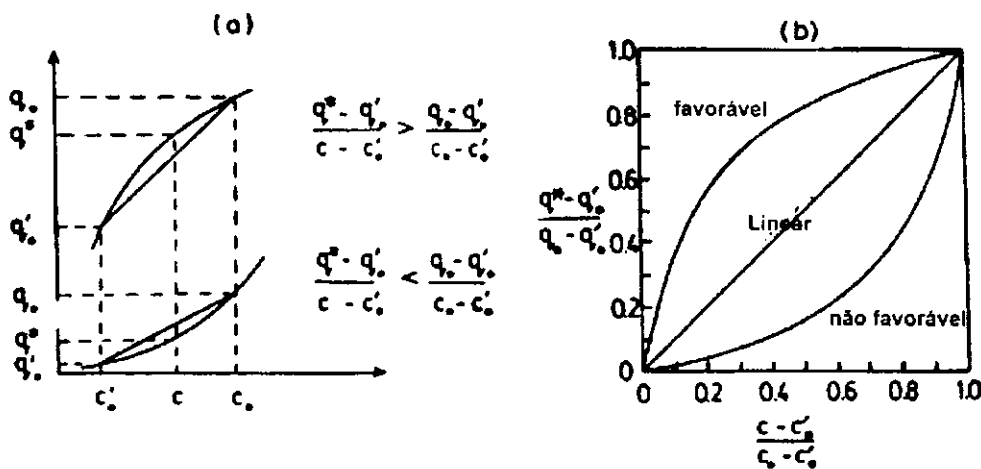


Figura 2.7: (a) Isotermas de equilíbrio e (b) Diagramas de equilíbrio mostrando as diferenças entre sistemas favoráveis, não favoráveis e sistemas lineares (Ruthven, 1984).

onde  $q_0 - q_0'$  e  $c_0 - c_0'$  representam as mudanças na fase adsorvida e na concentração da fase fluida sobre a zona de transferência de massa para o componente considerado.

Segundo Ruthven (1984), é possível ter a seguinte classificação para um sistema de transição simples:

1) Natureza das relações de equilíbrio

- a) Isoterma linear
- b) Isoterma favorável
- c) Isoterma não favorável

2) Sistema isotérmico ou próximo ao isotérmico

- a) Isotérmico – Resistência à transferência de calor pode ser desprezível.

- b) Próximo ao isotérmico – Ocorre em sistemas cromatográficos quando as espécies adsorvidas possuem um alto calor de adsorção ou estão presentes em alta concentração.

### 3) Concentração dos componentes adsorbáveis

- a) Sistema diluído – O adsorbato está presente em baixa concentração na presença de um inerte.
- b) Sistema concentrado – Os adsorbatos estão presentes em alta concentração.

### 4) Modelo de fluxo

- a) Fluxo pistonado – Dispersão axial desprezível
- b) Sem fluxo pistão – Dispersão axial significativa

### 5) Complexidade Cinética

- a) Resistência à transferência de massa desprezível
- b) Apenas uma resistência à transferência de massa
- c) Duas resistências à transferência de massa
  1. Resistência no filme externo
  2. Duas resistências internas (macroporo ou microporo)
- d) Três resistências à transferência de massa
  1. Resistência no filme externo
  2. Resistência no macroporo
  3. Resistência no microporo

#### **2.9.4. Modelos para Sistemas de Transição Simples**

Uma solução analítica geral para sistemas de transição simples que apresenta uma relação de equilíbrio não linear, (isoterma de Langmuir), está mostrada, na tabela 1, a seguir (Ruthven 1984):

**Tabela 2.1** O Modelo de Thomas (Ruthven 1984)

Equações Dimensionais	Equações Adimensionais
$v \frac{\partial c}{\partial z} + \frac{\partial c}{\partial t} + \left( \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right) \frac{\partial \bar{q}}{\partial t} = 0 \quad (2.15)$	$\frac{\partial (c/c_0)}{\partial \xi} + \frac{\partial (\bar{q}/q_0)}{\partial T} = 0 \quad (2.16)$
$\frac{\partial \bar{q}}{\partial t} = k[c(q_s - q) - \beta q(c_0 - c)] \quad (2.17)$	$\frac{\partial (\bar{q}/q_0)}{\partial T} = \left( \frac{c}{c_0} \right) \left( 1 - \frac{\bar{q}}{q_s} \right) - \beta \left( \frac{\bar{q}}{q_0} \right) \left( 1 - \frac{c}{c_0} \right) \quad (2.18)$
$\tau = (kc_0)(t - z/v) \quad (2.19)$	$\xi = \frac{kq_0z}{v} \left( \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right) \quad (2.20)$

Solução

$$\frac{c}{c_0} = \frac{J(\beta\xi, \tau)}{J(\beta\xi, \tau) + [1 - J(\xi, \beta\tau)] \exp[(\beta - 1)(\tau - \xi)]} \quad (2.21)$$

$$J(\alpha, \beta) = 1 - \int_0^\alpha \exp(-\beta - \alpha) I_0(2\sqrt{\beta\xi}) d\xi \quad (2.22)$$

O fator de separação  $\beta$  descrito por Ruthven, (1984) para sistemas que apresentam isotermas de Langmuir é dado pela seguinte relação:

$$\beta = 1 - \frac{q_0}{q_s} \quad (2.23)$$

Para o cálculo dos parâmetros  $\tau$  e  $\xi$  utilizados no modelo de Thomas, mostrado na tabela 1, necessita-se do valor do parâmetro  $k$ , coeficiente efetivo de transferência de massa. Este pode ser obtido por uma extensão da aproximação de Glueckauf como mostrada a seguir:

$$\frac{1}{kK} = \frac{R_p}{3k_f} + \frac{R_p^3}{15\varepsilon_p D_p} + \frac{r_c^2}{15K D_c} \quad (2.24)$$

Para a equação (2.24), o primeiro termo do segundo membro da equação refere-se à resistência no filme externo, o segundo termo à difusão no macroporo, e o terceiro termo à difusão no microporo.

Considerando a forma da isoterma de Langmuir linear para baixas concentrações, o valor de K pode ser obtido pela seguinte relação:

$$dq^*/dc = K$$

onde:

$$\frac{dq^*}{dc} = \frac{bq_s}{(1+bc)^2} \quad (2.25)$$

### 2.9.5. Sistema de Transição Múltipla

Considerando  $i$  espécies que serão adsorvidas, passando pelo elemento de leito mostrado anteriormente na figura 2.6, e sendo a concentração da fase fluida dada como  $c_i(z,t)$ , a equação do balanço de massa para cada componente será:

$$-D_L \frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial z}(vc_i) + \frac{\partial c_i}{\partial t} + \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon}\right) \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} = 0 \quad (2.26)$$

O balanço de massa na partícula adsorvente produz a taxa de adsorção para cada componente, a qual pode ser escrita para a forma generalizada:

$$\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t} = f(q_1, q_2, \dots, c_1, c_2) \quad (2.27)$$

onde, entende-se que a função pode representar as equações de difusão associadas com as condições de contorno (Ruthven, 1984).

## 2.9.6. Classificação dos Sistemas de Adsorção

A complexidade do comportamento dinâmico de uma coluna de adsorção está diretamente relacionada com o número de componentes presentes no sistema e da natureza da operação (isotérmica ou adiabática). Estes fatores determinam o número de transição ou zonas de transferência de massa dos sistemas de adsorção, de forma que pode-se ter a seguinte classificação, segundo Ruthven (1984):

1. Sistema de Transição simples
  - a) Um adsorbato com um inerte, isotérmico ou quase isotérmico
  - b) Dois adsorbatos sem inerte, isotérmico ou quase isotérmico
  
2. Sistemas de Dupla Transição
  - a) Dois adsorbatos com inerte, isotérmico
  - b) Três adsorbatos sem inerte, isotérmico
  - c) Um adsorbato com inerte, adiabático
  - d) Dois adsorbatos sem inerte, adiabático
  
2. Sistemas de Múltipla Transição
  - a) Quatro ou mais componentes, isotérmico
  - b) Três ou mais componentes, adiabático
  - c) Três componentes, isotérmico, com seletividade reversível
  - d) Dois componentes, adiabático, com seletividade reversível

O comportamento para a adsorção em leito fixo de sistemas multicomponentes é, em geral, similar ao comportamento observado para sistemas com um único componente, principalmente quando este se comporta de forma isotérmica na presença de um inerte e todas as espécies adsorvidas estão presentes em baixas concentrações.

Para a maioria dos sistemas práticos de adsorção, a situação é mais complicada, uma vez que a coluna de leito fixo se comporta adiabaticamente,

mais que isotermicamente e estão presentes mais de uma espécie a serem adsorvidas na alimentação.

Quando se trabalha com altas concentrações e sistemas não-isotérmicos, as considerações feitas para sistemas com um único componente não podem ser aplicadas, uma vez que o comportamento do equilíbrio da adsorção é afetado tanto pelos demais componentes presentes, como também pela temperatura (Ruthven 1984).

## CAPÍTULO III

### PLANEJAMENTO EXPERIMENTAL E OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS

#### 3.1. Planejamento Experimental

Um planejamento experimental consiste em estudar o efeito de um ou mais fatores experimentais (variáveis de entrada) sobre as respostas (variáveis de saída) de um sistema, utilizando os princípios estatísticos, de forma a obter o máximo de informações, realizando o menor número possível de experimentos.

A essência de um bom planejamento consiste em projetar um experimento de forma que este seja capaz de fornecer exatamente o tipo de informação desejada. Desta forma, a otimização do processo por planejamento fatorial e análise de superfície de resposta, tem se tornado um método de análise na determinação de faixas de operação em que se obtêm ótimos desempenhos para as respostas desejadas.

Um dos problemas mais comuns em um planejamento experimental é a determinação da influência de uma ou mais variáveis de entrada sobre uma outra variável de interesse.

A primeira coisa a fazer, no planejamento de um experimento, é determinar quais são as variáveis de entrada e as respostas importantes para o sistema que se deseja estudar. Os fatores, isto é, as variáveis controladas pelo experimentador, tanto podem ser qualitativas como quantitativas. Dependendo do problema, pode existir mais de uma resposta de interesse. Estas respostas também podem ser qualitativas.

Em seguida, é preciso definir claramente que objetivo se pretende alcançar com os experimentos realizados, uma vez que estes determinarão o tipo de planejamento que deve ser utilizado. Cada objetivo requer a construção de um planejamento experimental diferente.

Segundo Barros Neto et al., (1995), os métodos de planejamento experimental mais conhecidos para a otimização de experimentos são o Simplex Seqüencial, o Planejamento Fatorial e a Análise de Superfície de Resposta.

### **3.1.1 Simplex Seqüencial**

A utilização do método Simplex necessita do conhecimento da resposta da etapa imediatamente anterior, limitando-se a realizar apenas um experimento de cada vez. Conseqüentemente, só é possível otimizar uma resposta passo a passo, caso se obtenha várias respostas de interesse, é necessário escolher qual delas possui melhor aplicação.

Existem diversos métodos de otimização do simplex: o simplex básico; o simplex modificado e o simplex supermodificado. A construção de cada simplex requer um grande número de experimentos. Apesar disso, o simplex modificado e o supermodificado normalmente conseguem alcançar o máximo (ou mínimo, se for o caso) com um número total de experimentos menor do que o que seria necessário para o simplex básico.

### **3.1.2 Planejamento Fatorial e Análise de Superfície de Resposta**

Para realizar um planejamento fatorial, é necessário, em primeiro lugar especificar os níveis em que cada fator será estudado, ou seja, os valores dos fatores que serão empregados no planejamento.

Um planejamento fatorial requer a execução de experimentos para todas as possíveis combinações dos níveis dos fatores.

No planejamento fatorial seleciona-se inicialmente um número fixo de níveis para cada uma das variáveis de entrada, realizando, posteriormente, os experimentos com todas as combinações possíveis. Tendo o objetivo de realizar o mínimo de experimentos e determinar preliminarmente os fatores que tenham ou não influência significativa sobre a resposta, faz-se um planejamento fatorial com dois níveis (nível - 1 e nível + 1) para cada fator. Se  $n$  fatores estão contidos no estudo, o planejamento fatorial necessitará da realização de  $2^n$  ensaios diferentes, cobrindo todas as combinações possíveis (Silva, 1998).



A metodologia das superfícies de resposta é uma técnica de otimização baseada no emprego de planejamentos fatoriais introduzida por G.E.P. Box na década de 50 e, desde então tem sido usada com grande sucesso na modelagem de diversos processos industriais. Esta técnica é constituída por duas etapas distintas: modelagem e deslocamento. Estas etapas são repetidas tantas vezes quantas forem necessárias, com o objetivo de atingir uma região ótima (máxima ou mínima) da superfície investigada. A modelagem normalmente é feita ajustando-se modelos lineares ou quadráticos a resultados experimentais obtidos a partir de planejamentos fatoriais. O deslocamento se dá sempre ao longo do caminho de máxima inclinação de um determinado modelo, que é a trajetória na qual a resposta varia de forma mais pronunciada (Barros Neto et alli, 1995).

O número de ensaios necessários para a realização de um planejamento fatorial completo,  $2^n$ , aumenta rapidamente com o valor de n, principalmente se for necessária a realização de ensaios em duplicata a fim de obter o erro experimental. Desta forma é necessário a realização de pelo menos 2 ensaios no ponto central (nível 0), correspondendo à média aritmética dos níveis -1 e + 1.

Planejamentos que contêm um ponto central, englobam três níveis de cada variável e não apenas dois. Este fato permite verificar se há falta de ajuste para um modelo linear, o que seria impossível se existissem apenas dois níveis.

Quando um modelo linear não se ajusta ao sistema, deve-se tentar um modelo quadrático, em que ocorre a ampliação do planejamento. Esta ampliação pode ser feita de várias maneiras. A mais comum é a construção do chamado planejamento em estrela, em que acrescenta-se ao planejamento já existente um planejamento idêntico, girando, porém de 45 graus em relação à orientação de partida. Desta forma o planejamento passa a ter na sua configuração os níveis - $\delta$ , -1, +1 e  $\delta$  (Silva, 1999).

O cálculo do valor de  $\delta$  é feito através da equação:

$$\delta = (2^K)^{1/4} \quad (3.1)$$

onde K é o número de variáveis (fatores) independentes.

## CAPÍTULO IV

### MATERIAIS E MÉTODOS

#### 4.1. Produtos químicos

##### ➔ Adsorbatos

➔ **Metanol P.A da marca Vetec** - com 99,8% de pureza, massa molecular de 32,04, densidade 0,792 Kg/l.

➔ **Etanol P.A da marca ERICK LTDA** – com 99,5% de pureza, massa molecular de 46,07 e densidade de 0,79Kg/l.

##### ➔ Inerte

➔ **Tolueno P.A** , fornecido pela Arte Cola Nordeste S/A Indústria Química, com 99,7% de pureza , massa molecular de 93,13, densidade relativa de 0,866 Kg/l.

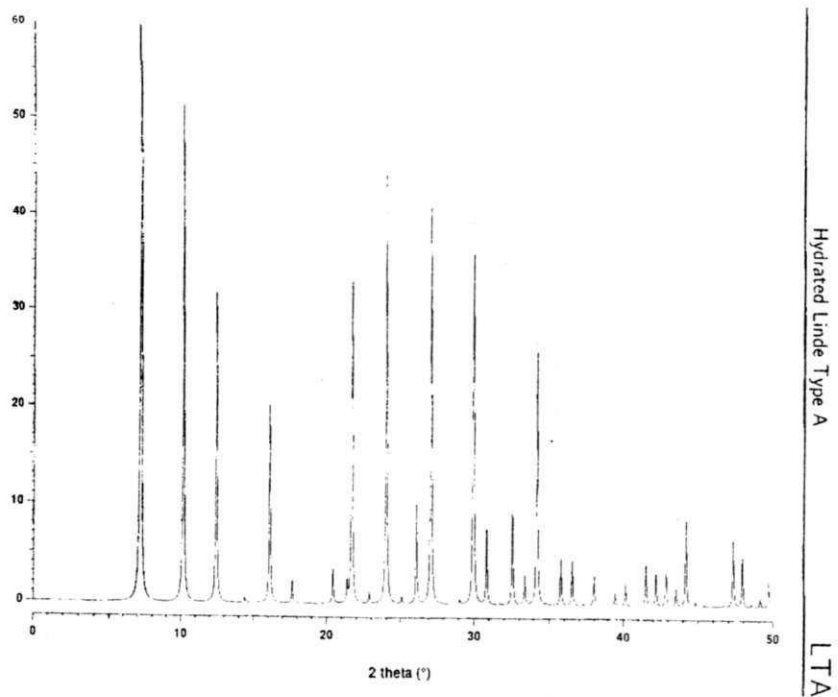
##### ➔ Adsorvente

Foram utilizados "pellets" cilíndricos comerciais de zeólita do tipo 4A, cujas especificações para o comprimento, diâmetro e densidade aparente estão sumarizadas na tabela 4.1 e detalhadas no anexo A, página 85. Os difratogramas da amostra experimental e de uma amostra padrão da zeólita 4A, estão, mostrados na figura 1.

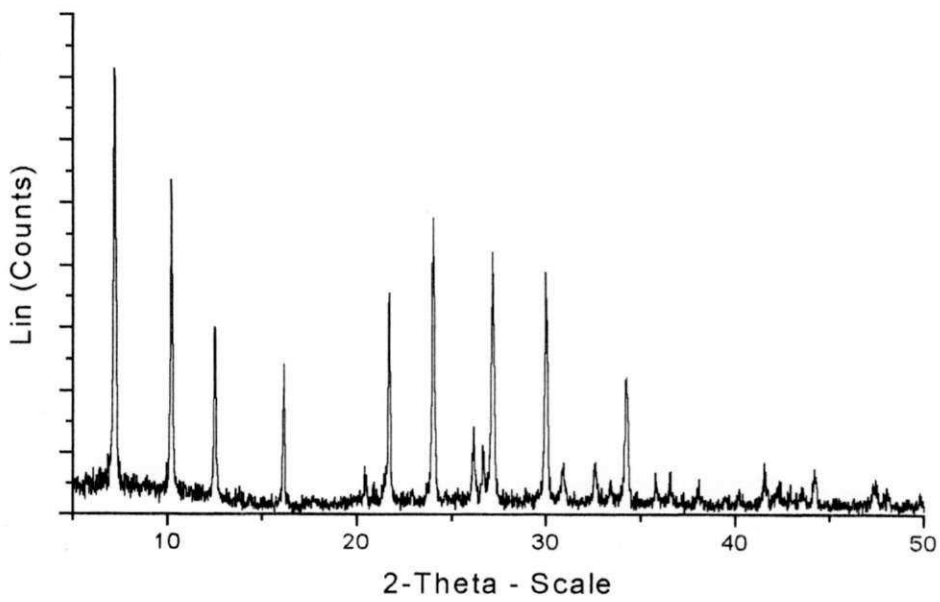
**Tabela 4.1.** Propriedades do Adsorvente.

<b>Propriedades do Adsorvente Utilizado</b>	
Tamanho dos poros <sup>(1)</sup>	4,0 Å (4 x 10 <sup>-10</sup> m)
Diâmetro médio dos pellets	0,158 cm
Comprimento médio dos pellets	0,361 cm
Densidade aparente dos pellets	1,267 g/cm <sup>3</sup>

(1). Fonte: Manual do Fabricante – CECA ELF AQUITAINE GROUP.



(A)



(B)

Figura 4.1. (A) Difratoograma Padrão da Zeólita 4A (Z. Kristallogr, 1971)  
 (B). Difratoograma da Amostra Experimental Utilizada

## 4.2. Equipamentos Utilizados

### 4.2.1. Coluna de Leito Fixo

O equipamento da coluna de adsorção utilizado para a obtenção dos dados experimentais está apresentado na figura 4.2.

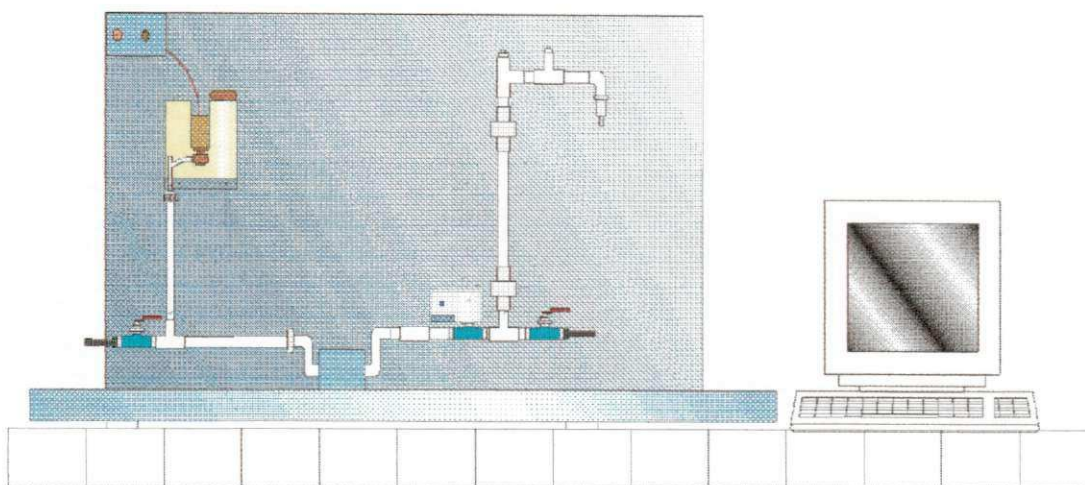


Figura 4.2. Equipamento experimental utilizado: Coluna de Leito Fixo

Este é composto basicamente por um tanque de armazenamento de PVC com capacidade para 2 litros e por uma coluna de vidro (leito fixo), com altura de 30cm e diâmetro interno de 2,94cm. Ambos, tanque de armazenamento e coluna de leito fixo estão conectados entre si através de tubos PVC.

A saída da solução do tanque de armazenamento se dá pelo fundo do recipiente que se encontra acoplado a uma bomba cuja vazão é controlada manualmente. A solução entra pela parte inferior da coluna de leito fixo e no topo desta são retiradas alíquotas a serem analisadas.

Na entrada e na saída da coluna de leito fixo estão acoplados sensores de temperatura internos com a finalidade de registrar as mudanças de temperatura que ocorrem durante todo o procedimento experimental. Um sensor de temperatura também está colocado próximo ao tanque de alimentação para registrar a temperatura ambiente. Todos os sensores de temperatura estão

conectados ao computador que fornece as leituras em forma de arquivo de dados.

Uma válvula de regulação fina está conectada entre a saída do tanque de alimentação e a entrada da coluna de leito fixo a fim de impedir a passagem da solução antes do início da corrida experimental. Válvulas idênticas se encontram nas extremidades do equipamento para a retirada da solução remanescente após o término do procedimento experimental.

#### **4.2.2. Refratômetro**

Um refratômetro digital da marca ACATEC foi utilizado tanto para a obtenção das curvas de calibração para o sistema etanol-tolueno e metanol-etanol, como também para as leituras de concentração das soluções antes do procedimento experimental e leituras das amostras obtidas no topo da coluna de leito fixo. Este equipamento possui uma precisão de leitura na quarta casa decimal e está acoplado a um banho termostaticado de forma a controlar a temperatura de leitura das amostras, a fim de se obter uma medida mais precisa dos dados experimentais.

#### **4.2.3. Mulfla**

Utilizada para o tratamento térmico das peneiras moleculares, da marca EDG Equipamentos.

#### **4.2.4. Seringas**

Seringas descartáveis de 3 ml foram utilizadas para coletar amostras no topo da coluna de leito fixo e para leitura no refratômetro digital.

### 4.3. Metodologia

#### 4.3.1. Obtenção das Curvas de Calibração

Foram feitas curvas de calibração tanto para o sistema etanol-tolueno como para o sistema metanol-etanol.

Para o sistema etanol-tolueno a curva de calibração foi obtida pela preparação de várias soluções cujas concentrações estavam entre 1,2% e 21% em peso de etanol. Após o preparo das soluções, lia-se o índice de refração no refratômetro digital acoplado a um banho termostaticado como descrito no item 4.22. A leitura era realizada com a temperatura do banho termostaticado em 20°C a fim de se ter uma interpretação mais precisa dos resultados.

Para o sistema metanol-etanol seguiu-se o mesmo procedimento anterior com as faixas de concentração entre 1% e 10% em peso de metanol.

Com os valores do índice de refração obtidos para ambos os sistemas, etanol-tolueno e metanol-etanol, foi possível traçar curvas de calibração obtendo a equação da reta ajustada aos valores obtidos. A equação geral da reta é dada por:

$$C(\%) = A - B * I.R \quad (4.1)$$

onde C = Concentração da solução (g de soluto /g de solvente)

A e B = Coeficiente linear e angular da equação respectivamente

I.R = Índice de Refração

As curvas de calibração bem como as equações das retas para os sistemas etanol-tolueno e metanol-etanol estão no anexo B, páginas 89 e 90 respectivamente.

### **4.3.2. Tratamento das Peneiras Moleculares**

Antes da realização de cada experimento, as peneiras moleculares foram submetidas a um tratamento térmico, segundo recomendações de Alsina et alii (1992, 1993).

O tratamento térmico teve a finalidade de eliminar o material fluído adsorvido anteriormente. Este tratamento consistia, basicamente em expor as peneiras moleculares a uma temperatura inicial de 100°C por uma hora. Após esse período, a temperatura foi aumentada para 200°C e assim sucessivamente até atingir 400°C.

Ao final do tratamento térmico, as zeólitas eram transferidas para um recipiente limpo com tampa e colocadas em um dessecador até atingir a temperatura ambiente, onde então estavam em condições de uso.

### **4.3.3. Delineamento da Matriz Planejamento Experimental**

Tendo o objetivo de obter um estudo mais abrangente das variáveis de entrada, concentração da solução, vazão de operação e altura do leito fixo, sobre a dinâmica de adsorção e co-adsorção dos sistemas etanol-tolueno e metanol-etanol em um leito fixo de zeólitas 4A, foi elaborado um planejamento fatorial de dois níveis, uma vez que este permite um estudo mais abrangente das variáveis de entrada de maneira organizada com uma quantidade mínima de experimentos.

O planejamento utilizado foi o planejamento fatorial  $2^3$ , mais configuração estrela, com a realização de 3 experimentos no ponto central, para assegurar a reprodutibilidade dos dados experimentais. As repetições fidedignas dos experimentos permitem a obtenção de uma estimativa da variabilidade, em função do erro experimental, resultando no total de 17 experimentos para cada sistema, etanol-tolueno e metanol-etanol.

As tabelas 4.2, 4.3 e 4.4 mostram os valores reais da concentração da solução, vazão de operação e altura do leito fixo com os níveis dos fatores utilizados nas corridas experimentais e a matriz planejamento experimental empregada para ambos os sistemas, etanol-tolueno e metanol-etanol.

**Tabela 4.2.** Valores reais e os níveis dos fatores estudados para o planejamento fatorial  $2^3$  mais configuração estrela do processo para soluções de etanol-tolueno.

Variáveis	Nível (-1,682)	Nível (-1)	Nível (0)	Nível (+1)	Nível (+1,682)
Concentração das soluções (C) em %	3,3	5,0	7,5	10,0	11,9
Vazão de Operação (Q) em ml/s	2,5	4,4	7,2	10,0	11,9
Altura do leito de zeólitas (H) em cm	6,6	10,0	15,0	20,0	23,4

**Tabela 4.3.** Valores reais e os níveis dos fatores estudados para o planejamento fatorial  $2^3$  mais configuração estrela do processo para soluções de metanol-etanol.

Variáveis	Nível (-1,682)	Nível (-1)	Nível (0)	Nível (+1)	Nível (+1,682)
Concentração das soluções (C) em %	2,3	3,0	4,0	5,0	5,7
Vazão de Operação (Q) em ml/s	2,5	4,4	7,2	10,0	11,9
Altura do leito de zeólitas (H) em cm	6,6	10,0	15,0	20,0	23,4



**Tabela 4.4.** Matriz de Planejamento Experimental. (Fatorial  $2^3$  + Configuração Estrela)

Experimentos	Concentração das soluções (C) em %	Vazão de operação(Q) em ml/s	Altura do leito de zeólitas (H) em cm
1	-1	-1	-1
2	+1	-1	-1
3	-1	+1	-1
4	+1	+1	-1
5	-1	-1	+1
6	+1	-1	+1
7	-1	+1	+1
8	+1	+1	+1
9	0	0	0
10	0	0	0
11	0	0	0
12	$-2^{3/4}$	0	0
13	0	$-2^{3/4}$	0
14	0	0	$-2^{3/4}$
15	$2^{3/4}$	0	0
16	0	$2^{3/4}$	0
17	0	0	$2^{3/4}$

Para o sistema etanol-tolueno, a faixa de concentração empregada foi obtida com base em alguns trabalhos já realizados anteriormente como o de Pereira (1998) e o de Melo (1997). A vazão de operação e a altura do leito fixo foram obtidas mediante as condições operacionais da coluna de adsorção.

Para o sistema metanol-etanol, a faixa de concentração de metanol foi pequena a fim de verificar-se a capacidade de adsorção do metanol, quando este se encontra presente, em baixas concentrações, junto com o etanol, em excesso.

#### 4.3.4. Obtenção das Curvas de Ruptura

O estudo da adsorção do etanol e a co-adsorção do metanol e etanol em um leito fixo de zeólitas 4A foi realizado no sistema experimental mostrado na figura 4.2 e a metodologia aplicada pode ser apresentada através do diagrama mostrado na figura 4.3 a seguir.

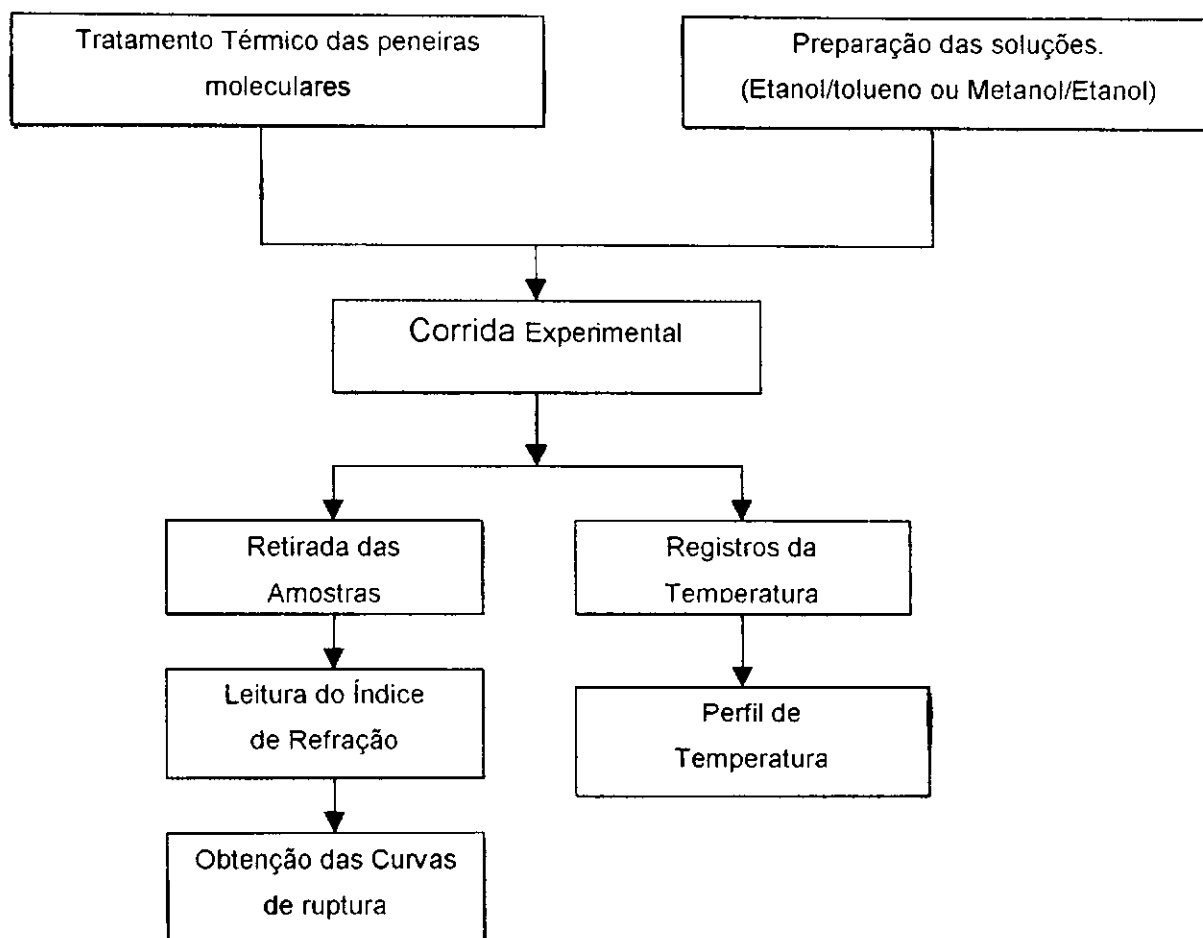


Figura 4.3. Metodologia para a obtenção das curvas de ruptura e perfil de temperatura

Após o tratamento térmico das peneiras moleculares, estas eram transferidas para a coluna de leito fixo com o auxílio de um funil até a altura do leito desejada. Este procedimento era realizado sempre da mesma forma a fim de garantir que o leito possuísse o mesmo empacotamento em todas as corridas experimentais. Para a adsorção do etanol, o leito fixo era completamente preenchido com tolueno puro, e para a co-adsorção, o leito se encontrava sem inerte.

Uma solução de concentração conhecida era colocada no tanque de armazenamento, após verificar que todas as válvulas do sistema operacional estavam fechadas. O recipiente era fechado, a fim de evitar a evaporação e conseqüentemente, mudança no valor inicial da concentração da solução.

Após escolher a vazão de operação desejada, ligava-se a bomba e abria-se a válvula entre o tanque de armazenamento e a coluna de leito fixo. No topo da coluna eram retiradas alíquotas em intervalos de tempos regulares o mais rápido possível, a fim de se ter uma grande quantidade de amostras. Os dados de temperatura eram registrados no banco de dados do computador durante todo o procedimento experimental.

A concentração inicial das soluções, a vazão de operação e a altura do leito fixo eram escolhidas de acordo com a matriz de planejamento experimental, mostrada na tabela 4.4. Todas as corridas experimentais foram realizadas de forma aleatória a fim de garantir que os efeitos não controlados pelo experimentador, que podem afetar as variáveis resposta, sejam balanceadas entre todos os experimentos, evitando-se desta forma possíveis perturbações na avaliação dos resultados em função do efeito destas variáveis não controladas.

As amostras eram retiradas com seringas descartáveis de 3 ml e em seguida eram lacradas com a tampa apropriada a fim de evitar perdas de concentração por evaporação. Após a coleta da última amostra, eram realizadas as leituras do índice de refração no refratômetro digital acoplado a um banho termostaticado. Em seguida estas leituras eram transformadas em concentração pela equação de correlação da curva de calibração mostrada no anexo A.

Após o término de cada corrida e com os valores de concentração obtidos eram traçadas as curvas de ruptura. Curvas de temperatura também eram traçadas pelos dados coletados pelos sensores de temperatura durante todo o procedimento experimental.

#### 4.3.5. Modelo Matemático Utilizado

Estudos anteriores realizados por Alsina et alli (1992) mostram que as isotermas para o sistema metanol-tolueno em zeólitas 4A seguem o modelo de Langmuir. Este mesmo modelo foi considerado por Pereira (1998) em seu trabalho sobre a adsorção do metanol em leito fixo de zeólitas 4A.

Para o sistema etanol-tolueno, a isoterma de equilíbrio segue o mesmo comportamento apresentado para o sistema metanol-tolueno. As isotermas para o sistema etanol-tolueno foram obtidas por Almeida (1997), e estão mostradas no anexo C página 91, bem como a sua forma linearizada a temperaturas de 20°C e 30°C respectivamente.

Nos gráficos das isotermas, podem-se observar os valores das constantes de Langmuir determinadas pelo autor, como também a forma da isoterma que por apresentar-se bastante retangular, pode ser considerada irreversível.

Desta forma, o modelo matemático escolhido para a análise da dinâmica da adsorção do etanol em leito fixo foi o modelo de Thomas, já relatado no capítulo 2. Este modelo também foi utilizado por Perreira (1998) em seu trabalho experimental.

Para a modelagem dos dados experimentais, foram feitas as seguintes considerações:

- Sistema isotérmico;
- Solução diluída;
- A concentração do soluto é uniforme dentro de cada pellet e na seção transversal da coluna;
- Os pellets cilíndricos foram modelados como esferas, com diâmetro equivalente à esfera de igual relação área/volume;
- Dispersão axial desprezível;
- Acúmulo de adsorbato nos poros desprezível;
- Velocidade do fluido constante através do leito;

## CAPÍTULO V

### 5.0. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com o objetivo de analisar o comportamento dinâmico e também a validade das considerações feitas para o modelo, relatadas anteriormente no capítulo 4, foram realizadas corridas experimentais. Os valores dos dados experimentais utilizados para cada sistema estão no anexo D para o sistema etanol-tolueno, páginas 95 a 103 e no anexo E, para o sistema metanol-etanol, páginas 105 a 113.

#### 5.1. Reprodutibilidade dos Dados Experimentais e Efeitos Térmicos

O planejamento experimental, utilizado tanto para o sistema etanol-tolueno como para o sistema metanol-etanol, contém três experimentos realizados no ponto central, que correspondem à média dos níveis (-1) e (+1), nas mesmas condições de operação. Com isso é possível verificar a reprodutibilidade dos dados experimentais.

Os resultados obtidos para os experimentos realizados no ponto central estão mostrados nas figuras 5.1 e 5.2 para o sistema etanol-tolueno e metanol-etanol respectivamente, onde se representam as concentrações de entrada de etanol na adsorção e metanol, na co-adsorção na corrente efluente em função do tempo de efluência.

Pelas curvas obtidas, observa-se que estas possuem uma boa reprodutibilidade, apesar das pequenas variações de concentração para ambos os sistemas experimentais. Os valores dos desvios médios entre as curvas são de  $\pm 0,38\%$  e  $\pm 0,43\%$  para o sistema etanol-tolueno e metanol-etanol respectivamente.

As figuras 5.1 e 5.2 mostram também as variações das temperaturas juntamente com a curva de ruptura correspondente, para o sistema etanol-tolueno e metanol-etanol, respectivamente.

Pela figura 5.1, observa-se que os valores de temperatura registrados pelos sensores inferior e superior não são muito diferentes quando comparados com a temperatura ambiente, que foi em torno de  $27,0^{\circ}\text{C}$ , de modo que a adsorção do etanol em um leito fixo de zeólitas 4A na presença do inerte, tolueno, pode ser considerada praticamente isotérmica.

Este mesmo comportamento é também observado nos demais experimentos para a adsorção do etanol como mostrado nas tabelas apresentadas no anexo D página 95.

Na figura 5.2, as diferenças de temperatura registradas pelo sensor superior são bastante elevadas, chegando em torno de  $38^{\circ}\text{C}$  nesse experimento. No entanto, o sensor inferior praticamente não alterou o seu valor inicial, ficando próximo ao valor da temperatura ambiente, em torno de  $28^{\circ}\text{C}$ .

Nos demais experimentos realizados para a co-adsorção do metanol e etanol, apresentados no anexo E, página 105, mostra também que o sistema não se comporta de forma isotérmica.

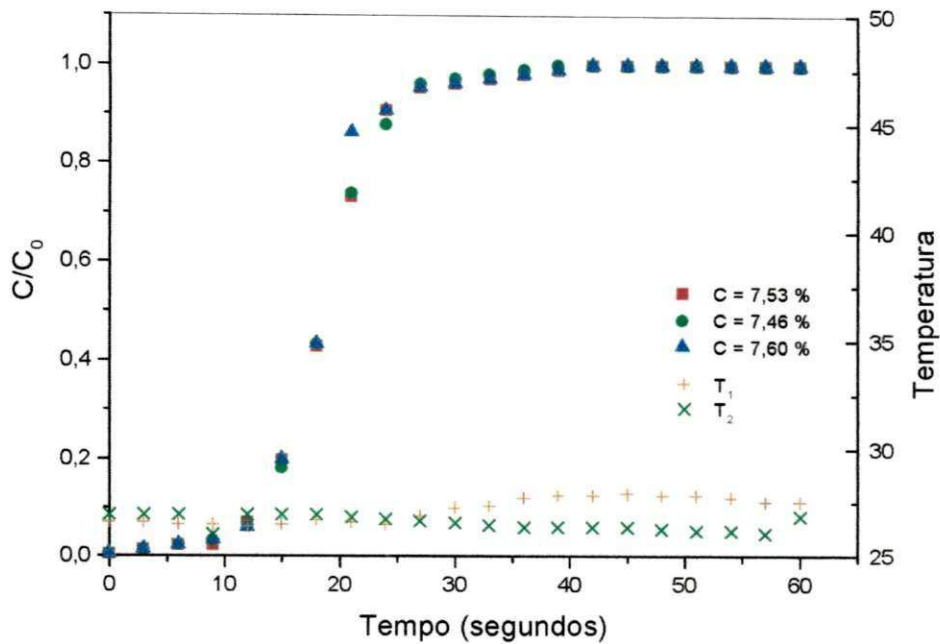


Figura 5.1. Reprodutibilidade dos dados experimentais e evolução das temperaturas de entrada e saída do leito fixo, para  $C_0 = 7,58\%$  de etanol. Vazão de operação de  $7,2 \text{ cm}^3/\text{s}$  e altura do leito fixo de 15 cm. C: concentração de etanol na entrada da coluna.

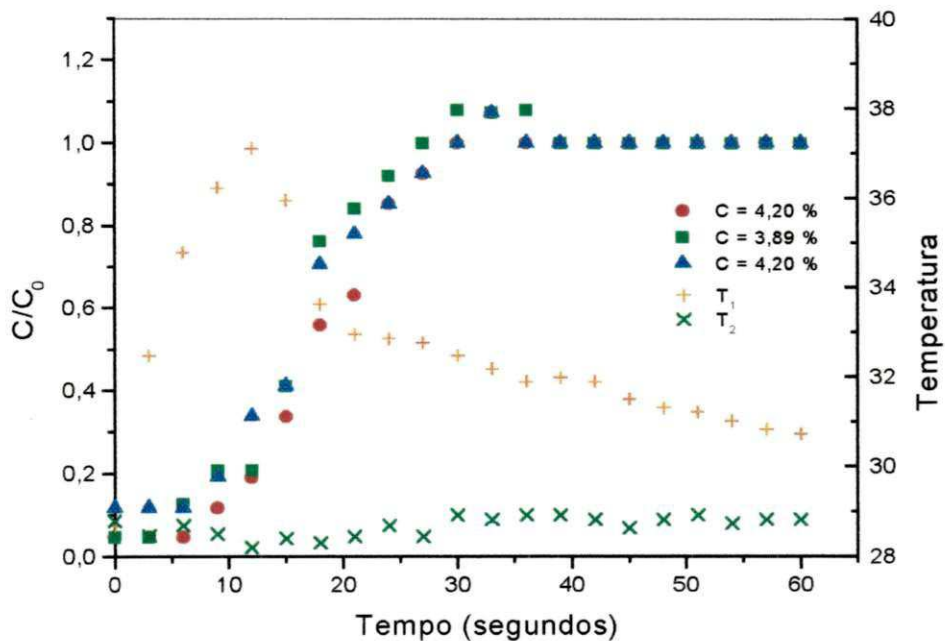


Figura 5.2. Reprodutibilidade dos dados experimentais e evolução das temperaturas de entrada e saída do leito fixo, para  $C_0 = 3,89\%$  de metanol. Vazão de operação de  $7,2 \text{ cm}^3/\text{s}$  e altura do leito fixo de 15 cm. C: concentração de metanol na entrada da coluna

## 5.2. Influência da Concentração inicial sobre as curvas de ruptura. Efeitos térmicos

### 5.2.1. Sistema Etanol – Tolueno

As figuras 5.3, a 5.6 ilustram a influência da concentração de entrada sobre as curvas de ruptura levantadas para a adsorção do etanol. Estas foram obtidas utilizando diversos valores da concentração de entrada de etanol na solução para valores de vazão de operação e altura do leito fixo constantes. Os gráficos, abaixo das curvas de ruptura, ilustram as variações de temperatura registradas durante o decorrer da corrida experimental.

Observa-se que para valores de vazão de operação menores,  $4,4\text{cm}^3/\text{s}$ , ilustradas nas figuras 5.3 (a) e 5,4 (a), as soluções com concentração de entrada de etanol mais elevada, 10,0%, possuem um tempo de ruptura menor que as apresentadas pela concentração inicial de 5,0%, sendo esta menor ainda quando a altura do leito fixo é de 10,0cm.

Para vazões de operação de  $10,0\text{cm}^3/\text{s}$ , figuras 5.5 (a) e 5.6 (b), este comportamento não é observado e ambos os sistemas apresentam uma zona de adsorção pequena, sendo esta menor ainda para os experimentos realizados com uma altura de leito fixo de 10,0 cm.

A influência da concentração de entrada de etanol na solução é melhor observada na figura 5.7 (a). Verifica-se que os sistemas que possuem uma concentração inicial de etanol entre 7,5 % e 10,0 % são praticamente equivalentes, apresentando tempos de ruptura menores do que a apresentada pela concentração de 3,37% de etanol.

Pelas figuras 5.3 a 5.7 (b) que apresentam os valores da diferença de temperatura entre o sensor superior e o sensor inferior, confirma-se o observado no ponto anterior, que as diferenças de temperatura obtidas são pequenas, em torno de  $3,0^\circ\text{C}$ , de forma que a adsorção do etanol em zeólitas 4A pode ser considerada quase isotérmica. Os efeitos são mais significativos para as concentrações de entrada maiores e vazões menores, uma vez que estes sistemas apresentam maior taxa de adsorção e possui menor capacidade de esfriamento, pelo escoamento de solução.



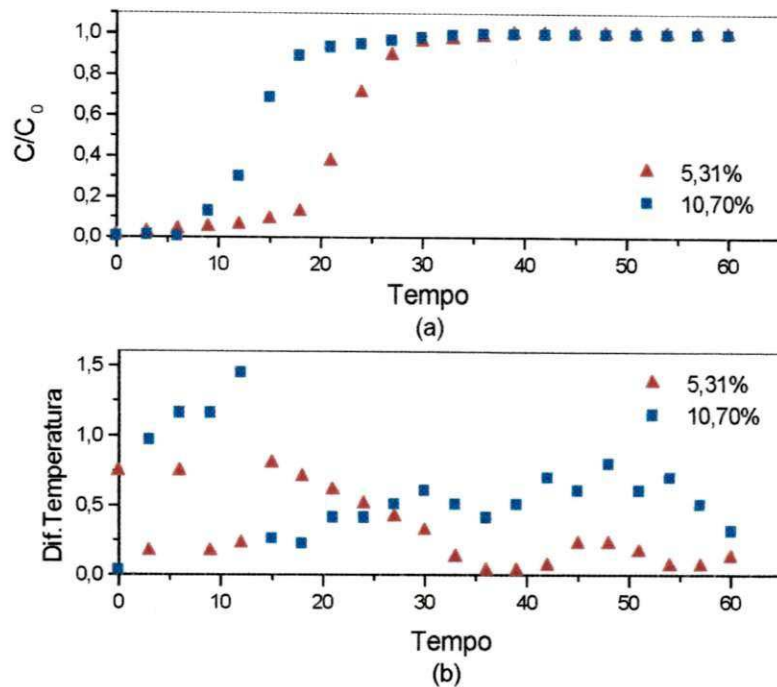


Figura 5.3. (a) Influência da concentração para o sistema etanol-tolueno com uma vazão de operação de  $4.4\text{cm}^3/\text{s}$  e altura de leito fixo de 10cm. (b). Efeitos Térmicos.

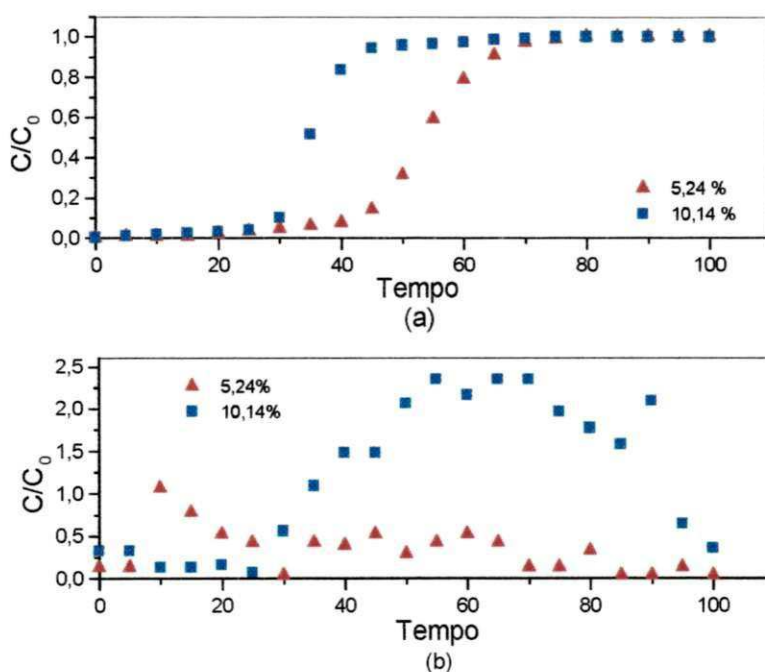


Figura 5.4. (a) Influência da concentração para o sistema etanol-tolueno com uma vazão de operação de  $4.4\text{cm}^3/\text{s}$  e altura de leito fixo de 20cm. (b). Efeitos Térmicos.

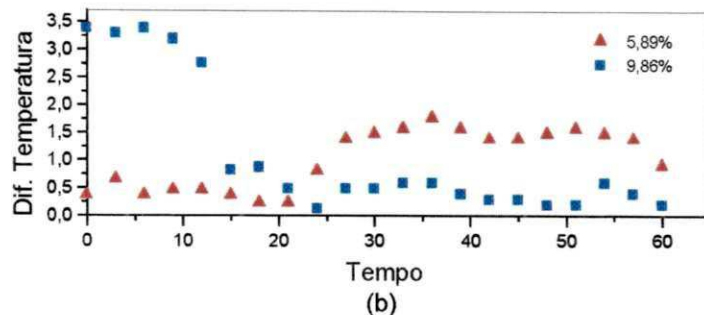
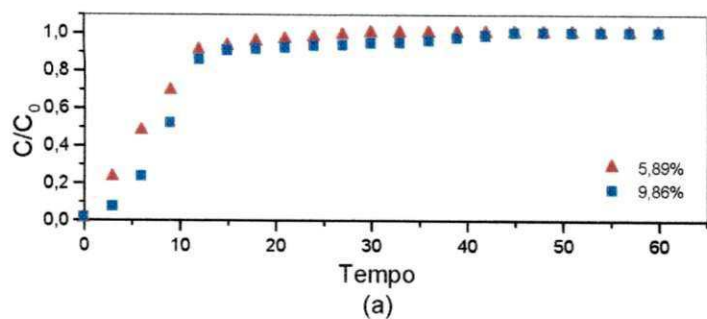


Figura 5.5. (a) Influência da concentração para o sistema etanol-tolueno com uma vazão de operação de  $10,0\text{cm}^3/\text{s}$  e altura de leito fixo de 10cm. (b). Efeitos Térmicos.

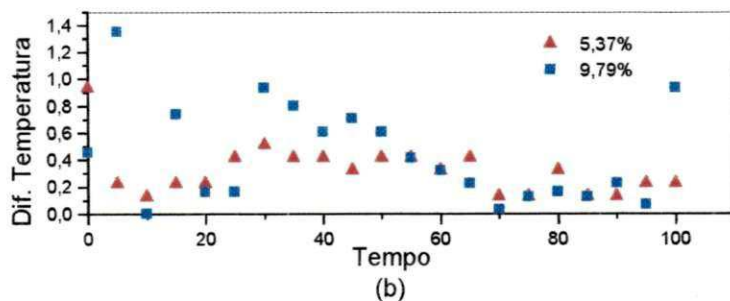
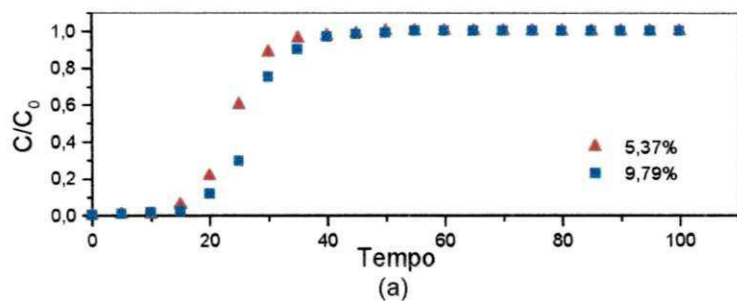


Figura 5.6. (a) Influência da concentração para o sistema etanol-tolueno com uma vazão de operação de  $10,0\text{cm}^3/\text{s}$  e altura de leito fixo de 20cm. (b). Efeitos Térmicos.

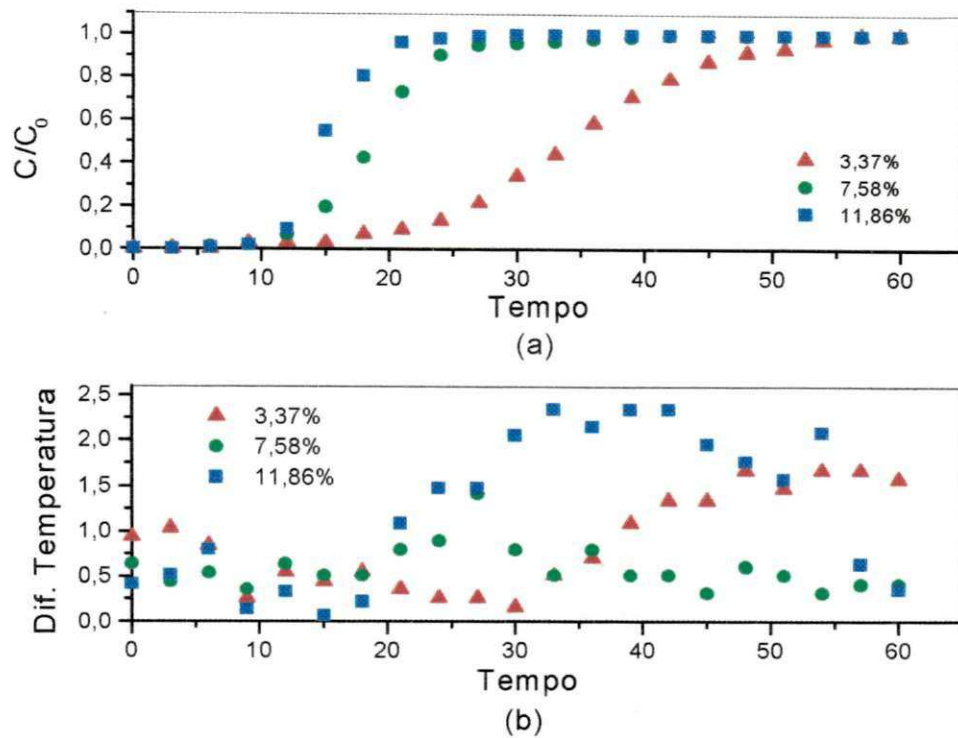


Figura 5.7. (a) Influência da concentração para o sistema etanol-tolueno com uma vazão de operação de  $7,2\text{cm}^3/\text{s}$  e altura de leito fixo de 15cm. (b). Efeitos Térmicos.

Fica claro que por ser o tolueno inerte à adsorção, para maiores vazões, o efeito de esfriamento é acentuado, atenuando a elevação de temperatura devido à exotermicidade de adsorção. É de acordo também com o esperado que, para concentrações maiores, produzem-se maiores aquecimentos.

É interessante notar que a resposta de concentração para leitos de 20cm e 15cm, como observado nas figuras 5.4 (b), 5.6 (b) e 5.7 (b), ocorre o pico de temperatura em quase todos os casos, após a saturação do leito. Já nos leitos curtos, o pico térmico dá-se logo no início do processo.

### 5.2.2. Sistema Metanol – Etanol

A influência da concentração de entrada de metanol sobre as curvas de ruptura está ilustrada nas figuras 5.8 a 5.12, obtidas pelo mesmo procedimento anterior, descrito na seção 5.2.1 para a adsorção do etanol. As variações de temperatura, observadas durante cada experimento, estão representadas abaixo das curvas de ruptura.

Analisando as figuras 5.8 (a) a 5.11 (a), pode-se observar que as curvas de ruptura obtidas são praticamente coincidentes, independente dos valores da concentração inicial de metanol empregado. Embora não estatisticamente significativo, um maior valor da concentração de entrada, apresenta como esperado, uma ligeira tendência a maiores valores de  $C/C_0$ .

Entretanto, como mostrado na figura 5.12 (a), observa-se que no caso de uma concentração de entrada de 2,35% em peso de metanol, apesar de ser menor do que as outras duas ilustradas na figura, apresenta uma curva de ruptura deslocada para o tempos menores, contrariamente ao esperado nas figuras discutidas anteriormente.

Com relação às diferenças de temperatura obtidas pelos sensores superior e inferior da coluna de leito fixo, pode-se notar que estas são maiores do que as obtidas para o sistema etanol – tolueno. As diferenças chegam praticamente a alcançar  $12^{\circ}\text{C}$ , sendo ainda maiores,  $14^{\circ}\text{C}$ , para os experimentos realizados a uma menor vazão de operação,  $4,4 \text{ cm}^3/\text{s}$  e uma altura de leito fixo de  $20,0 \text{ cm}$  como ilustrado na figura 5.10 (b). Os picos térmicos ocorrem próximos de  $t_{1/2}$ , ou seja, para valores de  $C/C_0$  igual à metade do valor da saturação. Deve-se considerar que contrariamente ao observado na adsorção simples de etanol ou metanol (Pereira, 1998), a não presença de um solvente inerte é responsável pelo maior aquecimento do leito.

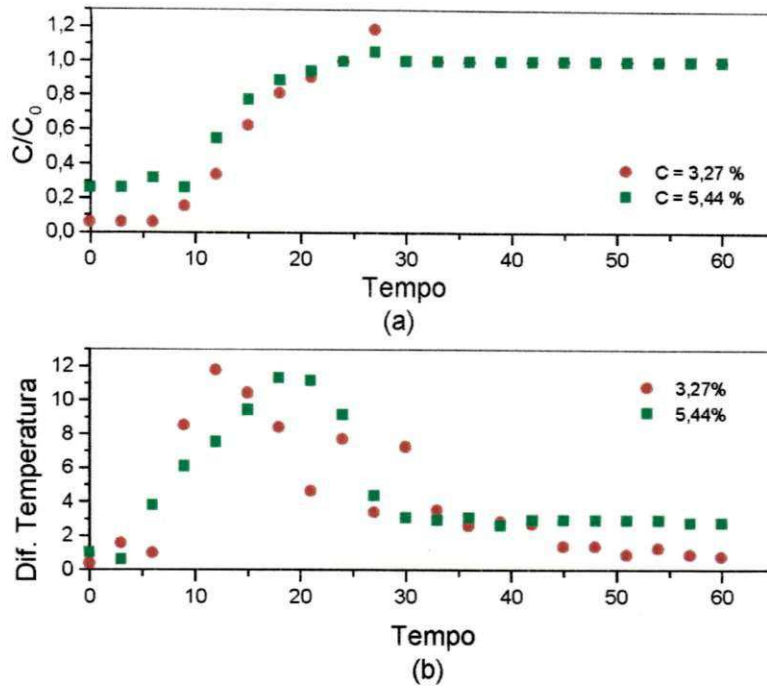


Figura 5.8. (a) Influência da concentração para o sistema metanol-etanol com uma vazão de operação de  $4,4\text{cm}^3/\text{s}$  e altura de leito fixo de 10cm. (b). Efeitos Térmicos.

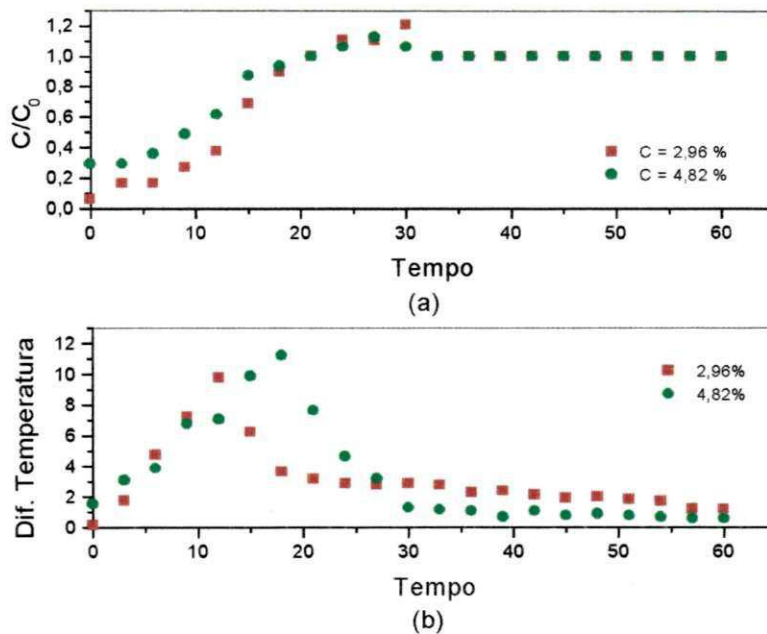


Figura 5.9. (a) Influência da concentração para o sistema metanol-etanol com uma vazão de operação de  $10,0\text{cm}^3/\text{s}$  e altura de leito fixo de 10cm. (b). Efeitos Térmicos.

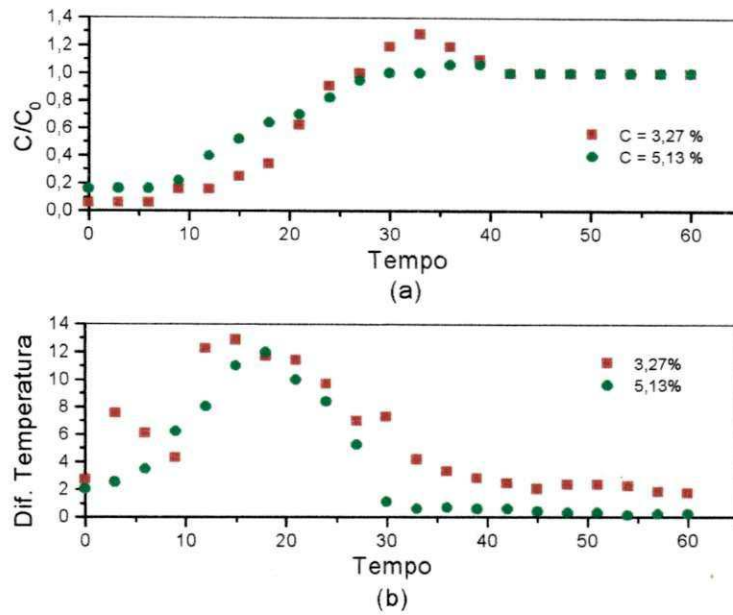


Figura 5.10. (a) Influência da concentração para o sistema metanol-etanol com uma vazão de operação de 4,4cm<sup>3</sup>/s e altura de leito fixo de 20cm. (b). Efeitos Térmicos.

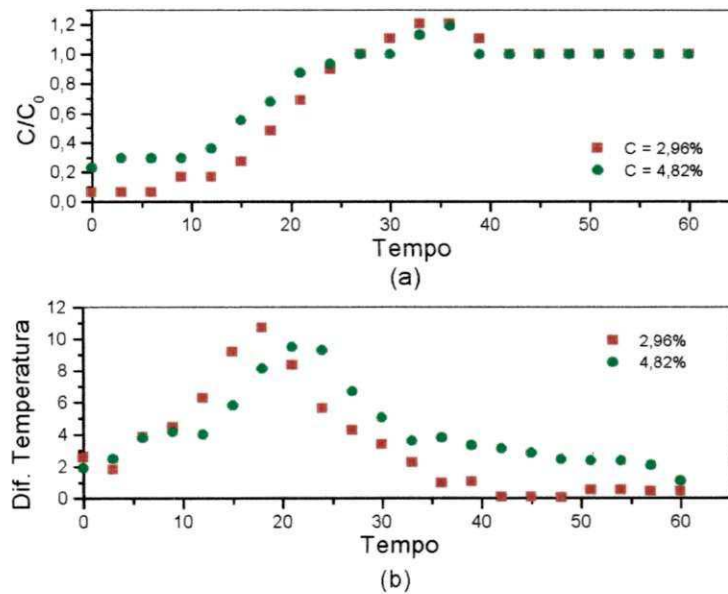


Figura 5.11. (a) Influência da concentração para o sistema metanol-etanol com uma vazão de operação de 10,0cm<sup>3</sup>/s e altura de leito fixo de 20cm. (b). Efeitos Térmicos.

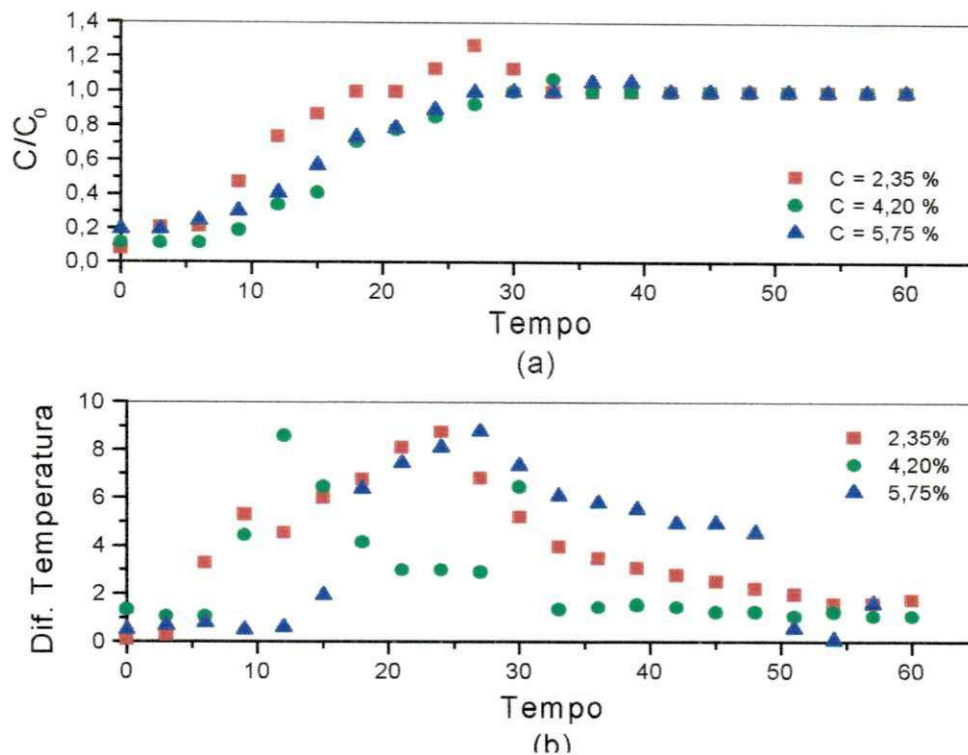


Figura 5.12. (a) Influência da concentração para o sistema metanol-etanol com uma vazão de operação de  $7,2\text{cm}^3/\text{s}$  e altura de leito fixo de 15cm. (b). Efeitos Térmicos.

### 5.3. Influência da Vazão de Operação sobre as curvas de Ruptura e Efeitos Térmicos

#### 5.3.1. Sistema Etanol – Tolueno

O efeito da vazão de operação sobre as curvas de ruptura foi observado, mantendo-se os valores da concentração de entrada de etanol na solução e a altura do leito fixo constantes e variando-se os valores da vazão de operação. A influência da vazão de operação para o sistema etanol – tolueno é melhor observada na figura 5.13 (a).

Nota-se que os experimentos realizados com valores de operação baixos,  $2,5\text{ cm}^3/\text{s}$ , apresentam uma maior tempo de ruptura, quando comparado com os experimentos realizados com uma vazão de operação de  $7,2\text{ cm}^3/\text{s}$  e  $11,9\text{ cm}^3/\text{s}$ .

As curvas que apresentam as diferenças de temperatura entre o sensor superior e o sensor inferior mostram uma pequena variação, entre  $1,5^\circ\text{C}$  a  $3,5^\circ\text{C}$

em relação à temperatura ambiente, de forma que a adsorção do etanol na presença do tolueno pode ser considerada isotérmica.

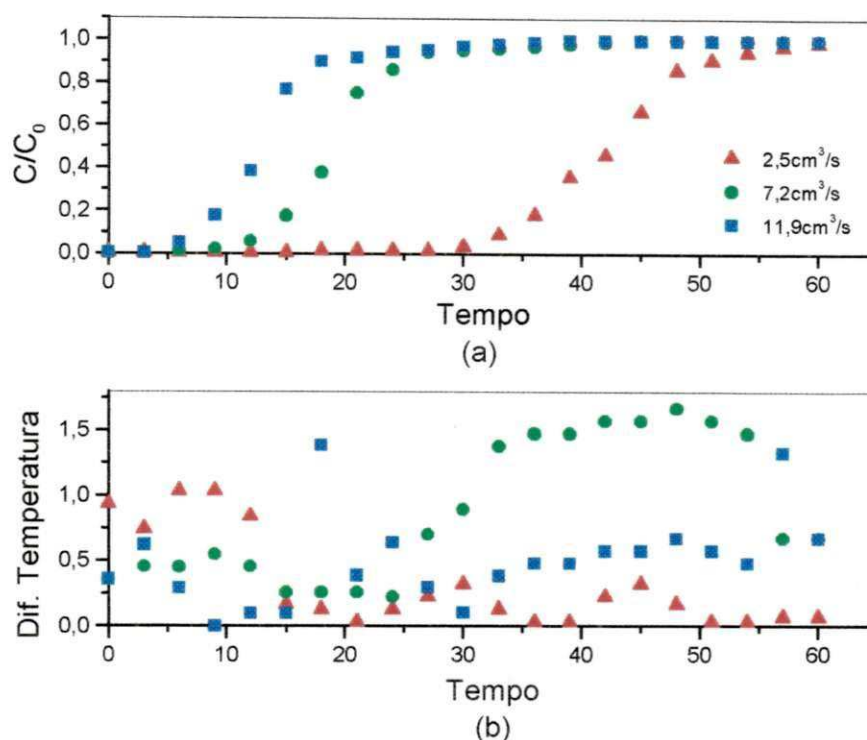


Figura 5.13. (a) Influência da vazão de operação para o sistema etanol-tolueno com uma concentração inicial de etanol de 7,5% e altura de leito fixo de 15cm. (b). Efeitos Térmicos.

### 5.3.2. Sistema Metanol – Etanol

A figura 5.14 (a) mostra a influência da vazão de operação para a adsorção do metanol e etanol para três valores distintos de vazão. Estas foram obtidas pelo procedimento descrito anteriormente na seção 5.3.1 para adsorção do etanol.

Observa-se que as curvas de ruptura são praticamente equivalentes para a co-adsorção, não apresentando, aparentemente, qualquer influência da vazão de operação sobre o sistema experimental.

Quanto à variação de temperatura observada pelo comportamento das curvas localizadas abaixo das curvas de ruptura, nota-se que mais uma vez, que o sistema apresenta um comportamento não isotérmico com variações de  $12,0^\circ\text{C}$



na maioria e  $16,0^{\circ}\text{C}$  para os experimentos realizados com uma vazão e operação de  $2,5\text{cm}^3/\text{s}$ , altura de leito fixo de  $15,0\text{cm}$ , vistos na figura 5.14 (b).

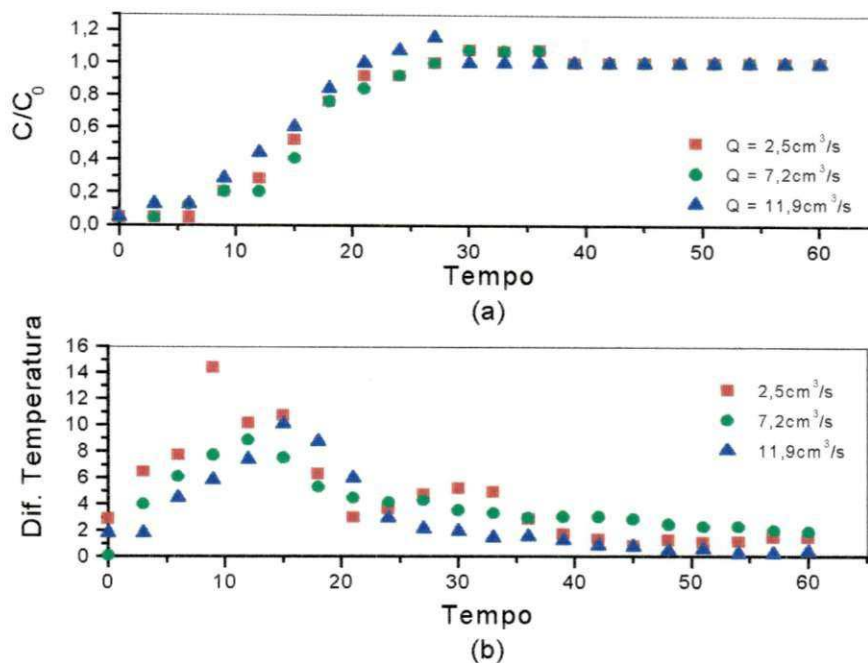


Figura 5.14. (a) Influência da vazão de operação para o sistema metanol-etanol com uma concentração inicial de metanol de  $4,0\%$  e altura de leito fixo de  $15\text{cm}$ . (b). Efeitos Térmicos.

## 5.4. Influência da Altura do Leito Fixo sobre as curvas de Ruptura e Efeitos Térmicos

### 5.4.1. Sistema Etanol – Tolueno

A influência da altura do leito fixo está apresentado na figura 5.15 (a), em que se tem uma concentração inicial de etanol em torno de  $7,5\%$  e uma vazão de operação de  $7,2\text{cm}^3/\text{s}$ , utilizando tolueno como inerte. Estas foram obtidas, mantendo-se a concentração inicial de etanol na solução e a vazão de operação constantes, variando-se apenas os valores da altura do leito.

Nota-se que a zona de adsorção diminui à medida que a altura do leito fixo diminui de  $23,4\text{ cm}$  para  $6,6\text{ cm}$ .

Pelos valores de temperatura registrados com os sensores superior e inferior da coluna de leito fixo, figura 5.15 (b), observa-se que as diferenças entre ambos não são muito grande, chegando à 2,0°C quando se tem vazões de operação de 7,2 cm<sup>3</sup>/s, de forma que, como foi dito anteriormente, a dinâmica de adsorção do etanol pode ser considerada isotérmica.

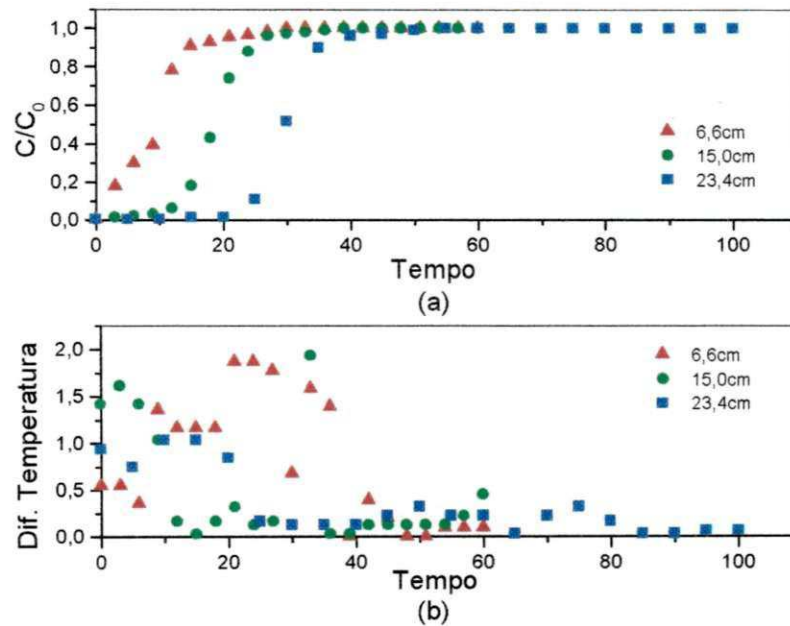


Figura 5.15. (a) Influência da altura do leito fixo para o sistema etanol-tolueno com uma concentração inicial de etanol de 7,5% e vazão de operação de 7.2cm<sup>3</sup>/s. (b). Efeitos Térmicos.

### 5.4.2. Sistema Metanol – Etanol

A influência da altura do leito fixo para a co-adsorção do metanol e etanol está ilustrada na figura 5.16 (a). Estas foram obtidas mediante o mesmo procedimento descrito na seção 5.4.1 para adsorção do etanol. As variações de temperatura observadas também estão apresentadas nos gráficos abaixo das curvas de ruptura.

Pelo comportamento apresentado pelas figuras, observa-se que as curvas de ruptura são praticamente equivalentes, independente dos valores da concentração inicial de metanol e da vazão de operação empregados.

Com relação às diferenças de temperatura registradas pelos sensores superior e inferior da coluna, figura 5,16 (b), observa-se que estas variam bastante, chegando em torno de  $10,0^{\circ}\text{C}$  quando se tem valores de concentração inicial de metanol de  $4,0\%$  e vazão de operação de  $7,2\text{cm}^3/\text{s}$ .

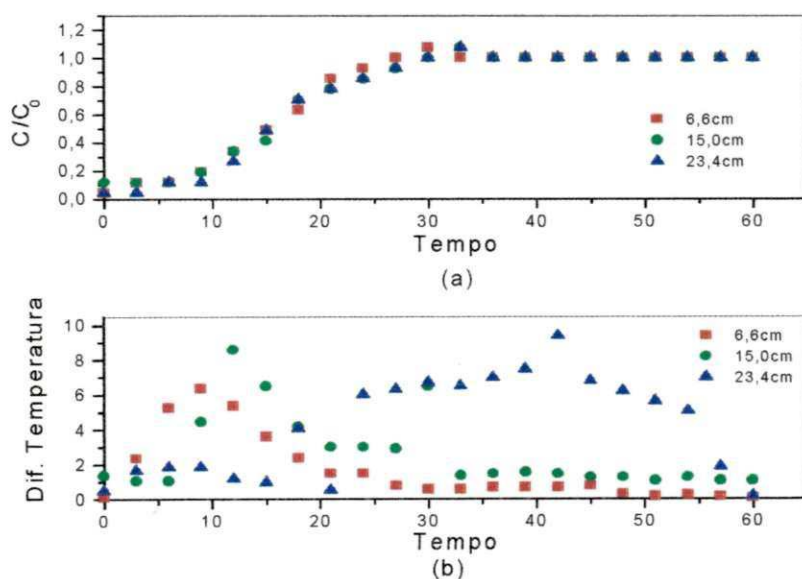


Figura 5.16. (a) Influência da altura do leito fixo para o sistema metanol-etanol com uma concentração inicial de metanol de  $4,0\%$  e vazão de operação de  $7,2\text{cm}^3/\text{s}$ . (b). Efeitos Térmicos

## 5.5. Modelagem dos dados experimentais

### 5.5.1. Sistema Etanol-Tolueno

Foi realizada a modelagem dos dados experimentais para o estudo da adsorção do etanol. O modelo matemático utilizado foi o "modelo de Thomas", devido às considerações já relatadas na seção 4.3.5.

A tabela 5.1 apresenta os valores da concentração de entrada da solução, os valores da vazão de operação empregada e os valores da altura do leito fixo utilizada no sistema experimental juntamente com os valores do coeficiente efetivo de transferência de massa,  $k$ , calculado pela relação de Glueckauf mostrada na equação (2.24), considerando apenas o valor da resistência no filme externo, e os valores do  $k^*$  utilizado no modelo experimental. A mesma tabela apresenta também os valores de  $q_0$ , calculados pela equação de Langmuir, equação (2.2), segundo Ruthven (1984), e os valores de  $q_0^*$  calculados através da área sob as curvas de ruptura para o sistema etanol-tolueno, equação (2.10).

O valor do coeficiente efetivo de transferência de massa utilizado na modelagem dos dados experimentais  $k^*$  foi encontrado pelo método das tentativas, com o auxílio do Software MATHEMATICA, versão 3.0. Este método consistia em acrescentar ao valor de  $k$ , calculado pela relação de Glueckauf, referente à força impulsora linear, um incremento, até encontrar um valor que torne mínimos os desvios entre os valores de  $C/C_0$  experimentais e os calculados pelo modelo, através das equações abaixo:

$$\frac{c}{c_0} = \frac{J(\beta\xi, \tau)}{J(\beta\xi, \tau) + [1 - J(\xi, \beta\tau)] \exp[(\beta - 1)(\tau - \xi)]} \quad (2.21)$$

$$J(\alpha, \beta) = 1 - \int_0^\alpha \exp(-\beta - \alpha) I_0(2\sqrt{\beta\xi}) d\xi \quad (2.22)$$

**Tabela 5.1.** Valores de k para a modelagem dos dados experimentais e os valores da Capacidade de Adsorção ( $q_0$ )

$C_0$ %	Q $\text{cm}^3/\text{s}$	H cm	K	k	$k^*$	$\beta$	$q_0$	$q_0^*$
5,24	4,4	20	0,337	0,48	4,26	0,046	12,37	12,13
5,31	4,4	10	0,329	0,49	4,26	0,046	12,38	8,38
5,37	10	20	0,322	0,67	6,68	0,046	12,38	13,07
5,88	10	10	0,270	0,73	6,68	0,042	12,43	6,42
10,70	4,4	20	0,085	1,91	4,26	0,0246	12,66	13,02
10,14	4,4	10	0,094	1,73	4,26	0,0238	12,67	8,38
9,83	10	10	0,100	2,36	6,68	0,025	12,65	18,92
9,79	10	20	0,101	2,36	6,68	0,025	12,65	13,45
7,44	7,2	15	0,172	1,09	5,56	0,033	12,55	13,11
7,58	7,2	15	0,166	1,14	5,56	0,033	12,55	12,90
7,52	7,2	15	0,168	1,12	5,56	0,033	12,55	12,69
3,37	7,2	15	0,775	0,25	5,56	0,0708	12,06	12,08
11,86	7,2	15	0,069	2,73	5,56	0,0215	12,70	13,58
7,44	2,5	15	0,172	0,79	3,64	0,033	12,55	12,49
7,58	11,9	15	0,166	1,61	7,3	0,033	12,55	12,11
7,52	7,2	6,6	0,168	1,17	5,56	0,033	12,55	14,55
7,46	7,2	23,4	0,172	1,10	5,56	0,033	12,55	12,15

k = valor calculado pela relação de Glueckauf

$k^*$  = valor de k experimental utilizado no modelo de Thomas

$q_0$  = valor calculado pela equação de Langmuir

$q_0^*$  = valor de q calculado pela área sobre a curva de ruptura,

O anexo F, página 114, mostra os valores calculados para o primeiro termo do segundo membro da equação (2.24), o qual corresponde à resistência ao filme externo. Os demais termos da equação de Glueckauf, correspondentes às resistências no macroporo e no microporo, foram desprezados uma vez que de acordo com Pereira (1998) em seu trabalho para a adsorção do metanol em leito fixo de zeólitas 4A, a etapa controladora do sistema experimental em questão é a resistência ao filme externo.

Pode-se notar pelos dados apresentados na tabela 5 que os valores de  $k^*$ , utilizados na modelagem dos dados experimentais diferem bastante dos valores calculados pela equação (equação 2.24). Este fato não é inesperado, já que o  $k$  da equação de Glueckauf é utilizado para força impulsora linear, enquanto que o "modelo de Thomas" corresponde à força impulsora cinética, baseado numa reação de "pseudo-Segunda ordem".

Os valores da capacidade de adsorção,  $q_0^*$ , apresentam uma boa aproximação com os valores calculados pela equação de Langmuir (equação 2.2), com parâmetros obtidos por Almeida (1997) utilizando dados de equilíbrio estático, com exceção dos valores obtidos com alturas de leito fixo de 10 cm, independente da vazão de operação e concentração da solução. Este afastamento deve-se provavelmente a que, para colunas curtas, os perfis não são desenvolvidos totalmente, encontrando-se bem longe de uma situação de "padrão constante".

As curvas de ruptura dos dados experimentais, bem como as curvas de ruptura para o "modelo de Thomas", estão mostradas nas figuras 5.17, 5.18, 5.19, 5.20, para os sistemas que possuem uma concentração inicial de etanol e altura do leito fixo constantes, comparando-se duas vazões de operação:  $4,4\text{cm}^3/\text{s}$  e  $10,0\text{cm}^3/\text{s}$ .

Observa-se, pelo comportamento das curvas de ruptura obtidas, que quando se tem uma concentração de entrada de etanol na solução em torno de 5,0%, figuras 5.17 e 5.18, os dados do Modelo de Thomas se ajustam melhor para os experimentos realizados a uma altura de leito fixo de 20,0 cm.

Este mesmo comportamento também é observado para os experimentos realizados com uma concentração de entrada de etanol em torno de 10,0%, figuras 5.19 e 5.20.

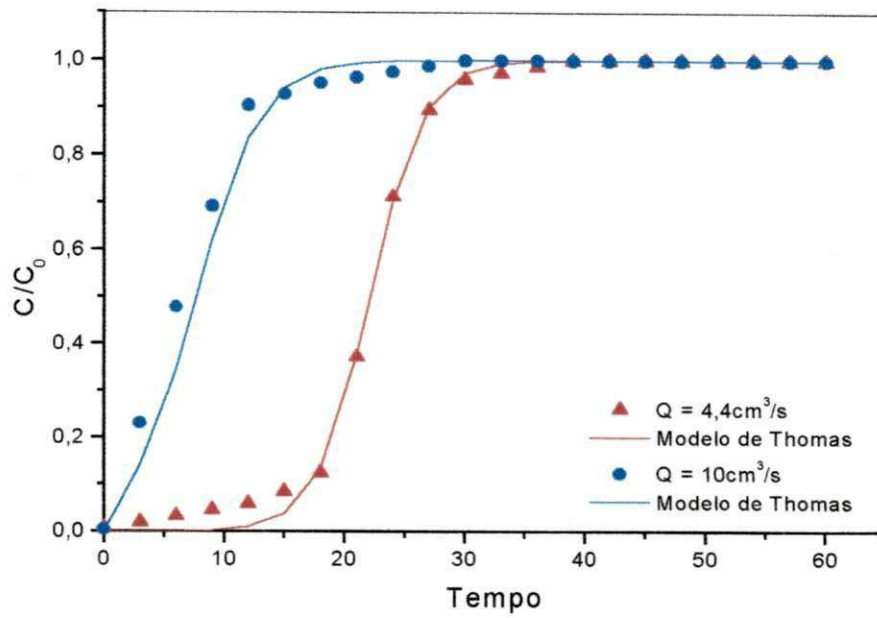


Figura 5.17. Modelagem dos dados experimentais para uma concentração inicial de 5% de etanol e altura do leito fixo de 10 cm.

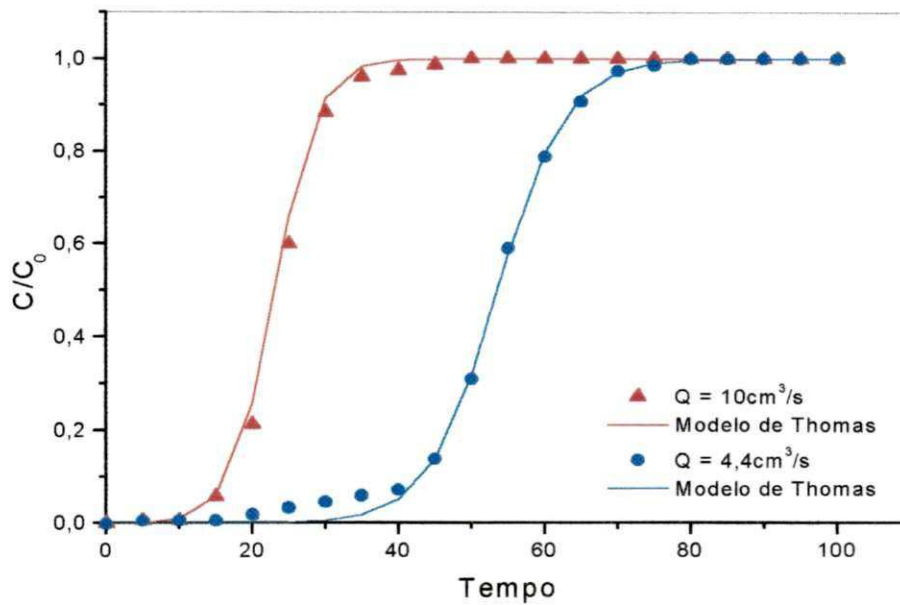


Figura 5.18. Modelagem dos dados experimentais para uma concentração inicial de 5% de etanol e altura do leito fixo de 20 cm.

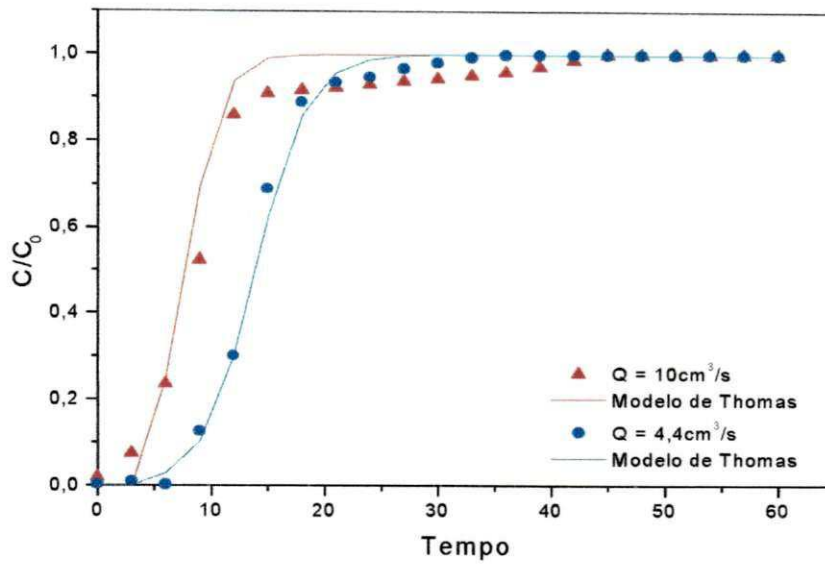


Figura 5.19 Modelagem dos dados experimentais para uma concentração inicial de 10% de etanol e altura do leito fixo de 10 cm.

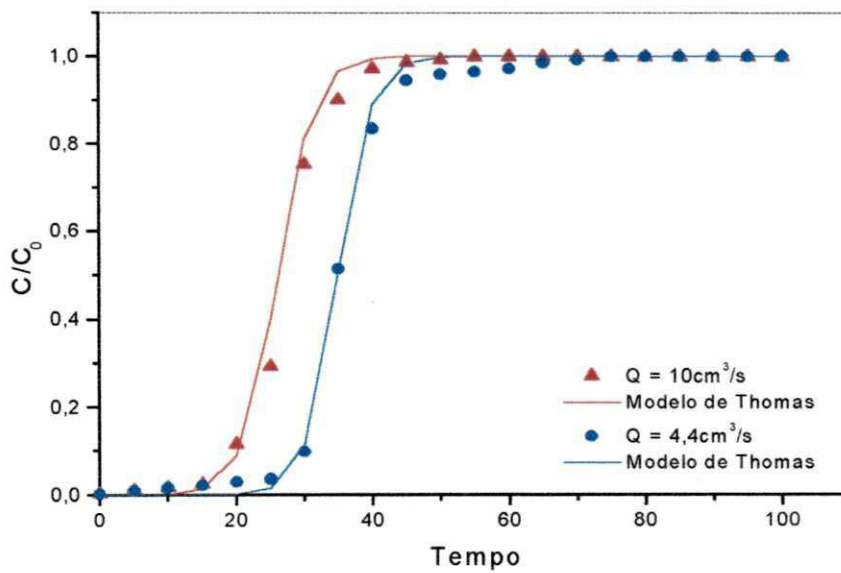


Figura 5.20. Modelagem dos dados experimentais para uma concentração inicial de 10% de etanol e altura do leito fixo de 20 cm.



As curvas de ruptura apresentadas na figura 5.21 apresentam as modelagens realizadas pelo "modelo de Thomas", quando se tem valores variáveis de concentração inicial de etanol e valores fixos de vazão de operação e altura do leito fixo, obtidas pelo mesmo procedimento experimental descrito anteriormente na seção 5.2.1. Pode-se notar que ambas as curvas se ajustam bem ao "modelo de Thomas" para as diversas variações de concentração inicial de etanol.

A figura 5.22 ilustra a modelagem dos dados experimentais pelo "modelo de Thomas" quando se tem valores variáveis de vazão de operação e valores fixos de concentração inicial de etanol na solução e altura de leito fixo, 7,5% e 15,0 cm, respectivamente. Pode-se notar pelo comportamento das curvas que os dados do "modelo de Thomas" se ajustam melhor para valores de vazão de operação menores, 2,5 cm<sup>3</sup>/s.

A figura 5.23 mostra os dados experimentais e os ajustes do "modelo de Thomas" obtidos para valores variáveis de altura de leito fixo e valores de concentração inicial de etanol na solução, 7,5% e valores de vazão de operação, 7,2 cm<sup>3</sup>/s, constantes. Pode-se observar pelo comportamento das curvas de ruptura que os dados do "modelo de Thomas" se ajustam melhor para valores de altura de leito fixo acima de 15 cm.

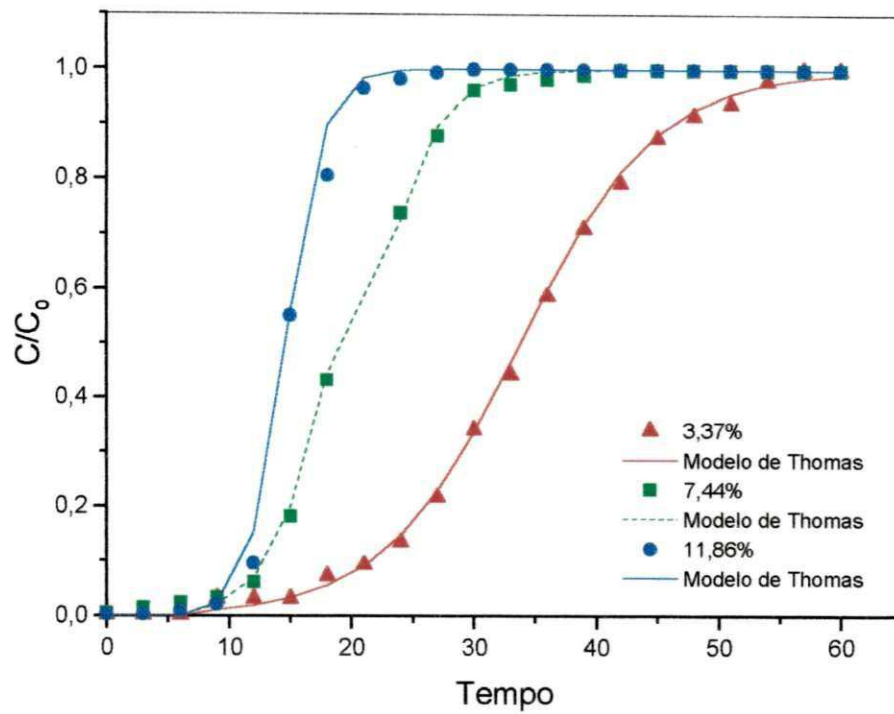


Figura 5.21. Modelagem dos dados experimentais para uma vazão de operação de  $7,2 \text{ cm}^3/\text{s}$  e altura do leito fixo de 15 cm.

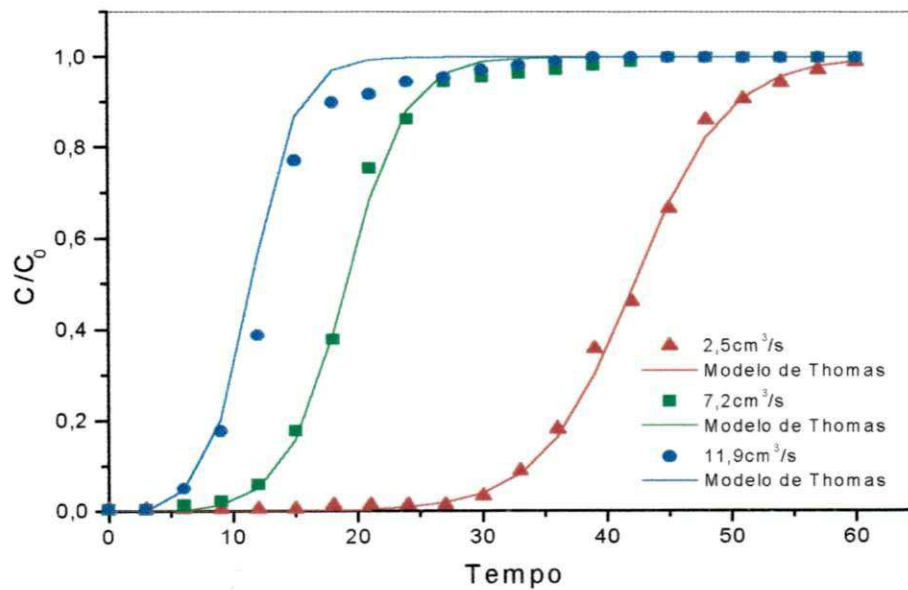


Figura 5.22. Modelagem dos dados experimentais para uma concentração inicial de 7,5 % de etanol e altura do leito fixo de 15cm

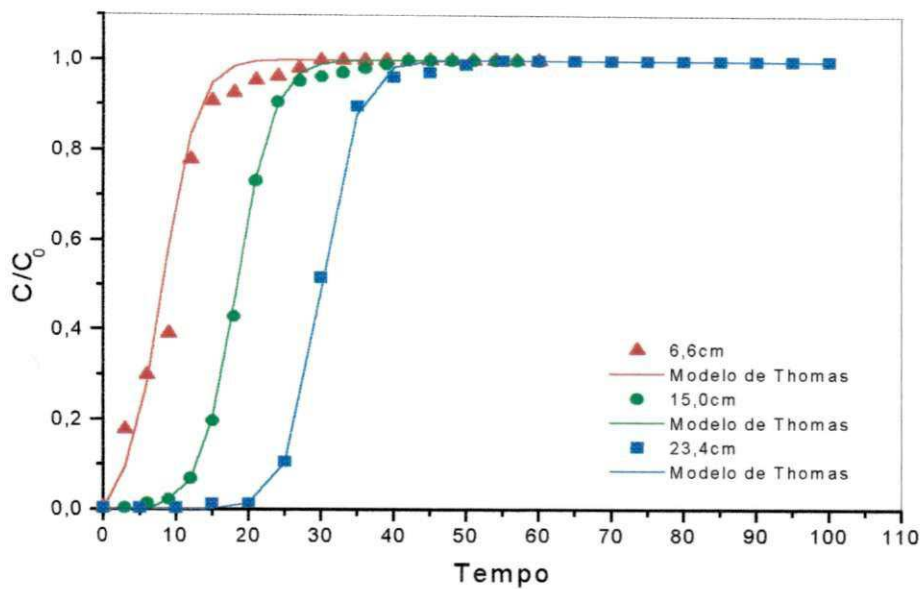


Figura 5.23. Modelagem dos dados experimentais para uma concentração inicial de 7,5 % de etanol e vazão de operação de 7,2 cm<sup>3</sup>/s

Do exposto acima, conclui-se que, em geral, o “modelo de Thomas” utilizado descreve corretamente a dinâmica da coluna de leito fixo. Os desvios encontrados podem ser atribuídos às hipóteses simplificatórias do modelo. Entre outras, o fato de se considerar a dispersão axial desprezível. Como se observa na tabela 5.1, o valor da constante global ( $k^*$ ) depende apenas da vazão de operação, sugerindo forte influência da resistência no filme.

### 5.5.2. Sistema Metanol/etanol

A modelagem em leito fixo para sistemas multicomponentes é bastante complexa, principalmente quando este se comporta de forma não isotérmica e mais de um componente é adsorvido durante o processo, como é o caso da co-adsorção do metanol e do etanol em um leito fixo de zeólitas 4A.

Desta forma, a modelagem dos dados experimentais foi realizada apenas para o sistema etanol/tolueno devido a este se comportar de forma isotérmica, como mostrado na seção 5.2.2 e apenas um único componente, o etanol, ser adsorvido no leito de zeólitas 4A no procedimento experimental.

Para o sistema metanol/etanol obteve-se, através das curvas de ruptura, como mostrado na seção 2.9.1.2, os valores da capacidade de adsorção para o metanol e para o etanol, mostrados na tabela 5.2. Esta também mostra os valores da concentração de metanol no sistema, valores da vazão de operação empregada e os valores da altura do leito fixo.

Os valores da capacidade de adsorção para o metanol e etanol foram menores que os valores obtidos por Almeida (1997), e Becila (1981), onde estavam na faixa de 11,0% para o metanol e de 5,0% para o etanol. Deve-se notar que estes autores, diferentemente do presente trabalho, utilizaram soluções ternárias, com tolueno e benzeno como solvente inerte, respectivamente, e concentrações iguais em peso de metanol e etanol.

Por outro lado, Altidis et alii, 2000, encontrou, pelo método estático, valores de adsorção no equilíbrio de metanol comparáveis aos encontrados neste trabalho; 5,0%, 4,2% e 2,3% para as temperaturas de 13°C, 26°C e 32°C respectivamente, utilizando concentrações de 3,0% de metanol na fase líquida.

**Tabela 5.2.** Valores da Capacidade de Adsorção do Metanol e Etanol na Co-adsorção

$C_A$ %	$Q$ cm <sup>3</sup> /s	$h$ cm	$q_{\text{metanol}}$ (g/100g)	$q_{\text{etanol}}$ (g/100g)
3,27	4,4	20	5,45	0,81
2,96	10	10	5,38	0,73
2,96	10	20	5,43	0,89
3,27	4,4	10	4,34	0,92
5,44	4,4	10	5,82	0,94
4,82	10	10	5,13	1,00
5,13	4,4	20	5,35	0,91
4,82	10	20	5,64	0,92
4,20	7,2	15	5,78	0,98
3,89	7,2	15	5,16	0,94
4,20	7,2	15	5,38	0,96
3,89	11,9	15	6,43	0,98
3,89	2,5	15	3,92	1,15
4,20	7,2	23,4	3,81	0,86
4,20	7,2	6,6	7,83	1,11
2,35	7,2	15	5,10	0,81
5,74	7,5	15	5,80	0,78

## 5.6. Análise das Superfícies de Resposta

### 5.6.1. Sistema Etanol-Tolueno

Foi necessário fixar o tempo para a verificação apenas dos efeitos das variáveis estudadas  $C_0$ ,  $H$  e  $Q$  sobre a dinâmica de adsorção ( $C/C_0$ ). Pelas curvas de ruptura, obtidas nos experimentos, escolheu-se o tempo de 15 segundos e 30 segundos. Poderia ter sido escolhido outros tempos, não afetando o estudo pretendido.

A tabela 5.3 apresenta os efeitos globais médios, os efeitos principais e os efeitos de interação de 2ª ordem. Os parâmetros em asteriscos são os estatisticamente significativos. Observando-se a tabela 5.3, verifica-se que os valores dos efeitos principais, tanto para o tempo fixo em 15 segundos como 30 segundos, praticamente apresentam o mesmo perfil, ou seja, as variáveis estudadas que mais influência exercem sobre a dinâmica de adsorção do etanol em ordem decrescente são:  $H$ ,  $Q$  e  $C_0$ . Nota-se que a variável  $H$ , que apresenta o maior efeito sobre a dinâmica de adsorção estudada, exerce influência negativa, com o aumento do nível de -1 (10,0cm) para o nível +1 (20,0cm), verifica-se também um decréscimo na razão  $C/C_0$  de 0,279 e 0,255 para os tempos fixos de 15 segundos e 30 segundos respectivamente. As outras duas variáveis  $Q$  e  $C_0$  exercem influência positiva, ou seja, com o aumento do nível -1 para +1 ocorre aumento na razão  $C/C_0$ . O único parâmetro dos efeitos principais que não apresenta significância estatística é a concentração de etanol ( $C_0$ ) no tempo de 30s.

**Tabela 5.3.** Variáveis do Planejamento Fatorial mais Configuração Estrela na Dinâmica de Adsorção

Efeitos	$C/C_0$ (15 s)	$C/C_0$ (30 s)
Global médio	0,184*	0,959*
Principais		
$C_0$	0,125*	0,090
$H$	- 0,279*	-0,255*
$Q$	0,122*	0,181*
2ª ordem		
$C_0^2$	0,054	- 0,079
$H^2$	0,119*	- 0,133*
$Q^2$	- 0,015	- 0,057
$C_0H$	- 0,041	0,025
$C_0Q$	- 0,051	- 0,023
$HQ$	- 0,093	- 0,216*

A tabela 5.4 apresenta os resultados da análise de variância para  $C/C_0$  nos tempos de 15 e 30 segundos. Observando os dados da tabela 5.4 para o tempo de 15 s, verifica-se que o % de variância explicada é de 91,37 e o coeficiente de correlação de 0,96, valores estatisticamente bons. Com relação ao teste F que é utilizado para investigar se o modelo explica uma quantidade significativa de variação nos valores experimentais (Barros Neto et al, 1995), observa-se que o valor calculado é de 2,3 vezes o valor tabelado, a nível de 95% de confiança, validando o modelo. Comparando-se o valor de F, calculado pela regressão dos dados experimentais com o valor tabelado, encontraram-se valores de F calculado acima do F tabelado. A regressão portanto é útil para fins preditivos, validando estatisticamente o modelo ajustado.

Observa-se para o tempo de 30 s, na tabela 5.4, o mesmo perfil verificado para o tempo de 15 s, onde % de variância explicada é de 91,5 e o coeficiente de correlação de 0,96. O valor do teste F calculado aproxima-se de 2,3 vezes do valor do F tabelado, também validando o modelo empírico encontrado.

Verifica-se que os dois modelos quadráticos (tempos de 15s e 30s) são estatisticamente validados; os mesmos foram utilizado para gerar as superfícies de resposta.

**Tabela 5.4.** Análise da variância (ANOVA) para  $C/C_0$

ANOVA	15 s	30 s
% variância explicada	91,37	91,5
Coeficiente de correlação	0,96	0,96
Teste F calculado	8,3	8,44
F tabelado para 95% de confiança	3,68	3,68
F calculado/F tabelado	2,3	2,29

As superfícies de resposta foram construídas para todas as combinações possíveis de variação de duas variáveis, mantendo a outra fixada no ponto central (0).

Não é objetivo deste trabalho encontrar faixas ótimas de operação, mas sim a quantificação dos efeitos das três variáveis de entrada estudadas. Fica facilitado o

entendimento destes efeitos sobre a dinâmica de adsorção, quando se analisam as superfícies de resposta.

As figuras 5.24, 5.26 e 5.28 para o tempo fixo de 15 s, mostram que para valores baixos de H (abaixo de 10 cm), valores de vazão (Q) e concentração ( $C_0$ ) intermediários, têm-se valores da razão  $C/C_0$  mais altos (adsorção mais rápida). Observando-se a figura 5.25, 5.27 e 5.29 para o tempo fixo em 30 s, verifica-se um perfil semelhante ao observado para o tempo de 15 s, ou seja, valores baixos de H, valores intermediários de Q, diferenciando apenas quanto ao valor de C, não apresenta influência na razão  $C/C_0$ , quando os valores de H e Q são baixos e intermediários. Verificando as superfícies, confirmou-se que a variável H apresenta a maior influência sobre a dinâmica estudada. Para valores baixos de H, a adsorção é mais rápida, o que é bastante coerente, pois se tem menos zeólitas (adsorvente); a tendência é de ocorrer mais rapidamente a saturação (valores de  $C/C_0$  próximo da unidade).



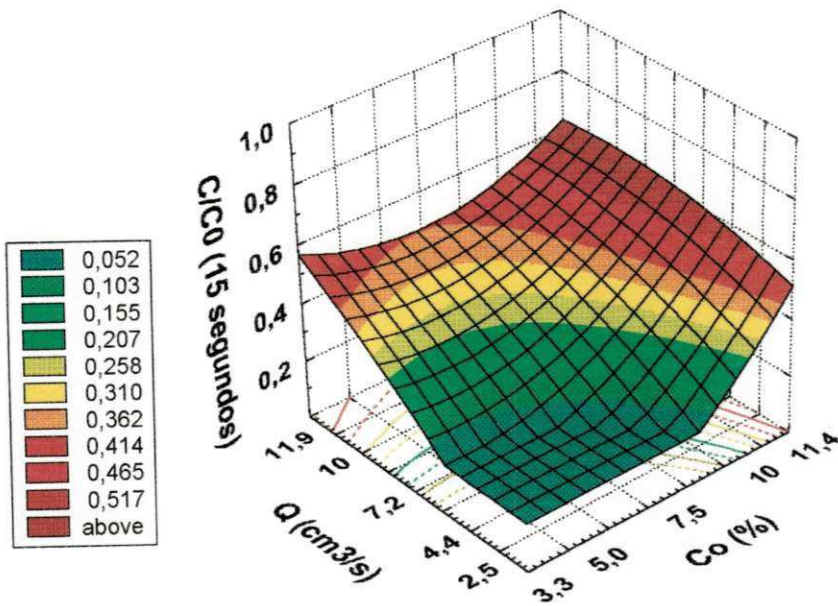


Figura 5.24. Efeito da concentração de entrada e da vazão de operação sobre o valor de  $C/C_0$  em 15 segundos.

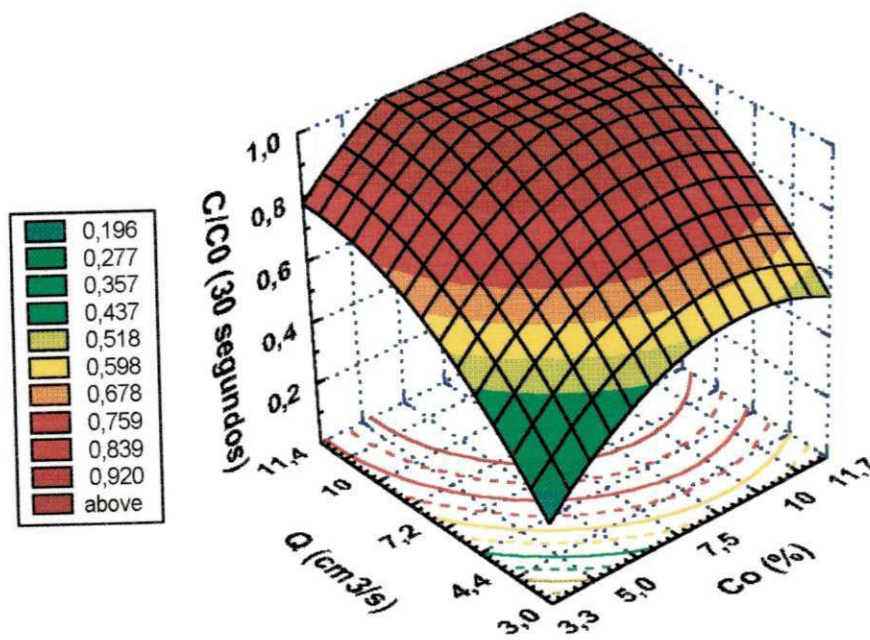


Figura 5.25. Efeito da concentração de entrada e da vazão de operação sobre o valor de  $C/C_0$  em 30 segundos.

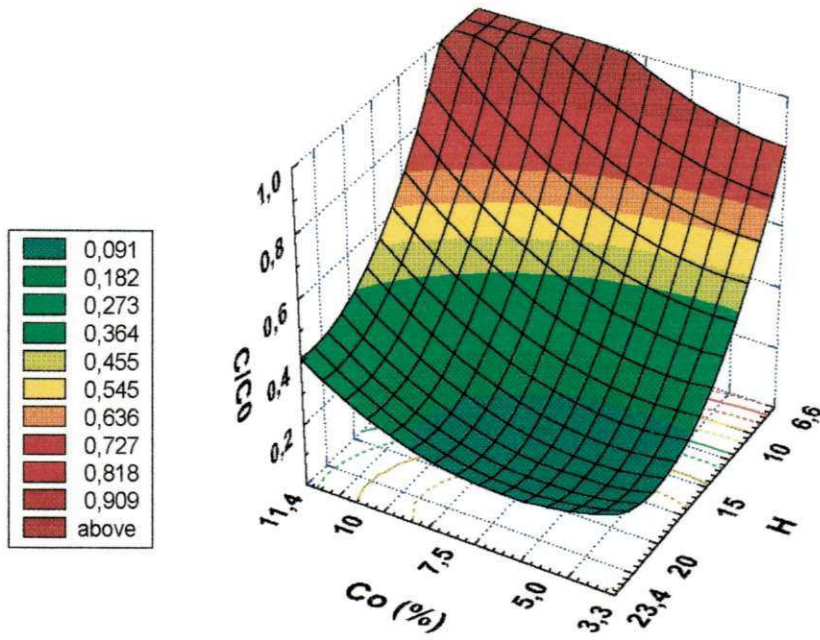


Figura 5.26. Efeito da concentração de entrada e da altura do leito fixo sobre o valor de  $C/C_0$  em 15 segundos.

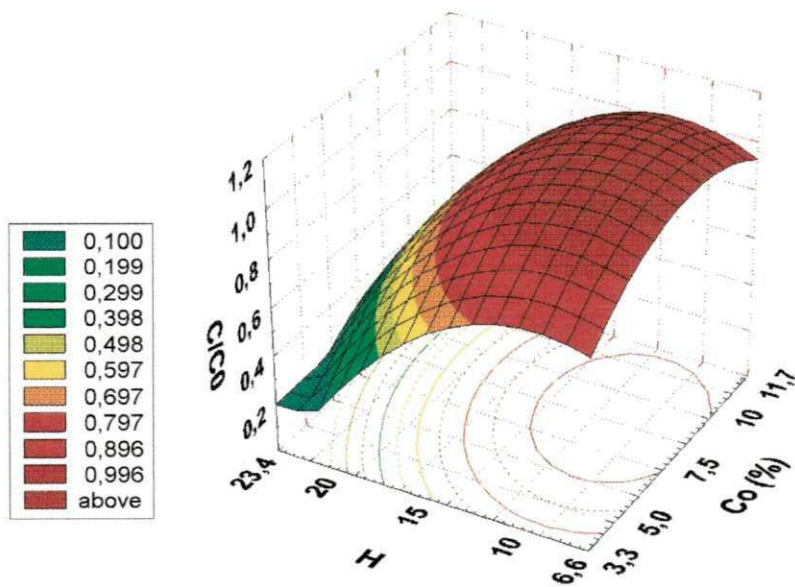


Figura 5.27. Efeito da concentração de entrada e da altura do leito fixo sobre o valor de  $C/C_0$  em 30 segundos.

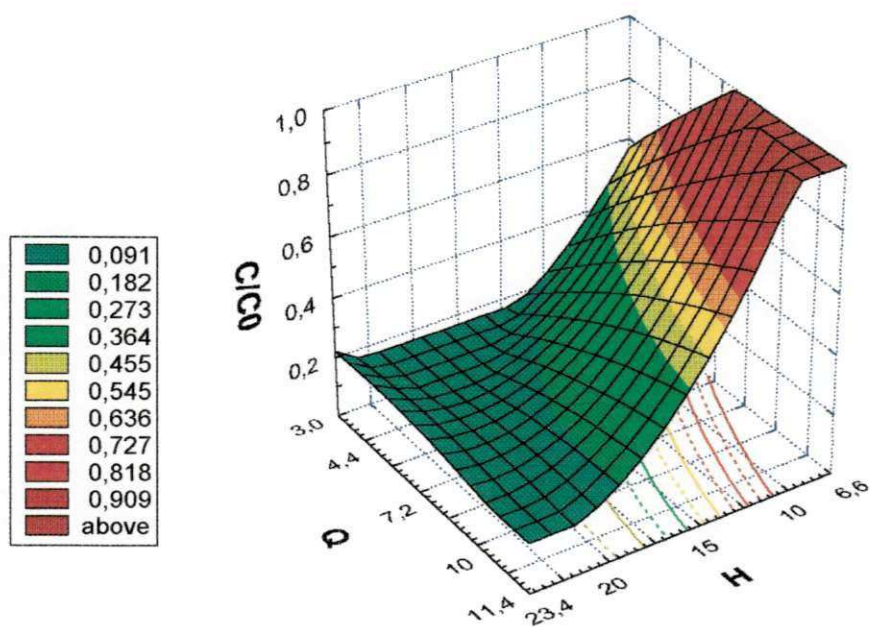


Figura 5.28. Efeito da vazão de operação e da altura do leito fixo sobre o valor de  $C/C_0$  em 15 segundos.

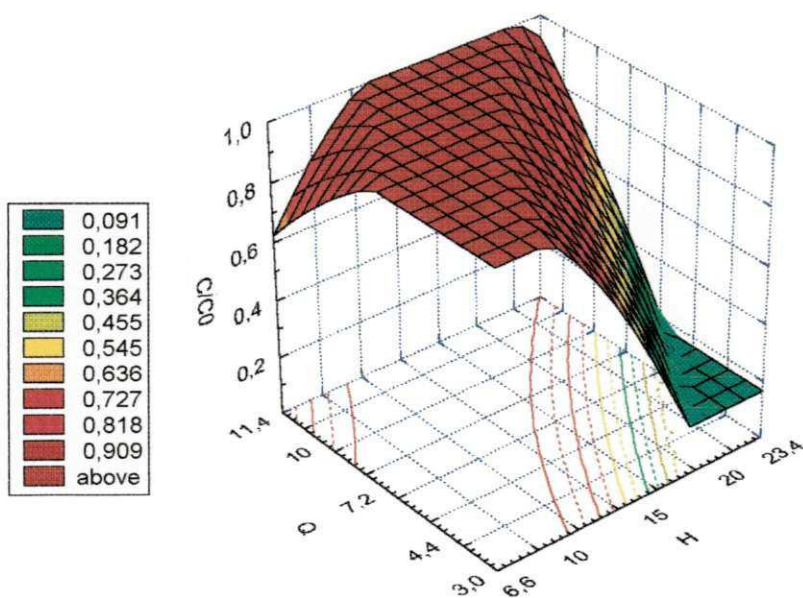


Figura 5.29. Efeito da vazão de operação e da altura do leito fixo sobre o valor de  $C/C_0$  em 30 segundos.

### 5.6.2. Sistema Metanol/Etanol

Devido ao modelo fenomenológico ser complexo nestes casos, é possível tratar os dados experimentais visando um modelo empírico que, apesar de limitado às condições operacionais para as quais foi obtido e incapaz de fornecer informações acerca dos mecanismos envolvidos, seja de utilidade com propósitos preditivos. Com esse intuito, foi utilizado o método das superfícies de resposta.

Dado que o interesse é obter um efluente com um baixo teor de metanol, uma vez que os valores permitidos por lei são inferiores a 0,3% de metanol, foi escolhida como variável de resposta o valor da concentração média ( $C_{\text{médio}}$ ) na solução efluente para um dado tempo de operação, calculado pela equação (5.1).

O valor do  $C_{\text{médio}}$  foi obtido através da seguinte equação:

$$C_{\text{médio}} = \frac{1}{t} \int_0^t C dt \quad (5.1)$$

Inicialmente procurou-se encontrar o tempo mais adequado para fixá-lo no estudo posterior de busca das faixas operacionais ótimas das três variáveis de entrada ( $C_0$ , H e Q). Observando-se a figura 5.2, que apresenta as três curvas de ruptura com valores das variáveis no ponto central (0), verifica-se que para tempos acima de 30 segundos o leite já está saturado. Desta maneira, fixou-se tempos abaixo de 30 segundos para este estudo preliminar. Os valores de ( $C_{\text{médio}}$ ) que apresentaram um menor valor de metanol no efluente para um maior tempo de corrida experimental foram observados para o tempo de 9 segundos. Assim este tempo foi o escolhido para o estudo da verificação de faixas ótimas das variáveis de entrada sobre o valor de  $C_{\text{médio}}$ .

Através do Software STATISTICA, versão 5.0 foram obtidos os valores da análise da variância, tabela 5.5, para o ajuste do modelo quadrático.

**Tabela 5.5.** Análise da variância (ANOVA) para  $C_{\text{médio}}$  em 9 segundos

% variância explicada	86,12
Coefficiente de correlação	0,93
Teste F calculado	4,90
F tabelado para 95% de confiança	3,68
F calculado/F tabelado	1,33

O modelo matemático codificado de 2ª ordem está representado na equação 5.2.

$$C_{\text{médio}} (9 \text{ s}) = \mathbf{0,48} + \mathbf{0,40}C_0 - 0,11H + 0,10Q + \mathbf{0,20}C_0^2 + 0,012H^2 + 0,062Q^2 - 0,09C_0H + 0,05C_0Q + 0,013HQ \quad (5.2)$$

onde os valores em negrito são os parâmetros estatisticamente significativos.

Uma análise de significância estatística dos dados da tabela 5.5 é um fator importante, pois os dados experimentais são usados para produzir o modelo empírico, através de uma regressão. Observando-se a tabela 5.5, pode-se verificar que o % de variância explicada é de apenas 86,12 e a razão do F calculado sobre o F tabelado é de 1,33. Estes valores são baixos, mas o modelo empírico de 2ª ordem encontrado é válido estatisticamente, não sendo um modelo altamente preditivo. O teste F é utilizado para investigar se o modelo explica uma quantidade significativa de variação nos valores experimentais, e deve o valor de F calculado ser maior que o F tabelado para que o modelo seja preditivo, ou seja, validado estatisticamente, o que é o caso dos dados observados na tabela 5.5. Quando o valor de F calculado é mais de 3 vezes o valor do F tabelado, o modelo empírico é considerado altamente preditivo.

Nas figuras 5.30, 5.31 e 5.32 são mostradas as superfícies de resposta construídas a partir do modelo de 2ª ordem.

Através das superfícies de resposta, pode-se observar a influência das variáveis ( $C_0$ , H e Q) sobre a dinâmica da co-adsorção utilizando  $C_{\text{médio}}$  como variável de resposta.

Na figura 5.30 observa-se o efeito da concentração de metanol na entrada ( $C_0$ ) e a altura do leito (H) sobre o valor médio da concentração de metanol efluente para um tempo de 9 segundos ( $C_{\text{médio}}$ ), estando a vazão (Q) fixada no

ponto central ( $7,2 \text{ cm}^3/\text{s}$ ). Verifica-se que a concentração na entrada influencia bastante o valor da resposta, não sendo observado o mesmo para a variável H. Para faixas de concentração de entrada de metanol ( $C_0$ ) abaixo de 4% em peso, encontram-se os menores valores de concentração média de metanol no efluente, conseguindo-se teores inferiores a 0,4%, para qualquer faixa de H.

Observando-se a figura 5.31, onde se verifica os efeitos de  $C_0$  e Q sobre a co-adsorção, mantendo-se a variável H fixada no ponto central (15 cm), nota-se que com o aumento da concentração inicial do afluente ( $C_0$ ), aumenta consideravelmente o valor de  $C_{\text{médio}}$  no efluente. Isto era esperado, pois para uma altura fixa de adsorvente a tendência é ocorrer concentrações menores de metanol no efluente com o abaixamento da concentração inicial da solução afluente. Como se observa na figura, pouco efeito tem a vazão de operação, confirmando os dados encontrados na análise estatística.

A figura 5.32 mostra os efeitos das variáveis H e Q sobre a resposta, fixando o valor de C no nível -1 (3%), o que foi verificado como melhor valor nas análises anteriores de superfícies de resposta. Observa-se que operando-se o equipamento com altura do leito (H) acima de 15 cm e vazão (Q) abaixo de  $7,2 \text{ cm}^3/\text{s}$ , consegue-se valores de  $C_{\text{médio}}$  em torno de 0,3%, valores dentro do permitido pela legislação acerca de bebidas. O valor de metanol no efluente é 10% do valor inicial da concentração do afluente, mostrando que se pode conseguir reduzir a valores de metanol aceitáveis sob faixas de condições de operação bastante longas.

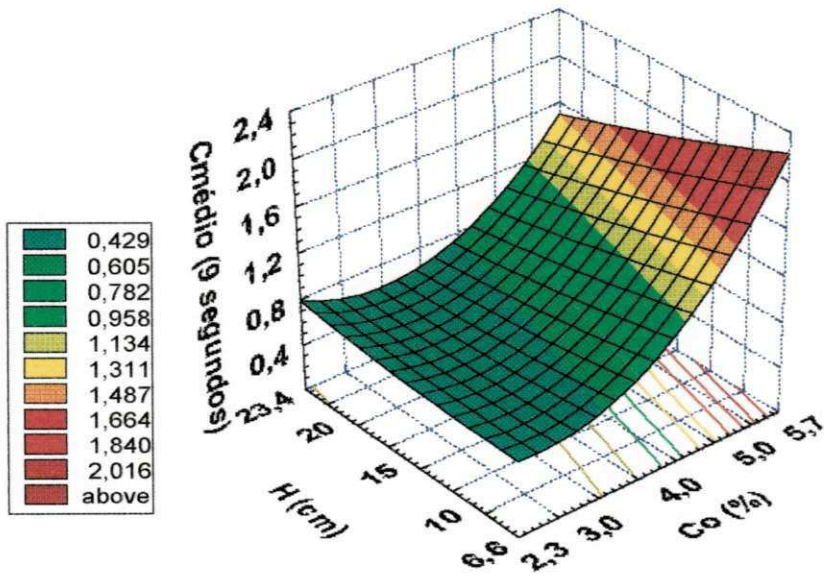


Figura 5.30. Efeito da concentração inicial de metanol e altura do leito fixo sobre o valor de  $C/C_{\text{médio}}$ .

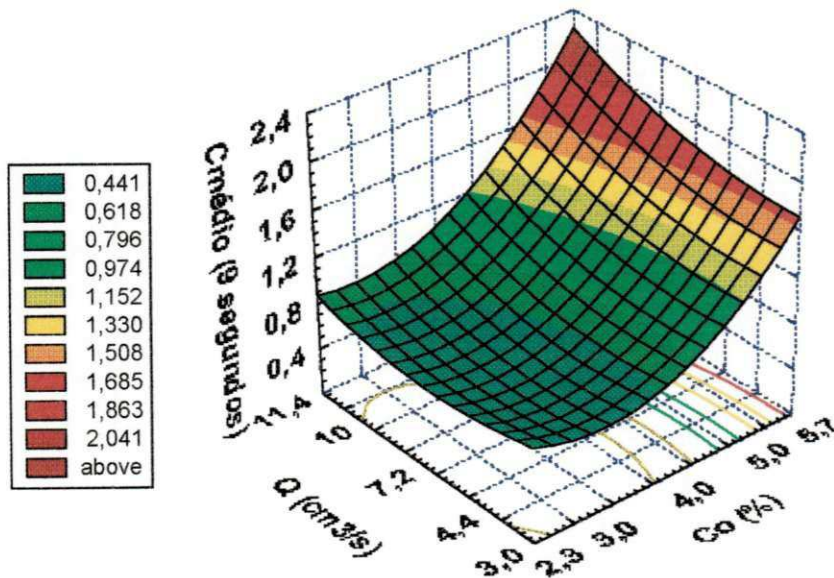


Figura 5.31. Efeito da concentração inicial de metanol e vazão de operação sobre o valor de  $C_{\text{médio}}$

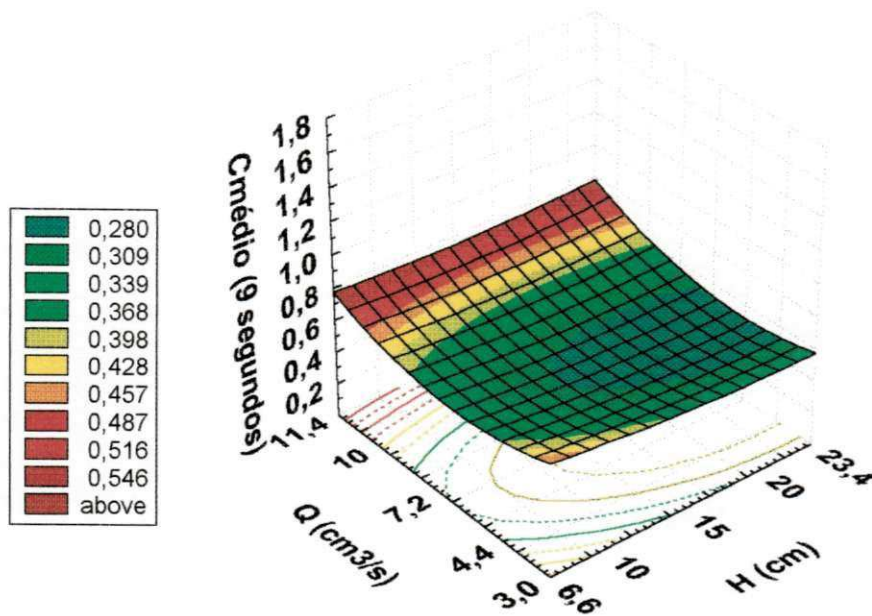


Figura 5.32. Efeito da vazão de operação e da altura do leito fixo sobre o valor de  $C_{\text{médio}}$

Verifica-se que dentro dos limites impostos pelo equipamento experimental utilizado neste trabalho, as faixas ótimas de operação para minimizar a concentração de saída do metanol estão em torno de 3,0% de concentração de metanol na entrada, com valores da altura do leito fixo acima de 15 cm e vazão de operação abaixo de  $7,2 \text{ cm}^3/\text{s}$ .

Observa-se que trabalhar com tempos fixos de 9 segundos é operacionalmente muito difícil, mas quanto à operacionalidade do sistema, pretende-se, em trabalhos futuros, estudar níveis que permitam um processo mais factível, com a mudança de escalas, inclusive do ponto de vista econômico.



## CAPÍTULO VI

### CONCLUSÃO

Os estudos realizados no presente trabalho, relativos à dinâmica de adsorção de etanol e metanol em leito fixo de zeólitas 4A, levaram às seguintes considerações finais e conclusões:

#### **Sistema Etanol-Tolueno**

- ➔ As curvas de ruptura são influenciadas pelas variáveis de entrada; concentração de etanol, vazão de operação e altura do leito, sendo que a altura do leito é a que se mostrou como estatisticamente mais significativa.
- ➔ Como esperado, os  $t_{1/2}$  são maiores quanto menor a vazão de operação e maior a altura do leito. Quanto ao efeito da concentração na entrada, as curvas de ruptura apresentam maior  $t_{1/2}$  nas soluções menos concentradas, que correspondem a um  $\beta$  maior.

#### **Sistema metanol-etanol**

- ➔ As curvas de ruptura não variam muito quando se tem valores de concentração na faixa de 3,0% a 5,0%, para valores de vazão de operação e altura de leito fixo constantes, embora esta possua uma tendência a ser mais rápida para valores de 5% de peso de metanol.
- ➔ Para sistemas que utilizam valores de vazão de operação variáveis e valores de concentração de metanol e altura de leito fixo constantes, observa-se que as

curvas de ruptura praticamente permanecem inalteradas na faixa de vazão de operação estudada.

- ➔ A altura de leito fixo também não produz efeitos significativos sobre as curvas resposta, no caso da co-adsorção de metanol e etanol em soluções com etanol em excesso nas condições do presente trabalho.

### **Efeitos Térmicos**

- ➔ As diferenças de temperatura entre a entrada e a saída da coluna de leito fixo, no sistema etanol-tolueno é na maioria dos casos muito pequena, não ultrapassando 3°C, de modo que o sistema se comporta de forma praticamente isotérmica, nas condições aqui utilizadas, onde a vazão de inerte é suficiente para assegurar a dissipação do calor gerado na adsorção.
- ➔ Este mesmo efeito não é observado para o sistema metanol-etanol, pois o calor gerado na co-adsorção é responsável pela grande variação de temperatura registrada, que pode atingir picos de até 16 °C.

### **Modelagem dos Dados Experimentais:**

- ➔ Os valores de capacidade de adsorção de etanol, obtidos a partir das curvas de ruptura, concordam com os obtidos por Almeida (1997) pelo método estático, salvo nos casos de leito de pequena altura.
- ➔ Na co-adsorção de soluções metanol-etanol, as capacidades de adsorção de metanol e etanol encontradas no presente trabalho, foram menores que as obtidas por Almeida (1997) e por Becila (1981) para um sistema ternário onde o tolueno e o benzeno atuavam como solvente inerte, respectivamente e os dois álcoois encontravam-se em baixas concentrações. **Mas** apresentam valores comparáveis aos obtidos por Altidis, (2000), pelo método estático, com etanol em excesso.
- ➔ Os dados experimentais de adsorção de soluções etanol em tolueno se ajustaram bem ao modelo de Thomas mostrando que as considerações feitas para o modelo fenomenológico são bastante realísticas no caso em estudo.

- ➔ As constantes para a força impulsora cinética, obtidas mediante ajuste dos dados experimentais ao modelo de Thomas, aumentam com o aumento da vazão de operação.
- ➔ No caso da co-adsorção de metanol e etanol a partir de soluções com etanol em excesso, optou-se por um modelo empírico de segunda ordem. A análise estatística dos dados experimentais obtidos mostrou que o modelo é preditivo com fator F calculado igual a 1,33 F tabelado.

### **Conclusão Final**

A análise da superfície de resposta, no caso da co-adsorção, considerando a concentração média de metanol no efluente aos 9 segundos como fator de otimização, mostrou que é possível obter soluções com teor de metanol inferior a 0,3%. As condições de operação correspondentes a essa concentração limite são: concentração de entrada inferior a 3% de metanol, vazão abaixo de  $7,2\text{cm}^3/\text{s}$  e altura do leito superior a 15cm.

Verifica-se que dentro dos limites impostos pelo equipamento experimental, é possível atender às exigências estabelecidas pela legislação brasileira, no que concerne ao teor máximo metanol, em bebidas alcólicas.

## **CAPÍTULO VII**

### **PESPECTIVAS**

Com o objetivo de dar continuidade ao trabalho realizado, sugere-se as seguintes etapas:

- ➔ Estudo de outras faixas de operação para o sistema metanol-etanol, verificando outros valores de concentração de metanol, vazão de operação e altura de leito fixo, bem como a influência da temperatura sobre o sistema experimental.
- ➔ Estudo do sistema ternário etanol-metanol-água.
- ➔ Utilização de modelos fenomenológicos para a co-adsorção não isotérmica de metanol-etanol, validando o modelo com os dados experimentais.
- ➔ Simulação, dimensionamento e otimização de uma coluna de adsorção em leito fixo em escala industrial.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALMEIDA, L. C.. **Estudo do Equilíbrio da Co-Adsorção do Etanol e Metanol em Fase Líquida sobre Zeólita 4A**. Relatório de Iniciação Científica, UFPB, 1997.
- ALSINA, O. L. S.; SILVA, F. L. H.; SANTOS, E. S.. **Estudo do Equilíbrio da Adsorção de Metanol-Tolueno em Zeólitas 4A**. XX Encontro sobre Escoamento em Meios Porosos, DEQ, Universidade Federal de São Carlos, pp. 493 – 501, 1992.
- ALSINA, O. L. S.; SILVA, F. L. H.; MENDES, C. I. **Estudo da Cinética de Adsorção do Metanol-Tolueno em Zeólitas 4A pelo Método do Banho Finito**, XXI Encontro sobre Escoamento em Meios Porosos, Universidade Federal de Minas Gerais, pp. 721 – 734, 1993.
- ALSINA, O. L. S.; CONRADO, L. de S.; SILVA, F. L. H.; ALMEIDA, L. C. **Estudo do Equilíbrio de Co-Adsorção do Metanol e Etanol em Fase Líquida Sobre Aluminas Ativadas**. II Encontro Brasileiro de Adsorção, Florianópolis – Santa Catarina, pp. 77 – 84, 2000.
- ALTIDIS, K. I. D.; ALSINA, O. L. S.; SILVA, F. L. H. **Estudo do Equilíbrio da Co-Adsorção Metanol-Etanol em Zeólitas 4A pelo Método Estático**. III Encontro Brasileiro de Adsorção, Recife – Pernambuco, Programa e Resumo, pp. 46, 2000.
- AZEVÊDO, D. C. S.; **Estudo Cinético e Termodinâmico da Adsorção para o Sistema Etanol-Água sobre Zeólitas 3 A Comercial**. Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química – UFSC – São Carlos; 1993.
- BARROS NETO, B.; SCARMINIO, J. S.; BRUNS, R. E. **Planejamento e Otimização de Experimentos**. Campinas: editora da Unicamp, 1995.

- BARRY, H. M. **Fixed-bed Adsorption**. Chemical Engineering, Vol 67, No 2, pp. 105-120, 1960.
- BECILA, R.; JOSE, J.; VERGNAUD, J. M. **Variation des Proprietes Sorptive de tamis Moleculaires de Type A vis-a-vis d'Alcools em Phase Liquide em Function du % décharge Na-K**. Journal de Quimie Physique, Vol 77, n°- 10, pp. 953-957, 1980.
- BECILA, R.; JOSE, J.; VERGNAUD, J. M. **Cinetique de la Coadsorption de Melanges liquides de Methanol et Ethanol par des Zeolithes de Type A Partiellement Echanges au K**. Journal de Chimie Physique, Vol 76, n°- 06, pp. 953-957, 1981.
- BENNETT, C. O.; MYERS, J. E. **Fenômenos de Transporte – Quantidade de Movimento, Calor e Massa**. São Paulo: McGraw-Hill do Brasil, 1978.
- BEZERRA, H. F.; **Coefficiente de Difusão na Adsorção do Metanol em Zeólitas**. Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química – UFPB, Campina Grande, 1992.
- BOX, G. E. P.; & WILSON, K.B. **On the Experimental Attainment of Optimum Condition**. J. Royal Statistic, Vol 13, pp 1 – 45, 1951.
- BUARQUE, H. L.B.; CAVALVANTE, C. L.; OSVALDO. C. FILHO; SILVA, N. M.; **Termodinâmica da Adsorção Multicomponente: Revisão dos Conceitos e Modelos Fundamentais**. II Encontro Brasileiro de Adsorção, Florianópolis – Santa Catarina, pp. 39 - 46, 2000.
- CALLEJA, G.; RODRIGUEZ, J. A.; CALLES, J.A. **Prediction of breakthrough curves of phenol compounds obtained in a fixed-bed adsorber of granular activated carbon**. VI Conferência Internacional de Fundamentos da Adsorção, pp 425 – 430, 1998.

- CHIANG, A. S. T.; LEE, C. K.; WU, F.Y. **Theory of Adsorbed Solutions: Analysis of One-Dimensional Systems**. AIChE Journal, vol 42, No 8, pp 2155-2161, August 1996.
- COSTA, E.; SOTELO, J. L.; CALLEJA, G.. **Adsorption of binary and ternary hydrocarbon Gas Mixtures on Activated carbon: Experimental determination and theoretical prediction of the ternary equilibrium data**. AIChE Journal, vol 27, No 1, pp 5-12, January, 1981.
- COULSON, F. M.; RICHARDSON, F. F. **Tecnologia Química**, 2ª edição, vol. III, Fundação Calouste Gulbenkian; 1985.
- CRACKNELL, R. F.; NICHOLSON, D.. **Adsorption of Gas Mixtures on Solid Surfaces, Theory and Computer Simulation**. Adsorption, Vol. 1, pp. 7-16, 1995.
- DAVIS, M. E.. **Zeolites and Molecular Sieves: Not Just Ordinary Catalyst**. Industrial Engineering Chemical, vol. 30, pp. 1675-1683, 1991.
- GARTH, R. P. **Optimum Isotherm Equation and Thermodynamic Interpretation for Aqueous 1,1,2-Trichloroethene Adsorption Isotherms on Three Adsorbents**. Adsorption, Vol. 1, pp. 113-132, 1995.
- GIANNETO, G. P.; **Zeólitas – Características, Propriedades y Aplicaciones Industriales**, Ediciones Innovación Tecnológica, 1990.
- GOMIDE, R. – **Operações Unitárias. – Operações de Transferência de Massa**, Vol. 4º-. Editora do Autor, São Paulo, 1888.
- GRAMLICH, V., & MEIER, W. M. – **Z. Kristallogr.** 133. pp. 134 – 149, 1971.

- GUTSCHE, R.; HARTMANN, K. **Generalized Criteria for Predicting the Dynamics of Continuous-Flow Chemical Systems – I. Application to Adsorber Systems.** Chemical Engineering Science, vol 51, No 13, pp. 3519-3536, 1996.
- KELLER, J. U.. **Theory of Measurement of Gas-adsorption equilibria by rotational oscillations.** Adsorption, Vol. 1, pp. 283-290, 1995.
- LIMA, V. E.; **Estudos de Equilíbrio e Cinética da Adsorção de Aromáticos em Zeólitas 4 A na Utilização do Método Gravimétrico.** Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química – UFPB, Campina Grande, 1996.
- MARRA, W. D.. **Adsorção de Xilenos sobre Zeólita y em Leito Fixo: Interpretação de Curvas Breakthrough.** Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química – UFSCar, São Carlos, 1991.
- McKAY. G.; McKEE. S.; WALTERS. H. R. J. **Solid-liquid Adsorption Based on External Mass Transfer , Macropore and Micropore Diffusion.** Chemical Engineering Science, vol 42, No 5, pp. 1145-1151, 1987.
- MENDES, C. I. **Adsorção de Metanol em Zeólitas 4 A em Célula Diferencial.** Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química – UFPB, Campina Grande, 1996.
- MELO, S. F.. **Estudo da Cinética da Co-Adsorção do Metanol e Etanol em Fase Líquida sobre Zeólitas 4A.** Relatório de Iniciação Científica, UFPB, 1997.
- NASCIMENTO, B. J.; **Adsorção do Metanol em Aluminas Ativadas.** Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química – UFPB, Campina Grande, 1997.



## **ANEXO A**

### **Classificação Granulométrica das Zeólitas**

Classificação Granulométrica das Zeólitas

Tabela A.1. Comprimento e diâmetro das zeólitas 4A

Zeólitas	Comprimento (mm)	Diâmetro (mm)	Zeólitas	Comprimento (mm)	Diâmetro (mm)
1	5,7	1,7	51	5,5	1,5
2	6,0	1,6	52	3,1	1,7
3	7,3	1,6	53	3,7	1,6
4	2,8	1,6	54	3,1	1,7
5	1,6	1,6	55	3,3	1,6
6	4,4	1,6	56	3,8	1,6
7	3,3	1,6	57	4,9	1,7
8	2,3	1,6	58	3,2	1,6
9	3,9	1,7	59	3,9	1,6
10	4,0	1,6	60	3,5	1,7
11	4,0	1,6	61	4,0	1,6
12	3,8	1,6	62	2,4	1,6
13	3,9	1,2	63	4,6	1,6
14	2,2	1,9	64	3,0	1,6
15	3,4	1,6	65	3,6	1,5
16	3,9	1,5	66	3,1	1,6
17	4,5	1,6	67	3,1	1,5
18	2,7	1,5	68	4,6	1,6
19	3,8	1,5	69	3,1	1,6
20	2,6	1,6	70	4,2	1,6
21	2,7	1,6	71	2,5	1,0
22	3,9	1,5	72	3,0	1,6
23	4,7	1,6	73	3,2	1,6
24	2,9	1,6	74	4,1	1,7
25	3,4	1,5	75	5,6	1,6
26	4,6	1,6	76	3,3	1,6
27	4,1	1,6	77	2,5	1,5
28	5,3	1,6	78	3,7	1,6
29	6,0	1,6	79	2,9	1,5
30	6,8	1,6	80	2,8	1,5
31	3,1	1,6	81	2,5	1,6
32	3,1	1,7	82	3,2	1,7
33	2,0	1,7	83	5,1	1,7
34	2,0	1,6	84	2,5	1,5
35	5,0	1,6	85	2,3	1,6
36	3,9	1,5	86	2,3	1,6
37	5,5	1,6	87	3,1	1,6
38	3,9	1,7	88	4,0	1,6
39	4,2	1,6	89	1,8	1,5
40	3,5	1,7	90	2,0	1,5
41	5,6	1,6	91	1,7	1,6
42	4,6	1,6	92	2,5	1,0
43	2,5	1,6	93	3,0	1,6
44	2,2	1,5	94	4,6	1,6
45	3,4	1,6	95	2,5	1,6
46	1,6	1,6	96	2,3	1,6
47	2,5	1,5	97	3,9	1,7
48	3,2	1,6	98	6,8	1,5
49	4,9	1,6	99	2,7	1,5
50	4,2	1,6	100	3,8	1,5

**ANEXO B**  
**Curvas de Calibração**

Sistema Etanol/Tolueno

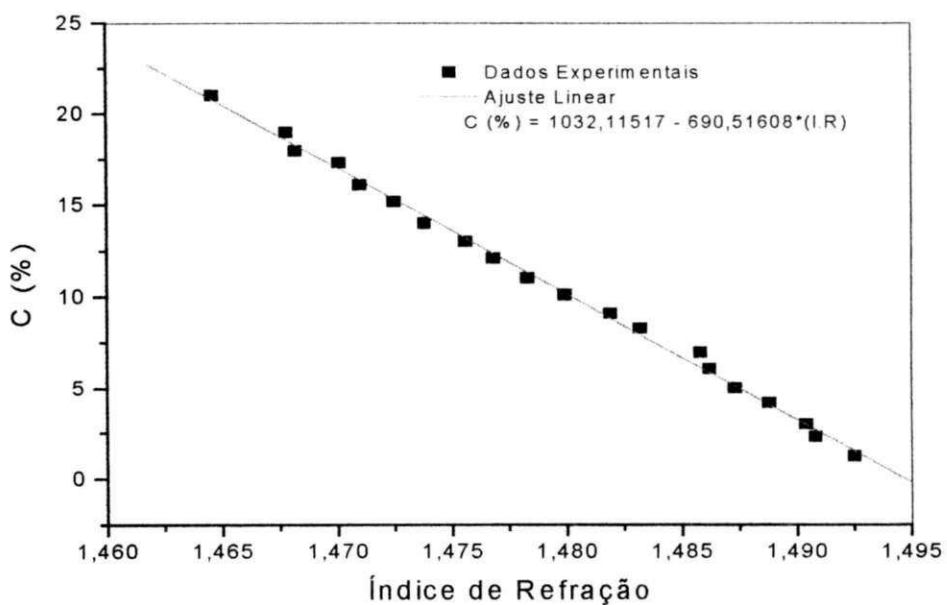
Índice de Refração (I.R)	Concentração Experimental
1,4925	1,2
1,4908	2,3
1,4904	3
1,4888	4,2
1,4873	5
1,4862	6,1
1,4858	7
1,4832	8,3
1,4819	9,1
1,4799	10,1
1,4783	11
1,4768	12,1
1,4756	13
1,4738	14
1,4725	15,2
1,4710	16,1
1,4701	17,3
1,4682	18
1,4678	19
1,4646	21,04

$$Y = A + B * X$$

Parâmetro	Valores	Error
A	1032,11	13,71672
B	-690,52	9,27245

R	SD	N	P
-0,99838	0,34924	20	<0.0001

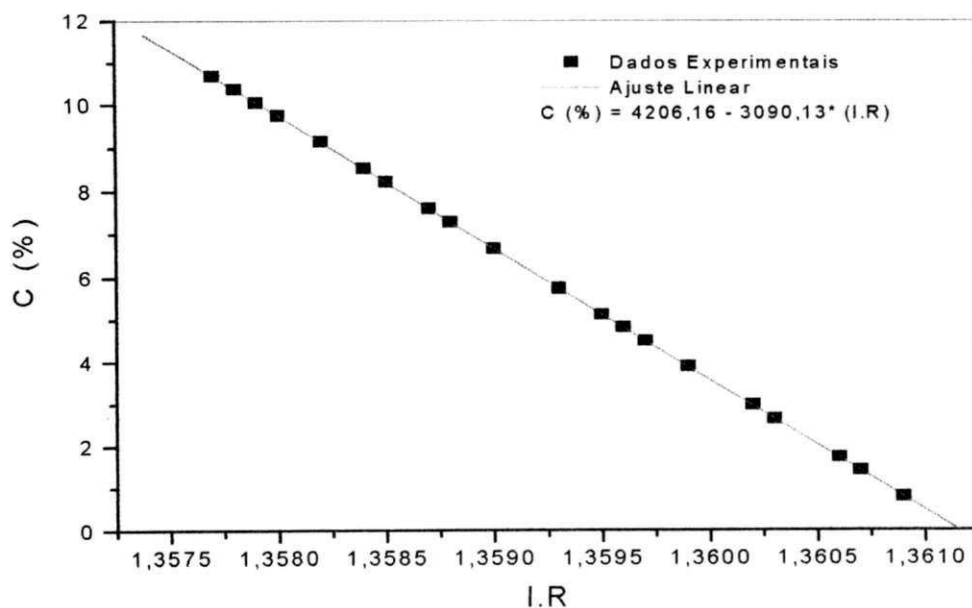


Índice de Refração (I.R)	Concentração Experimental
1,3609	0,80
1,3607	1,40
1,3606	1,73
1,3603	2,65
1,3602	2,97
1,3599	3,89
1,3597	4,51
1,3596	4,82
1,3595	5,19
1,3593	5,75
1,359	6,67
1,3588	7,29
1,3587	7,60
1,3585	8,22
1,3584	8,53
1,3582	9,10
1,3580	9,76
1,3579	10,07
1,3578	10,38
1,3577	10,69

### Sistema Metanol - Etanol

$$Y = A + B * X$$

Parâmetro	Valor	Error	
-			
A	4206,16	0,8879	
B	-3090,13	0,6533	
-			
R	SD	N	P
-			
-0,99981	0,0294	20	<0.0001



## **ANEXO C**

### **Isotermas de Adsorção**

## ISOTERMAS DE ADSORÇÃO

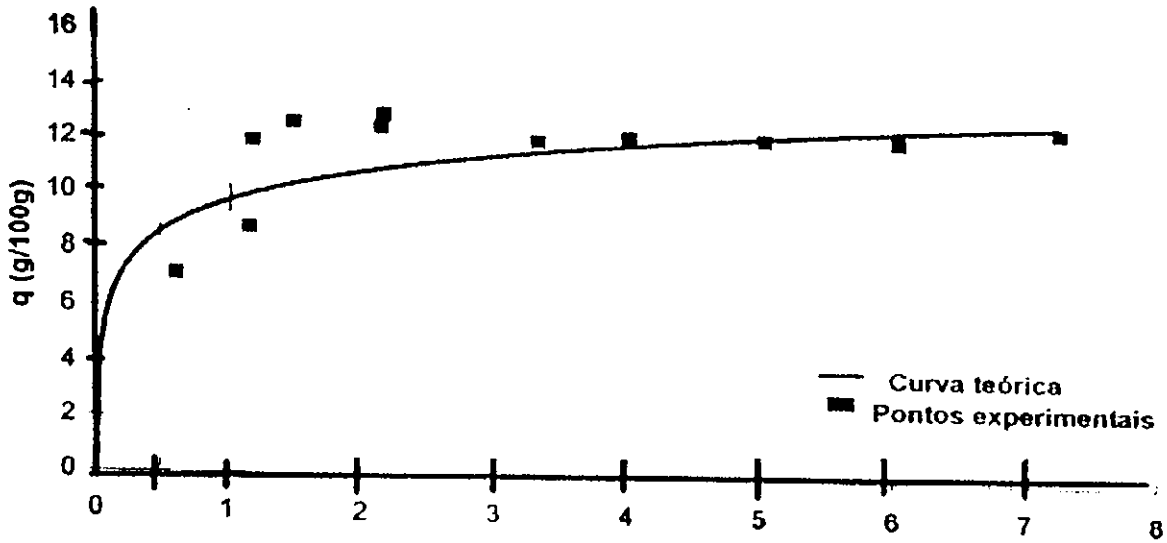


Figura F.1. Isoterma de equilíbrio para a adsorção do etanol no sistema etano-tolueno em zeólitas 4A na temperatura de 20°C

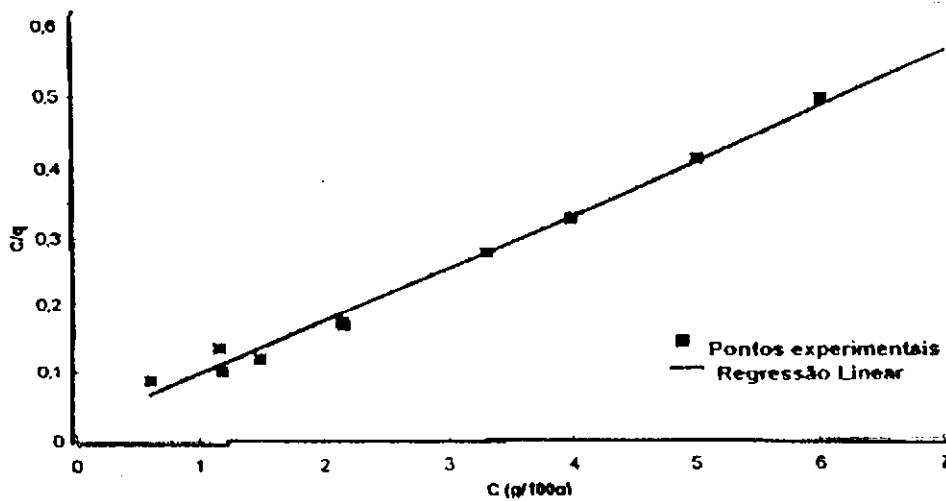


Figura F.2. Linearização da equação de Langmuir para a adsorção do etanol no sistema etano-tolueno em zeólitas 4A na temperatura de 20°C

## ISOTERMAS DE ADSORÇÃO

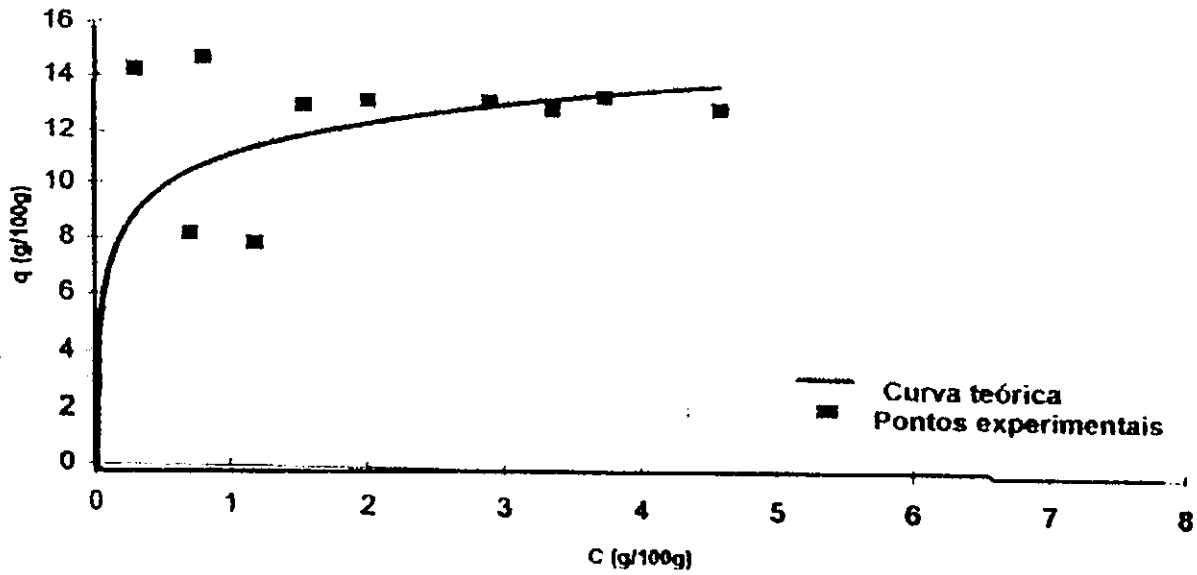


Figura F.3. Isoterma de equilíbrio para a adsorção do etanol no sistema etano-tolueno em zeólitas 4A na temperatura de 30°C

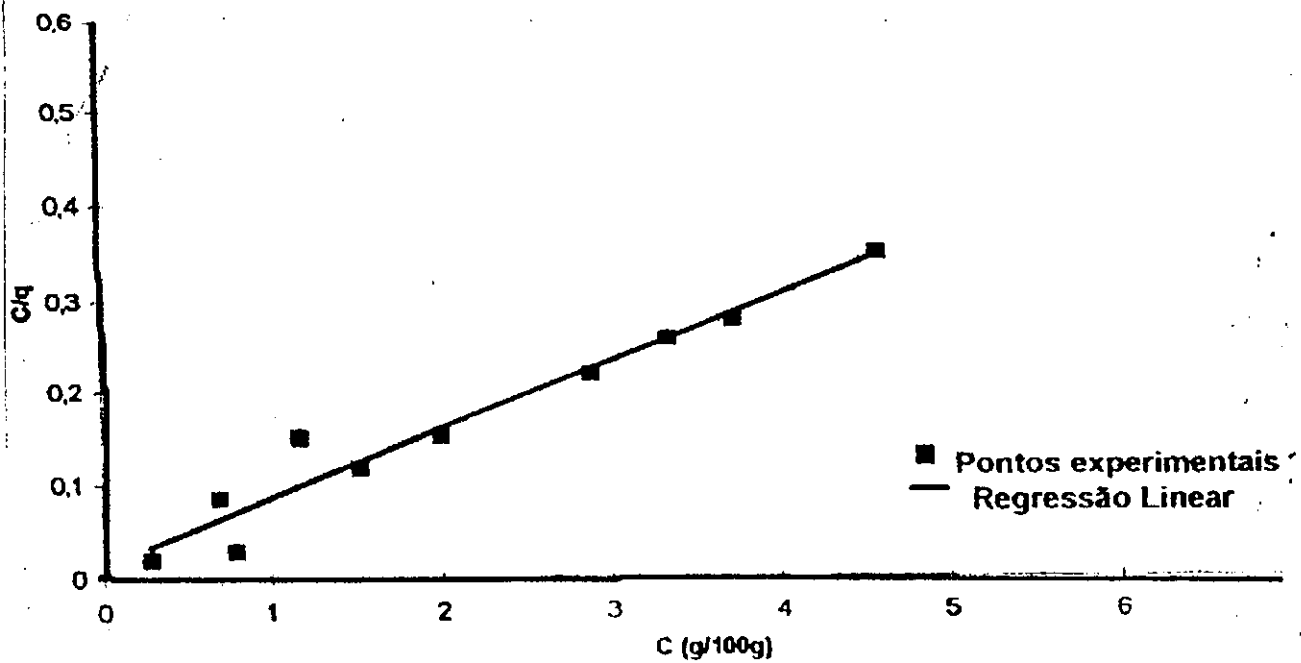


Figura F.4. Linearização da equação de Langmuir para a adsorção do etanol no sistema etano-tolueno em zeólitas 4A na temperatura de 20°C



## **ANEXO D**

**Corridas Experimentais: Sistema etanol-tolueno**

**Tabela D.1. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental n°- 1**

Concentração inicial,  $C_0 = 10,70$

Altura do leito fixo,  $h = 10$  cm

Vazão de operação,  $Q = 4,4$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 53,00 g

Temperatura do banho termostatizado = 20°C

Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C (etanol)	C/C <sub>0</sub>		Tempo	Sensor	
			Experimental.	Modelo		Inferior	Superior
1	1,4946	0,06	0,006	0	0	27,956522	27,217392
2	1,4945	0,12	0,012	0	3	27,05314	27,217392
3	1,4943	0,26	0,025	0,028	6	27,956522	27,217392
4	1,4927	1,37	0,128	0,103	9	27,05314	27,217391
5	1,4900	3,23	0,302	0,303	12	27,439613	27,217392
6	1,4840	7,37	0,690	0,619	15	28,019323	27,217392
7	1,4809	9,51	0,890	0,858	18	27,826087	27,120773
8	1,4802	10,00	0,935	0,957	21	27,826086	27,217392
9	1,4800	10,14	0,948	0,988	24	27,729468	27,217392
10	1,4797	10,34	0,967	0,997	27	27,536232	27,120773
11	1,4795	10,48	0,980	0,999	30	27,536231	27,217392
12	1,4793	10,62	0,993	0,999	33	27,342995	27,217392
13	1,4792	10,70	1	0,999	36	27,246715	27,217392
14	1,4792	10,70	1	0,999	39	27,246377	27,217392
15	1,4792	10,70	1	0,999	42	27,149758	27,217392
16	1,4792	10,70	1	1	45	27,342995	27,120773
17	1,4792	10,70	1	1	48	27,439613	27,217392
18	1,4792	10,70	1	1	51	27,05314	27,217392
19	1,4792	10,70	1	1	54	27,149758	27,217392
20	1,4792	10,70	1	1	57	27,246376	27,31401
21	1,4792	10,70	1	1	60	27,439613	27,31401

**Tabela D.2. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental n°- 2**

Concentração inicial,  $C_0 = 5,30$

Vazão de operação,  $Q = 4,4$  cm<sup>3</sup>/s

Altura do leito fixo,  $h = 10$  cm

Quantidade de zeólitas utilizadas = 53,00 g

Temperatura ambiente = 27,5°C

Temperatura do banho termostatizado = 20°

Dados	I.R	C % (etanol)	C/C <sub>0</sub>		Tempo (s)	Sensor	
			Experimental.	(modelo)		alta	baixa
1	1,4946	0,06	0,011	0	0	27,570048	27,603865
2	1,4945	0,12	0,024	0	3	28,570049	27,603865
3	1,4944	0,19	0,037	0	6	28,666666	27,507246
4	1,4943	0,26	0,050	0,003	9	28,570048	27,410628
5	1,4942	0,33	0,063	0,009	12	28,763285	27,31401
6	1,4940	0,47	0,089	0,037	15	27,246377	27,507246
7	1,4937	0,68	0,128	0,134	18	27,536232	27,31401
8	1,4918	1,99	0,375	0,376	21	27,826086	27,410628
9	1,4892	3,78	0,714	0,702	24	27,922705	27,507246
10	1,4878	4,75	0,896	0,901	27	28,115942	27,603865
11	1,4873	5,09	0,961	0,972	30	28,019323	27,410628
12	1,4872	5,16	0,974	0,992	33	28,115942	27,603865
13	1,4871	5,23	0,987	0,998	36	27,922705	27,507246
14	1,4870	5,30	1	0,999	39	28,019323	27,507246
15	1,4870	5,30	1	0,999	42	28,115942	27,410629
16	1,4870	5,30	1	0,999	45	27,922705	27,31401
17	1,4870	5,30	1	0,999	48	28,115942	27,31401
18	1,4870	5,30	1	0,999	51	28,019323	27,410628
19	1,4870	5,30	1	0,999	54	27,9227047	27,217392
20	1,4870	5,30	1	1	57	28,019323	27,507246
21	1,4870	5,30	1	1	60	27,826086	27,507246

**Tabela D.3. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental n°- 3**

Concentração inicial,  $C_0 = 5,37$   
 Vazão de operação,  $Q = 10,0 \text{ cm}^3/\text{s}$   
 Altura do leito fixo,  $h = 20 \text{ cm}$

Quantidade de zeólitas utilizadas = 102,52 g  
 Temperatura ambiente = 27,0°C  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°

Dados	I.R	C % (Etanol)	C/C <sub>0</sub> Experimental.	C/C <sub>0</sub> (modelo)	Tempo	Sensor alta	Sensor baixa
1	1,4946	0,06	0,010	0	0	27,439613	26,507246
2	1,4946	0,06	0,010	0	5	27,536232	27,31401
3	1,4946	0,06	0,010	0,010	10	27,439613	27,31401
4	1,4942	0,33	0,062	0,057	15	27,439613	27,217392
5	1,4930	1,16	0,216	0,257	20	27,536232	27,3139924
6	1,4900	3,23	0,602	0,658	25	27,63285	27,217392
7	1,4878	4,75	0,884	0,915	30	27,826086	27,31401
8	1,4872	5,16	0,962	0,983	35	27,729468	27,31401
9	1,4871	5,23	0,974	0,997	40	27,729468	27,31401
10	1,4870	5,30	0,987	0,999	45	27,729468	27,410628
11	1,4869	5,38	1	0,999	50	27,729468	27,31401
12	1,4869	5,38	1	0,999	55	27,729468	27,31401
13	1,4869	5,38	1	0,999	60	27,63285	27,31401
14	1,4869	5,38	1	0,999	65	27,729468	27,31401
15	1,4869	5,38	1	1	70	27,536232	27,410628
16	1,4869	5,38	1	1	75	27,536232	27,410628
17	1,4869	5,38	1	1	80	27,63285	27,31401
18	1,4869	5,38	1	1	85	27,439613	27,31401
19	1,4869	5,38	1	1	90	27,536232	27,410628
20	1,4869	5,38	1	1	95	27,439613	27,217392
21	1,4869	5,38	1	1	100	27,536232	27,31401

**Tabela D.4. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental n°- 4**

Concentração inicial,  $C_0 = 9,79$   
 Vazão de operação,  $Q = 10,0 \text{ cm}^3/\text{s}$   
 Altura do leito fixo,  $h = 20 \text{ cm}$

Quantidade de zeólitas utilizadas = 102,60 g  
 Temperatura ambiente = 27,3°C  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°

dados	I.R	C % (etanol)	C/C <sub>0</sub> Experimental.	C/C <sub>0</sub> modelo.	Tempo	Sensor alta	Sensor baixa
1	1,4946	0,06	0,006	0	0	27,024155	27,478260
2	1,4945	0,12	0,013	0	3	28,927536	27,5748787
3	1,4944	0,19	0,020	0	6	27,280193	27,280193
4	1,4943	0,26	0,027	0,014	9	27,956522	27,217392
5	1,4930	1,16	0,118	0,090	12	27,05314	27,217392
6	1,4905	2,88	0,295	0,396	15	27,05314	27,2173913
7	1,4840	7,37	0,753	0,812	18	27,149758	26,217392
8	1,4819	8,82	0,901	0,966	21	28,019323	27,217392
9	1,4809	9,51	0,972	0,994	24	27,8251301	27,217392
10	1,4807	9,65	0,986	0,999	27	27,826086	27,120773
11	1,4806	9,72	0,993	0,999	30	27,826086	27,217392
12	1,4805	9,79	1	0,999	33	27,536232	27,120773
13	1,4805	9,79	1	1	36	27,5362313	27,217392
14	1,4805	9,79	1	1	39	27,4396133	27,217392
15	1,4805	9,79	1	1	42	27,2463767	27,217392
16	1,4805	9,79	1	1	45	27,3429947	27,217392
17	1,4805	9,79	1	1	48	27,05314	27,217392
18	1,4805	9,79	1	1	51	27,3429947	27,217392
19	1,4805	9,79	1	1	54	27,3429947	27,120773
20	1,4805	9,79	1	1	57	27,1497587	27,217392
21	1,4805	9,79	1	1	60	27,149758	26,217392

**Tabela D.5. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental n°- 5**

Concentração inicial,  $C_0 = 9,86$   
 Vazão de operação,  $Q = 10,0 \text{ cm}^3/\text{s}$   
 Altura do leito fixo,  $h = 10 \text{ cm}$

Quantidade de zeólitas utilizadas = 53,38 g  
 Temperatura ambiente = 27,5°C  
 Temperatura do banho termostatzado = 20°

dados	I.R	C % (etanol)	C/C <sub>0</sub> Experimental.	C/C <sub>0</sub> (modelo)	Tempo	Sensor alta	Sensor baixa
1	1,4944	0,19	0,019	0	0	31,690821	28,309179
2	1,4936	0,74	0,076	0	3	31,594202	28,309179
3	1,4913	2,33	0,237	0,248	6	31,594203	28,212561
4	1,4872	5,16	0,524	0,694	9	31,497584	28,309179
5	1,4824	8,48	0,860	0,939	12	31,347823	28,599034
6	1,4817	8,96	0,909	0,990	15	30,478261	29,661836
7	1,4816	9,03	0,916	0,998	18	30,338164	29,468599
8	1,4815	9,10	0,923	0,999	21	29,951691	29,468599
9	1,4814	9,17	0,930	0,999	24	28,868501	28,985508
10	1,4813	9,24	0,937	0,999	27	29,855072	29,371981
11	1,4812	9,31	0,944	0,999	30	29,758454	29,275362
12	1,4811	9,38	0,951	1	33	29,855072	29,275363
13	1,4810	9,44	0,958	1	36	29,855072	29,275362
14	1,4808	9,58	0,972	1	39	29,565218	29,178744
15	1,4806	9,72	0,986	1	42	29,565218	29,275362
16	1,4804	9,86	1	1	45	29,371981	29,082126
17	1,4804	9,86	1	1	48	28,985507	29,178744
18	1,4804	9,86	1	1	51	28,792271	28,985508
19	1,4804	9,86	1	1	54	28,405798	28,985508
20	1,4804	9,86	1	1	57	28,599034	28,985508
21	1,4804	9,86	1	1	60	28,792271	28,985508

**Tabela D.6. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental n°- 6**

Concentração inicial,  $C_0 = 5,89$   
 Vazão de operação,  $Q = 10,0 \text{ cm}^3/\text{s}$   
 Altura do leito fixo,  $h = 10 \text{ cm}$

Quantidade de zeólitas utilizadas = 53,00 g  
 Temperatura ambiente = 30,0°C  
 Temperatura do banho termostatzado = 20°

Dados	I.R	C % (etanol)	C/C <sub>0</sub> Experimental.	C/C <sub>0</sub> (modelo)	Tempo	Sensor alta	Sensor baixa
1	1,4946	0,06	0,010	0	0	27,149758	27,507247
2	1,4927	1,37	0,233	0,140	3	27,05314	27,700483
3	1,4906	2,82	0,481	0,343	6	27,149758	27,507246
4	1,4888	4,06	0,693	0,621	9	27,149758	27,6038647
5	1,4870	5,30	0,905	0,835	12	27,149758	27,6038647
6	1,4868	5,44	0,929	0,946	15	27,246377	27,6038647
7	1,4866	5,58	0,952	0,980	18	27,63285	27,410628
8	1,4865	5,65	0,964	0,993	21	27,729468	27,507246
9	1,4864	5,72	0,976	0,997	24	28,309179	27,507246
10	1,4863	5,79	0,988	0,999	27	28,792271	27,410628
11	1,4862	5,85	1	0,999	30	28,985508	27,507246
12	1,4862	5,86	1	0,999	33	29,178744	27,603865
13	1,4862	5,85	1	0,999	36	29,275362	27,507246
14	1,4862	5,86	1	0,999	39	29,178744	27,603865
15	1,4862	5,85	1	0,999	42	28,985507	27,603865
16	1,4862	5,86	1	1	45	29,082126	27,700483
17	1,4862	5,85	1	1	48	29,082126	27,603865
18	1,4862	5,86	1	1	51	29,082126	27,507246
19	1,4862	5,85	1	1	54	28,985508	27,507246
20	1,4862	5,86	1	1	57	29,082126	27,700483
21	1,4862	5,85	1	1	60	28,695652	27,797102

**Tabela D.7. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental n°- 7**

Concentração inicial,  $C_0 = 10,14$   
 Vazão de operação,  $Q = 4,4 \text{ cm}^3/\text{s}$   
 Altura do leito fixo,  $h = 20 \text{ cm}$

Quantidade de zeólitas utilizadas = 102,53 g  
 Temperatura ambiente = 28,0°C  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°

Dados	I.R	C % (etanol)	C/C <sub>0</sub> Experimental.	C/C <sub>0</sub> (modelo)	Tempo	Sensor alta	Sensor baixa
1	1,4946	0,06	0,006	0	0	28,405798	28,729468
2	1,4945	0,12	0,012	0	5	28,405798	28,729468
3	1,4944	0,19	0,019	0	10	28,405798	28,536232
4	1,4943	0,26	0,026	0,0001	15	28,405798	28,536232
5	1,4942	0,33	0,033	0,002	20	28,405798	28,246377
6	1,4941	0,40	0,039	0,016	25	28,792271	28,859903
7	1,4932	1,025	0,101	0,115	30	29,415459	28,859903
8	1,4871	5,23	0,516	0,507	35	29,6618353	28,570048
9	1,4824	8,48	0,836	0,891	40	30,241546	28,763285
10	1,4808	9,58	0,945	0,984	45	30,338164	28,859903
11	1,4806	9,72	0,959	0,998	50	30,724638	28,666666
12	1,4805	9,79	0,965	0,999	55	30,821255	28,47343
13	1,4804	9,86	0,972	0,999	60	30,917874	28,763285
14	1,4802	10,02	0,986	0,999	65	31,014492	28,666666
15	1,4801	10,71	0,993	1	70	31,014492	28,666666
16	1,4800	10,14	1	1	75	30,724638	28,763285
17	1,4800	10,14	1	1	80	30,434782	28,666666
18	1,4800	10,10	1	1	85	30,338164	28,763285
19	1,4800	10,40	1	1	90	30,241546	28,149758
20	1,4800	10,14	1	1	95	28,985508	28,342995
21	1,4800	10,14	1	1	100	28,502416	28,149758

**Tabela D.8. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental n°- 8**

Concentração inicial,  $C_0 = 5,24$   
 Vazão de operação,  $Q = 4,4 \text{ cm}^3/\text{s}$   
 Altura do leito fixo,  $h = 20 \text{ cm}$

Quantidade de zeólitas utilizadas = 102,80 g  
 Temperatura ambiente = 27,5°C  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°

dados	I.R	C % (etanol)	C/C <sub>0</sub> Experimental.	C/C <sub>0</sub> (modelo)	Tempo	Sensor alta	Sensor baixa
1	1,4946	0,06	0,006	0	0	27,666666	27,797102
2	1,4946	0,06	0,006	0	5	27,666666	27,797102
3	1,4946	0,06	0,006	0	10	28,956522	27,89372
4	1,4946	0,06	0,006	0,0002	15	28,666666	27,89372
5	1,4945	0,12	0,012	0,0007	20	27,47343	27,990338
6	1,4944	0,19	0,019	0,002	25	27,570048	27,990338
7	1,4943	0,26	0,026	0,006	30	27,763285	27,797102
8	1,4942	0,33	0,033	0,018	35	27,376812	27,797102
9	1,4941	0,40	0,073	0,052	40	27,47343	27,086956
10	1,4936	0,74	0,160	0,137	45	27,47343	27,990338
11	1,4923	1,64	0,302	0,316	50	27,376812	27,086956
12	1,4902	3,09	0,591	0,574	55	27,47343	27,89372
13	1,4887	4,31	0,823	0,796	60	27,47343	27,990338
14	1,4878	4,75	0,908	0,919	65	27,47343	27,89372
15	1,4873	5,09	0,973	0,970	70	27,763285	27,89372
16	1,4872	5,16	0,987	0,989	75	27,666666	27,797102
17	1,4871	5,24	1	0,996	80	27,47343	27,797102
18	1,4871	5,24	1	0,998	85	27,666666	27,700483
19	1,4871	5,24	1	0,999	90	27,763285	27,797102
20	1,4871	5,24	1	0,999	95	27,666666	27,797102
21	1,4871	5,24	1	0,999	100	27,763285	27,797102

**Tabela D.9. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental nº- 9**

Concentração inicial,  $C_0 = 7,52$   
 Vazão de operação,  $Q = 7,2 \text{ cm}^3/\text{s}$   
 Altura do leito fixo,  $h = 15 \text{ cm}$

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,225 g  
 Temperatura ambiente = 26,5°C  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°

dados	I.R	C % (etanol)	C/C <sub>0</sub> Experimental.	C/C <sub>0</sub> (modelo)	Tempo	Sensor alta	Sensor baixa
1	1.4946	0,06	0,008	0	0	26,570048	26,927536
2	1.4946	0,06	0,008	0	3	26,47343	26,927536
3	1.4945	0,12	0,017	0	6	26,47343	26,024155
4	1.4944	0,19	0,026	0,020	9	26,376812	26,927536
5	1.4939	0,54	0,072	0,069	12	26,47343	26,927536
6	1.4925	1,50	0,200	0,201	15	26,666666	26,927536
7	1.4900	3,23	0,430	0,457	18	26,570048	26,830918
8	1.4867	5,51	0,733	0,737	21	26,47343	26,7343
9	1.4848	6,82	0,908	0,903	24	26,859903	26,637682
10	1.4843	7,17	0,954	0,968	27	27,246376	26,541063
11	1.4842	7,24	0,963	0,990	30	27,342995	26,444445
12	1.4841	7,30	0,972	0,997	33	27,729469	26,347827
13	1.4840	7,37	0,981	0,999	36	27,826086	26,347826
14	1.4839	7,44	0,990	0,999	39	27,826086	26,347827
15	1.4838	7,52	1	0,999	42	27,922705	26,347826
16	1.4838	7,52	1	0,999	45	27,826086	26,251208
17	1.4838	7,52	1	0,999	48	27,826086	26,15459
18	1.4838	7,52	1	0,999	51	27,729468	26,15459
19	1.4838	7,52	1	0,999	54	27,536231	26,057972
20	1.4838	7,52	1	1	57	27,536232	26,864735
21	1.4838	7,52	1	1	60	27,536232	26,864735

**Tabela D.10. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental nº- 10**

Concentração inicial,  $C_0 = 7,45$   
 Vazão de operação,  $Q = 7,2 \text{ cm}^3/\text{s}$   
 Altura do leito fixo,  $h = 15 \text{ cm}$

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,30 g  
 Temperatura ambiente = 28,0°C  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°

dados	I.R	C % (etanol)	C/C <sub>0</sub> Experimental.	C/C <sub>0</sub> (modelo)	Tempo	Sensor alta	Sensor baixa
1	1.4946	0,06	0,008	0	0	27,246376	28,666666
2	1.4945	0,12	0,017	0	3	27,149758	28,763285
3	1.4944	0,19	0,026	0	6	27,342995	28,763285
4	1.4943	0,26	0,036	0,020	9	27,729468	28,763285
5	1.4940	0,47	0,063	0,068	12	28,599034	28,763285
6	1.4927	1,37	0,184	0,196	15	28,792271	28,763285
7	1.4900	3,22	0,434	0,446	18	28,792271	28,956521
8	1.4867	5,51	0,740	0,726	24	28,888889	28,570048
9	1.4852	6,54	0,879	0,897	27	28,792271	28,666666
10	1.4843	7,17	0,962	0,966	30	28,599034	28,763285
11	1.4842	7,24	0,972	0,989	33	28,695652	28,570048
12	1.4841	7,30	0,981	0,996	36	28,599034	26,666666
13	1.4840	7,37	0,990	0,999	39	28,695652	28,666667
14	1.4839	7,45	1	0,999	42	28,695652	28,666666
15	1.4839	7,45	1	0,999	45	28,792271	28,666666
16	1.4839	7,45	1	0,999	48	28,695652	28,570048
17	1.4839	7,45	1	0,999	51	28,695652	28,570048
18	1.4839	7,45	1	0,999	54	28,695652	28,570048
19	1.4839	7,45	1	0,999	57	28,792271	28,666666
20	1.4839	7,45	1	1	60	28,792271	28,570048
21	1.4839	7,45	1	1		28,695652	28,246377

**Tabela D.13. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental nº- 13**

Concentração inicial,  $C_0 = 11,86$   
 Vazão de operação,  $Q = 7,2 \text{ cm}^3/\text{s}$   
 Altura do leito fixo,  $h = 15 \text{ cm}$

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,58 g  
 Temperatura ambiente = 28,5°C  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°

Dados	I.R	C % (etanol)	C/C <sub>0</sub> Experimental.	C/C <sub>0</sub> (modelo)	Tempo	Sensor alta	Sensor baixa
1	1,4946	0,06	0,005	0	0	28,149758	28,570048
2	1,4946	0,06	0,005	0	3	28,342995	28,859903
3	1,4945	0,12	0,011	0	6	28,149758	28,956522
4	1,4943	0,26	0,022	0,024	9	28,623854	28,763285
5	1,4930	1,16	0,098	0,152	12	28,623854	28,956522
6	1,4852	6,54	0,552	0,559	15	28,792271	28,859903
7	1,4808	9,58	0,808	0,898	18	29,082125	28,859903
8	1,4781	11,52	0,965	0,984	21	29,661835	28,570048
9	1,4778	11,65	0,982	0,997	24	30,241546	28,763285
10	1,4776	11,79	0,994	0,999	27	30,338164	28,859903
11	1,4775	11,86	1	0,999	30	30,724638	28,666666
12	1,4775	11,86	1	0,999	33	30,821255	28,47343
13	1,4775	11,86	1	1	36	30,917874	28,763285
14	1,4775	11,86	1	1	39	31,014492	28,666666
15	1,4775	11,86	1	1	42	31,014492	28,666666
16	1,4775	11,86	1	1	45	30,724638	28,763285
17	1,4775	11,86	1	1	48	30,434782	28,666666
18	1,4775	11,86	1	1	51	30,338164	28,763285
19	1,4775	11,86	1	1	54	30,241546	28,149758
20	1,4775	11,86	1	1	57	28,985508	28,342995
21	1,4775	11,86	1	1	60	28,502416	28,149758

**Tabela D.14. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental nº- 14**

Concentração inicial,  $C_0 = 7,52$   
 Vazão de operação,  $Q = 7,2 \text{ cm}^3/\text{s}$   
 Altura do leito fixo,  $h = 6,6 \text{ cm}$

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,52 g  
 Temperatura ambiente = 26,3°C  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°

dados	I.R	C % (etanol)	C/C <sub>0</sub> Experimental.	C/C <sub>0</sub> (modelo)	Tempo	Sensor alta	Sensor baixa
1	1,4946	0,06	0,007	0	0	28,922705	28,376812
2	1,4927	1,37	0,182	0,093	3	28,826086	28,280193
3	1,4914	2,26	0,301	0,278	6	28,729468	28,376811
4	1,4904	2,95	0,393	0,585	9	29,729468	28,376812
5	1,4862	5,86	0,779	0,834	12	29,536232	28,376812
6	1,4848	6,82	0,908	0,947	15	29,536232	28,376812
7	1,4846	6,96	0,926	0,984	18	29,439613	28,280193
8	1,4843	7,17	0,954	0,995	21	30,246376	28,376812
9	1,4842	7,24	0,963	0,998	24	30,246376	28,376812
10	1,4840	7,37	0,981	0,999	27	30,149758	28,376811
11	1,4839	7,44	0,990	0,999	30	29,05314	28,376811
12	1,4838	7,52	1	0,999	33	29,956522	28,376811
13	1,4838	7,52	1	0,999	36	29,763285	28,376811
14	1,4838	7,52	1	0,999	39	28,280193	28,280193
15	1,4838	7,52	1	0,999	42	28,666666	28,280193
16	1,4838	7,52	1	1	45	28,570048	28,376811
17	1,4838	7,52	1	1	48	28,376811	28,376811
18	1,4838	7,52	1	1	51	28,376812	28,376812
19	1,4838	7,52	1	1	54	28,280193	28,183575
20	1,4838	7,52	1	1	57	28,376812	28,280193
21	1,4838	7,52	1	1	60	28,47343	28,376811

**Tabela D.15. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental n°- 15**

Concentração inicial,  $C_0 = 7,44$   
 Vazão de operação,  $Q = 7,2 \text{ cm}^3/\text{s}$   
 Altura do leito fixo,  $h = 23,4 \text{ cm}$

Quantidade de zeólitas utilizadas = 112,58 g  
 Temperatura ambiente = 27,5°C  
 Temperatura do banho termostalizado = 20°

dados	I.R	C % (etanol)	C/C <sub>0</sub> Experimental.	C/C <sub>0</sub> (modelo)	Tempo	Sensor alta	Sensor baixa
1	1,4946	0,06	0,008	0	0	27,63285	28,570048
2	1,4946	0,06	0,008	0	5	27,632849	28,376812
3	1,4946	0,06	0,008	0	10	27,536232	28,570048
4	1,4945	0,12	0,017	0,001	15	27,536232	28,570048
5	1,4945	0,12	0,017	0,014	20	27,63285	28,47343
6	1,4935	0,81	0,109	0,105	25	28,212561	28,376812
7	1,4891	3,85	0,517	0,482	30	28,599034	28,47343
8	1,4850	6,68	0,898	0,880	35	28,599034	28,47343
9	1,4843	7,17	0,963	0,983	40	28,599034	28,47343
10	1,4842	7,24	0,972	0,997	45	28,599034	28,376811
11	1,4840	7,37	0,990	0,999	50	28,695652	28,376812
12	1,4839	7,44	1	0,999	55	28,599034	28,376812
13	1,4839	7,44	1	0,999	60	28,599034	28,376812
14	1,4839	7,44	1	0,999	65	28,405798	28,376812
15	1,4839	7,44	1	1	70	28,599034	28,376812
16	1,4839	7,44	1	1	75	28,599034	28,280193
17	1,4839	7,44	1	1	80	28,309179	28,47343
18	1,4839	7,44	1	1	85	28,405797	28,376812
19	1,4839	7,44	1	1	90	28,405798	28,376812
20	1,4839	7,44	1	1	95	28,309179	28,376812
21	1,4839	7,44	1	1	100	28,309179	28,376812

**Tabela D.16. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental n°- 16**

Concentração inicial,  $C_0 = 7,37$   
 Vazão de operação,  $Q = 2,5 \text{ cm}^3/\text{s}$   
 Altura do leito fixo,  $h = 15 \text{ cm}$

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,30 g  
 Temperatura ambiente = 28,0°C  
 Temperatura do banho termostalizado = 20°

Dados	I.R	C % (etanol)	C/C <sub>0</sub> Experimental.	C/C <sub>0</sub> (modelo.)	Tempo	Sensor alta	Sensor baixa
1	1,4946	0,06	0,008	0	0	27,63285	28,570048
2	1,4946	0,06	0,008	0	3	27,632849	28,376812
3	1,4946	0,06	0,008	0	6	27,536232	28,570048
4	1,4946	0,06	0,008	0	9	27,536232	28,570048
5	1,4946	0,06	0,008	0	12	27,63285	28,47343
6	1,4946	0,06	0,008	0,0005	15	28,212561	28,376812
7	1,4945	0,12	0,017	0,001	18	28,599034	28,47343
8	1,4945	0,12	0,017	0,003	21	28,502416	28,47343
9	1,4945	0,12	0,017	0,008	24	28,599034	28,47343
10	1,4945	0,12	0,017	0,017	27	28,599034	28,376811
11	1,4943	0,26	0,036	0,038	30	28,695652	28,376812
12	1,4937	0,68	0,092	0,081	33	28,502416	28,376812
13	1,4927	1,37	0,186	0,163	36	28,405798	28,376812
14	1,4908	2,68	0,363	0,301	39	28,405798	28,376812
15	1,4897	3,44	0,466	0,486	42	28,599034	28,376812
16	1,4875	4,96	0,672	0,676	45	28,599034	28,280193
17	1,4854	6,41	0,869	0,821	48	28,309179	28,47343
18	1,4849	6,75	0,916	0,912	51	28,405797	28,376812
19	1,4845	7,03	0,953	0,956	54	28,405798	28,376812
20	1,4842	7,24	0,981	0,979	57	28,309179	28,376812
21	1,4840	7,37	1,000	0,990	60	28,309179	28,376812



**Tabela D.17. Sistema Etanol-Tolueno: Corrida experimental n° - 17**

Concentração inicial,  $C_0 = 7,58$

Vazão de operação,  $Q = 11,9 \text{ cm}^3/\text{s}$

Altura do leito fixo,  $h = 15 \text{ cm}$

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,00 g

Temperatura ambiente = 28,5°C

Temperatura do banho termostatizado = 20°

Dados	I.R	C % (etanol)	C/C <sub>0</sub> Experimental.	C/C <sub>0</sub> (modelo).	Tempo	Sensor alta	Sensor baixa
1	1.4946	0,06	0,007	0	0	26,570048	26,927536
2	1.4946	0,06	0,007	0	3	27,552335	26,927536
3	1.4941	0,40	0,053	0,045	6	27,700483	27,410628
4	1.4927	1,37	0,180	0,202	9	28,603865	28,603865
5	1.4904	2,95	0,390	0,564	12	28,700483	28,603865
6	1.4862	5,85	0,772	0,868	15	28,603865	28,507245
7	1.4848	6,82	0,899	0,970	18	29,89372	28,507246
8	1.4846	6,96	0,918	0,994	21	28,89372	28,507246
9	1.4843	7,17	0,945	0,998	24	28,666667	28,024155
10	1.4842	7,24	0,954	0,999	27	28,246376	28,541063
11	1.4840	7,37	0,972	0,999	30	28,342995	28,444445
12	1.4839	7,44	0,981	0,999	33	28,729469	28,347827
13	1.4838	7,51	0,990	0,999	36	28,826086	28,347826
14	1.4837	7,58	1	1	39	28,826086	28,347827
15	1.4837	7,60	1	1	42	28,922705	28,347826
16	1.4837	7,60	1	1	45	28,826086	28,251208
17	1.4837	7,60	1	1	48	28,826086	28,15459
18	1.4837	7,60	1	1	51	28,729468	28,15459
19	1.4837	7,60	1	1	54	28,536231	28,057972
20	1.4837	7,60	1	1	57	27,536232	28,864735
21	1.4837	7,60	1	1	60	27,536232	26,864735

## **ANEXO E**

**Corridas Experimentais: Sistema metanol-etanol**

**Tabela E.1. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 1.**

Concentração inicial,  $C_0 = 3,27\%$   
 Altura do leito fixo,  $h = 20 \text{ cm}$   
 Vazão de operação,  $Q = 4,4 \text{ cm}^3/\text{s}$

Quantidade de zeólitas utilizadas =  $53,00 \text{ g}$   
 Temperatura do banho termostaticado =  $20^\circ\text{C}$   
 Temperatura ambiente =  $27^\circ\text{C}$

dados	I.R	$C_A \%$ Metanol	$C/C_0$ $C_0 = 3,27$	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3611	0,18	0,056	0	27,922705	25,217391
2	1,3611	0,18	0,056	3	33,043478	25,507246
3	1,3611	0,18	0,056	6	31,980677	25,89372
4	1,3610	0,49	0,150	9	30,241545	25,990338
5	1,3610	0,49	0,150	12	37,632851	25,410628
6	1,3609	0,80	0,245	15	38,454107	25,603865
7	1,3608	1,11	0,339	18	37,777777	26,086957
8	1,3605	2,03	0,622	21	37,391304	25,990338
9	1,3602	2,96	0,905	24	35,652175	25,990338
10	1,3601	3,27	1	27	33,81643	26,859903
11	1,3599	3,89	1,188	30	33,52657	26,280193
12	1,3598	4,20	1,283	33	30,144928	25,990338
13	1,3601	3,89	1,188	36	29,371981	26,086957
14	1,3600	3,58	1,094	39	28,599034	25,797102
15	1,3601	3,27	1	42	28,309179	25,89372
16	1,3601	3,27	1	45	28,115942	26,086957
17	1,3601	3,58	1	48	28,212561	25,89372
18	1,3601	3,27	1	51	28,115942	25,797102
19	1,3601	3,27	1	54	27,826087	25,603865
20	1,3601	3,27	1	57	27,729468	25,89372
21	1,3601	3,27	1	60	27,536232	25,797102

**Tabela E.2. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 2**

Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 2,96$   
 Altura do leito fixo,  $h = 10 \text{ cm}$   
 Vazão de operação,  $Q = 10,0 \text{ cm}^3/\text{s}$

Quantidade de zeólitas utilizadas =  $53,00 \text{ g}$   
 Temperatura do banho termostaticado =  $20^\circ\text{C}$   
 Temperatura ambiente =  $27^\circ\text{C}$

dados	I.R	$C_A \%$ Metanol	$C/C_0$ $C_0 = 2,96$	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3611	0,18	0,062	0	28,659655	28,797102
2	1,3610	0,49	0,166	3	30,434782	28,700483
3	1,3610	0,49	0,166	6	33,33332	28,603865
4	1,3609	0,80	0,270	9	35,623320	28,410628
5	1,3608	1,11	0,374	12	38,072465	28,31401
6	1,3605	2,03	0,687	15	34,782608	28,550725
7	1,3603	2,65	0,895	18	32,077294	28,454101
8	1,3602	2,96	1	21	31,884058	28,7343
9	1,3601	3,27	1,104	24	31,594202	28,7343
10	1,3601	3,27	1,104	27	31,497584	28,7343
11	1,3600	3,58	1,208	30	31,400966	28,541063
12	1,3602	2,96	1	33	31,111111	28,347826
13	1,3602	2,96	1	36	30,917874	28,637682
14	1,3602	2,96	1	39	30,724638	28,347826
15	1,3602	2,96	1	42	30,338164	28,251208
16	1,3602	2,96	1	45	30,241546	28,347826
17	1,3602	2,96	1	48	30,144928	28,15459
18	1,3602	2,96	1	51	29,855072	28,057972
19	1,3602	2,96	1	54	29,855072	28,15459
20	1,3602	2,96	1	57	29,951691	28,768116
21	1,3602	2,965	1	60	29,468599	28,294687

**Tabela E.3. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 3**

Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 2,96$   
 Altura do leito fixo,  $h = 20$  cm  
 Vazão de operação,  $Q = 10,0$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 102,58 g  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°C  
 Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C <sub>A</sub> % Metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 2,96	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3611	0,18	0,062	0	29,371981	26,797102
2	1,3611	0,18	0,062	3	28,405798	26,603865
3	1,3611	0,18	0,062	6	30,434782	26,603865
4	1,36100	0,49	0,166	9	31,014492	26,603865
5	1,36100	0,49	0,166	12	32,753624	26,507246
6	1,3609	0,80	0,270	15	35,652172	26,507246
7	1,3607	1,42	0,479	18	37,101448	26,410628
8	1,3605	2,03	0,687	21	34,840058	26,507246
9	1,3603	2,65	0,895	24	32,101144	26,507246
10	1,3602	2,96	1	27	30,434782	26,217392
11	1,3601	3,27	1,104	30	29,729468	26,357488
12	1,3600	3,58	1,208	33	28,439613	26,217392
13	1,3600	3,58	1,208	36	27,05314	26,120773
14	1,3601	3,27	1,104	39	27,05314	26,024155
15	1,3602	2,96	1	42	26,859903	26,927536
16	1,3602	2,96	1	45	26,859903	26,9256524
17	1,3602	2,96	1	48	26,859903	26,830918
18	1,3602	2,96	1	51	27,246376	26,7343
19	1,3602	2,96	1	54	27,149758	26,637682
20	1,3602	2,96	1	57	27,149758	26,7343
21	1,3602	2,96	1	60	27,05314	26,637682

**Tabela E.4. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 4**

Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 3,27$   
 Altura do leito fixo,  $h = 10$  cm  
 Vazão de operação,  $Q = 4,4$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 52,00 g  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°C  
 Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C % Metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 3,27	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3611	0,18	0,056	0	27,82609	28,19572
2	1,3611	0,18	0,056	3	28,69565	27,14976
3	1,3611	0,18	0,056	6	27,92271	26,95652
4	1,361	0,49	0,150	9	35,55556	27,05314
5	1,3608	1,11	0,339	12	39,03382	27,24639
6	1,3605	2,03	0,622	15	38,26087	27,82069
7	1,3603	2,65	0,811	18	35,65217	27,24638
8	1,3602	2,96	0,905	21	32,46377	27,82609
9	1,3601	3,27	1	24	35,07247	27,34299
10	1,3599	3,89	1,188	27	31,11111	27,72295
11	1,3601	3,27	1	30	34,58937	27,34299
12	1,3601	3,27	1	33	31,20773	27,72947
13	1,3601	3,27	1	36	30,14493	27,53623
14	1,3601	3,27	1	39	30,14493	27,34299
15	1,3601	3,27	1	42	30,14493	27,43961
16	1,3601	3,27	1	45	29,56522	28,21253
17	1,3601	3,27	1	48	29,37198	28,01932
18	1,3601	3,27	1	51	28,88889	28,01932
19	1,3601	3,27	1	54	29,08213	27,82609
20	1,3601	3,27	1	57	28,88889	28,01932
21	1,3601	3,27	1	60	28,79227	28,01932

**Tabela E.5. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 5**

Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 5,44$   
 Altura do leito fixo,  $h = 10$  cm  
 Vazão de operação,  $Q = 4,4$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 52,59 g  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°C  
 Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C % Metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 5,44	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3607	1,42	0,261	0	27,826086	26,811594
2	1,3607	1,42	0,261	3	27,536232	26,956522
3	1,3606	1,72	0,318	6	30,724638	26,956522
4	1,3607	1,42	0,261	9	33,043448	26,956522
5	1,3602	2,96	0,545	12	35,072464	27,536232
6	1,3598	4,20	0,772	15	37,101144	27,681159
7	1,3596	4,81	0,886	18	39,130436	27,826086
8	1,3595	5,12	0,943	21	38,840580	27,681159
9	1,3594	5,44	1	24	36,811596	27,681159
10	1,3593	5,74	1,056	27	32,173392	27,826086
11	1,3594	5,44	1	30	30,724638	27,681159
12	1,3594	5,44	1	33	30,434782	27,536232
13	1,3594	5,44	1	36	30,434782	27,391304
14	1,3594	5,44	1	39	30,144928	27,536232
15	1,3594	5,44	1	42	30,144928	27,243676
16	1,3594	5,44	1	45	30,000000	27,101449
17	1,3594	5,44	1	48	29,855072	26,956522
18	1,3594	5,44	1	51	29,710145	26,811594
19	1,3594	5,44	1	54	29,710145	26,811594
20	1,3594	5,44	1	57	29,565218	26,811594
21	1,3594	5,44	1	60	29,275362	26,521739

**Tabela E.6. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 6**

Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 4,82$   
 Altura do leito fixo,  $h = 10$  cm  
 Vazão de operação,  $Q = 10,0$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 55,90 g  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°C  
 Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C %, metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 4,82	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3607	1,42	0,294	0	28,502416	26,956522
2	1,3607	1,42	0,294	3	30,144928	27,05314
3	1,3606	1,72	0,358	6	31,014492	27,149758
4	1,3604	2,34	0,487	9	33,913044	27,149758
5	1,3602	2,96	0,615	12	34,202900	27,149758
6	1,3598	4,20	0,871	15	37,101448	27,246376
7	1,3597	4,51	0,935	18	38,260868	27,05314
8	1,3596	4,82	1	21	34,782608	27,149758
9	1,3595	5,12	1,064	24	31,884058	27,246376
10	1,3594	5,43	1,128	27	30,434782	27,246376
11	1,3595	5,12	1,064	30	28,502416	27,246376
12	1,3596	4,82	1	33	28,405798	27,246376
13	1,3596	4,82	1	36	28,309179	27,246376
14	1,3596	4,82	1	39	28,212561	27,536231
15	1,3596	4,82	1	42	28,309179	27,246376
16	1,3596	4,82	1	45	28,212561	27,439613
17	1,3596	4,82	1	48	28,115942	27,246377
18	1,3596	4,82	1	51	28,019323	27,246376
19	1,3596	4,82	1	54	28,019323	27,342995
20	1,3596	4,82	1	57	27,922705	27,342995
21	1,3596	4,82	1	60	27,826086	27,246376

**Tabela E.7. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 7**Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 5,13$ Altura do leito fixo,  $h = 20$  cmVazão de operação,  $Q = 4,4$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 102,80 g

Temperatura do banho termostatzado = 20°C

Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C %, metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 5,13	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3609	0,80	0,156	0	29,565218	27,536232
2	1,3609	0,80	0,156	3	30,144928	27,63285
3	1,3609	0,80	0,156	6	31,014492	27,536232
4	1,3608	1,11	0,216	9	33,913044	27,729468
5	1,3605	2,03	0,397	12	35,652174	27,632801
6	1,3603	2,65	0,518	15	38,840058	27,826086
7	1,3601	3,27	0,638	18	41,159420	29,178744
8	1,3600	3,58	0,698	21	39,420288	29,468599
9	1,3598	4,20	0,819	24	37,681160	29,275362
10	1,3596	4,81	0,939	27	34,492752	29,275362
11	1,3595	5,13	1	30	30,144928	29,082126
12	1,3595	5,13	1	33	29,661836	29,082126
13	1,3594	5,13	1,060	36	29,661836	28,985508
14	1,3594	5,13	1,060	39	29,565218	28,985508
15	1,3595	5,13	1	42	29,468599	28,888889
16	1,3595	5,13	1	45	29,275362	28,888889
17	1,3595	5,13	1	48	28,985508	28,695652
18	1,3595	5,13	1	51	28,985508	28,695652
19	1,3595	5,13	1	54	28,792271	28,695652
20	1,3595	5,13	1	57	28,502415	28,695652
21	1,3595	5,13	1	60	28,405798	28,599034

**Tabela E.8. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 8**Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 4,82$ Altura do leito fixo,  $h = 20$  cmVazão de operação,  $Q = 10,0$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 102,38 g

Temperatura do banho termostatzado = 20°C

Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C %, metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 4,82	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3608	1,11	0,230	0	30,855072	28,985508
2	1,3607	1,42	0,294	3	31,434782	28,985508
3	1,3607	1,42	0,294	6	33,913044	30,144928
4	1,3607	1,42	0,294	9	33,913044	29,75854
5	1,3606	1,72	0,358	12	33,719807	29,75854
6	1,3603	2,65	0,551	15	35,526569	29,75854
7	1,3601	3,27	0,679	18	37,681160	29,565218
8	1,3598	4,20	0,871	21	39,130443	29,661836
9	1,3597	4,51	0,935	24	38,840580	29,565218
10	1,3596	4,82	1	27	36,231884	29,565218
11	1,3596	4,82	1	30	34,782608	29,758454
12	1,3594	5,43	1,128	33	33,333332	29,758454
13	1,3593	5,74	1,192	36	33,333332	29,565218
14	1,3596	4,82	1	39	32,946861	29,661836
15	1,3596	4,82	1	42	32,753624	29,661836
16	1,3596	4,82	1	45	32,463768	29,661836
17	1,3596	4,82	1	48	32,07729	29,661836
18	1,3596	4,82	1	51	31,980676	29,661836
19	1,3596	4,82	1	54	31,787439	29,468599
20	1,3596	4,82	1	57	31,594202	29,565218
21	1,3596	4,82	1	60	31,497584	30,434782

**Tabela E.9. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 9**

Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 4,20$   
 Altura do leito fixo,  $h = 15,0$  cm  
 Vazão de operação,  $Q = 7,2$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,30 g  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°C  
 Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C, % metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 4,20	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3611	0,18	0,044	0	28,115942	27,246376
2	1,3611	0,18	0,044	3	31,304348	27,246376
3	1,3611	0,18	0,044	6	33,913044	27,246376
4	1,3610	0,49	0,117	9	37,681160	27,439613
5	1,3609	0,80	0,191	12	38,260868	27,246376
6	1,3607	1,42	0,338	15	35,304348	27,439613
7	1,3604	2,34	0,558	18	31,014492	27,439613
8	1,3603	2,65	0,632	21	28,985508	27,342995
9	1,3600	3,58	0,852	24	29,082126	27,149759
10	1,3599	3,89	0,926	27	28,985508	27,246376
11	1,3598	4,20	1	30	28,985508	27,922705
12	1,3597	4,51	1,073	33	28,888889	29,371981
13	1,3598	4,20	1	36	28,695652	28,985508
14	1,3598	4,20	1	39	28,888889	28,792271
15	1,3598	4,20	1	42	28,599034	28,792271
16	1,3598	4,20	1	45	28,695652	28,695652
17	1,3598	4,20	1	48	28,599034	28,695652
18	1,3598	4,20	1	51	28,599034	28,695652
19	1,3598	4,20	1	54	28,405798	28,405797
20	1,3598	4,20	1	57	28,405798	28,599034
21	1,3598	4,20	1	60	28,309179	28,599034

**Tabela E.10. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 10**

Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 3,89$   
 Altura do leito fixo,  $h = 15$  cm  
 Vazão de operação,  $Q = 7,2$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,86 g  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°C  
 Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C %, metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 3,89	Tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3611	0,18	0,047	0	28,695652	28,797102
2	1,3611	0,18	0,047	3	32,463768	28,463768
3	1,3610	0,49	0,126	6	34,782608	28,70048
4	1,3609	0,80	0,206	9	36,231884	28,507246
5	1,3609	0,80	0,206	12	37,101144	28,217392
6	1,3606	1,72	0,444	15	35,945028	28,410628
7	1,3602	2,96	0,761	18	33,623188	28,31401
8	1,3601	3,27	0,841	21	32,946861	28,454107
9	1,3600	3,58	0,920	24	32,850242	28,690821
10	1,3599	3,89	1	27	32,753624	28,454107
11	1,3598	4,20	1,079	30	32,463768	28,927536
12	1,3597	4,51	1,158	33	32,173912	28,830818
13	1,3598	4,20	1,079	36	31,884058	28,927536
14	1,3599	3,89	1	39	31,980676	28,927536
15	1,3599	3,89	1	42	31,884058	28,830918
16	1,3599	3,89	1	45	31,497584	28,637682
17	1,3599	3,89	1	48	31,304347	28,830918
18	1,3599	3,89	1	51	31,207729	28,927536
19	1,3599	3,89	1	54	31,014492	28,7343
20	1,3599	3,89	1	57	30,821256	28,830918
21	1,3599	3,89	1	60	30,724638	28,830918

**Tabela E.11. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 11**

Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 4,20$   
 Altura do leito fixo,  $h = 15$  cm  
 Vazão de operação,  $Q = 7,2$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,30 g  
 Temperatura do banho termostatzado = 20°C  
 Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C, %, metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 4,20	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3610	0,49	0,117	0	28,115942	26,763285
2	1,3610	0,49	0,117	3	28,019323	26,956522
3	1,3610	0,49	0,117	6	27,922705	28,985507
4	1,3609	0,80	0,191	9	32,560387	28,115942
5	1,3607	1,42	0,338	12	36,231887	27,63285
6	1,3606	1,72	0,411	15	33,719807	27,246376
7	1,3602	2,96	0,705	18	31,207729	27,05314
8	1,3601	3,27	0,779	21	30,144927	27,149758
9	1,3600	3,58	0,852	24	30,048309	27,05314
10	1,3599	3,89	0,926	27	30,144928	27,246376
11	1,3598	4,20	1	30	34,68599	28,212561
12	1,3597	4,51	1,073	33	28,309179	26,956522
13	1,3598	4,20	1	36	28,405798	26,956522
14	1,3598	4,20	1	39	28,502416	26,956522
15	1,3598	4,20	1	42	28,502416	27,05314
16	1,3598	4,20	1	45	28,405798	27,149758
17	1,3598	4,20	1	48	28,309179	27,05314
18	1,3598	4,20	1	51	28,309179	27,246376
19	1,3598	4,20	1	54	28,309179	27,05314
20	1,3598	4,20	1	57	28,309179	27,246376
21	1,3598	4,20	1	60	28,309179	27,246376

**Tabela E.12. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 12**

Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 3,89$   
 Altura do leito fixo,  $h = 15$  cm  
 Vazão de operação,  $Q = 11,9$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,30 g  
 Temperatura do banho termostatzado = 20°C  
 Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C %, metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 3,98	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3611	0,18	0,047	0	29,468599	27,690821
2	1,3610	0,49	0,126	3	29,178744	27,410629
3	1,3610	0,49	0,126	6	31,884058	27,410628
4	1,3608	1,11	0,285	9	33,04380	27,217392
5	1,3606	1,72	0,444	12	35,304348	27,927536
6	1,3604	2,34	0,603	15	37,724638	27,637682
7	1,3601	3,27	0,841	18	36,304348	27,541063
8	1,3599	3,98	1	21	33,333333	27,347826
9	1,3598	4,20	1,079	24	30,173912	27,251208
10	1,3597	4,51	1,158	27	29,178744	27,057972
11	1,3599	3,89	1	30	28,985508	27,057972
12	1,3599	3,89	1	33	28,502416	27,057972
13	1,3599	3,89	1	36	28,599034	27,057972
14	1,3599	3,89	1	39	28,309179	27,057972
15	1,3599	3,89	1	42	28,405798	27,531401
16	1,3599	3,89	1	45	28,309179	27,531401
17	1,3599	3,89	1	48	28,215601	27,768116
18	1,3599	3,89	1	51	28,115942	27,531401
19	1,3599	3,89	1	54	28,019324	27,768116
20	1,3599	3,89	1	57	28,019323	27,768116
21	1,3599	3,89	1	60	27,92271	27,574879



**Tabela E.11. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 11**

Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 4,20$

Altura do leito fixo,  $h = 15$  cm

Vazão de operação,  $Q = 7,2$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,30 g

Temperatura do banho termostatzado = 20°C

Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C, %, metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 4,20	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3610	0,49	0,117	0	28,115942	26,763285
2	1,3610	0,49	0,117	3	28,019323	26,956522
3	1,3610	0,49	0,117	6	27,922705	28,985507
4	1,3609	0,80	0,191	9	32,560387	28,115942
5	1,3607	1,42	0,338	12	36,231887	27,63285
6	1,3606	1,72	0,411	15	33,719807	27,246376
7	1,3602	2,96	0,705	18	31,207729	27,05314
8	1,3601	3,27	0,779	21	30,144927	27,149758
9	1,3600	3,58	0,852	24	30,048309	27,05314
10	1,3599	3,89	0,926	27	30,144928	27,246376
11	1,3598	4,20	1	30	34,68599	28,212561
12	1,3597	4,51	1,073	33	28,309179	26,956522
13	1,3598	4,20	1	36	28,405798	26,956522
14	1,3598	4,20	1	39	28,502416	26,956522
15	1,3598	4,20	1	42	28,502416	27,05314
16	1,3598	4,20	1	45	28,405798	27,149758
17	1,3598	4,20	1	48	28,309179	27,05314
18	1,3598	4,20	1	51	28,309179	27,246376
19	1,3598	4,20	1	54	28,309179	27,05314
20	1,3598	4,20	1	57	28,309179	27,246376
21	1,3598	4,20	1	60	28,309179	27,246376

**Tabela E.12. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 12**

Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 3,89$

Altura do leito fixo,  $h = 15$  cm

Vazão de operação,  $Q = 11,9$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,30 g

Temperatura do banho termostatzado = 20°C

Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C %, metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 3,98	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3611	0,18	0,047	0	29,468599	27,690821
2	1,3610	0,49	0,126	3	29,178744	27,410629
3	1,3610	0,49	0,126	6	31,884058	27,410628
4	1,3608	1,11	0,285	9	33,04380	27,217392
5	1,3606	1,72	0,444	12	35,304348	27,927536
6	1,3604	2,34	0,603	15	37,724638	27,637682
7	1,3601	3,27	0,841	18	36,304348	27,541063
8	1,3599	3,98	1	21	33,333333	27,347826
9	1,3598	4,20	1,079	24	30,173912	27,251208
10	1,3597	4,51	1,158	27	29,178744	27,057972
11	1,3599	3,89	1	30	28,985508	27,057972
12	1,3599	3,89	1	33	28,502416	27,057972
13	1,3599	3,89	1	36	28,599034	27,057972
14	1,3599	3,89	1	39	28,309179	27,057972
15	1,3599	3,89	1	42	28,405798	27,531401
16	1,3599	3,89	1	45	28,309179	27,531401
17	1,3599	3,89	1	48	28,215601	27,768116
18	1,3599	3,89	1	51	28,115942	27,531401
19	1,3599	3,89	1	54	28,019324	27,768116
20	1,3599	3,89	1	57	28,019323	27,768116
21	1,3599	3,89	1	60	27,92271	27,574879

**Tabela E.13. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 13**Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 3,98$ Altura do leito fixo,  $h = 15$  cmVazão de operação,  $Q = 2,5$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,20 g

Temperatura do banho termostatizado = 20°C

Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C %, metano	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 3,98	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3611	0,18	0,047	0	29,758454	26,859903
2	1,3611	0,18	0,047	3	32,94686	26,47343
3	1,3611	0,18	0,047	6	34,975846	27,246377
4	1,3609	0,80	0,206	9	41,545893	27,149759
5	1,3608	1,11	0,285	12	36,908212	26,763285
6	1,3605	2,03	0,523	15	37,971016	27,2463767
7	1,3602	2,96	0,761	18	33,623189	27,342995
8	1,3600	3,58	0,920	21	30,241545	27,246377
9	1,3600	3,58	0,920	24	29,758454	26,086957
10	1,3599	3,89	1	27	30,821255	26,086957
11	1,3598	4,20	1,079	30	31,111111	25,89372
12	1,3598	4,20	1,079	33	30,821255	25,89372
13	1,3598	4,20	1,079	36	30,724637	27,826087
14	1,3599	3,89	1	39	30,048309	28,309179
15	1,3599	3,89	1	42	28,502416	27,149758
16	1,3599	3,89	1	45	27,922705	27,05314
17	1,3599	3,89	1	48	28,21256	26,956522
18	1,3599	3,89	1	51	27,536231	26,47343
19	1,3599	3,89	1	54	27,439613	26,280193
20	1,3599	3,89	1	57	27,439613	25,990338
21	1,3599	3,89	1	60	27,439613	25,990338

**Tabela E.14. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 14**Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 4,20$ Altura do leito fixo,  $h = 23,4$  cmVazão de operação,  $Q = 7,2$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 112,60 g

Temperatura do banho termostatizado = 20°C

Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C %, metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 4,20	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3611	0,18	0,044	0	27,72947	27,2637681
2	1,3611	0,18	0,044	3	27,92271	26,28018
3	1,3610	0,49	0,117	6	28,01932	26,18358
4	1,3610	0,49	0,117	9	28,01932	26,18358
5	1,3608	1,11	0,264	12	28,0193	26,8599
6	1,3605	2,03	0,485	15	29,27536	28,30918
7	1,3602	2,96	0,705	18	32,46377	28,4058
8	1,3601	3,27	0,779	21	33,81643	33,30918
9	1,3600	3,58	0,852	24	34,29952	28,30918
10	1,3599	3,89	0,926	27	34,68599	28,4058
11	1,3598	4,20	1	30	35,07246	28,4058
12	1,3597	4,51	1,073	33	34,87923	28,4058
13	1,3598	4,20	1	36	35,36232	28,4058
14	1,3598	4,20	1	39	35,74879	28,30918
15	1,3598	4,20	1	42	37,68116	28,30918
16	1,3598	4,20	1	45	35,07246	28,30918
17	1,3598	4,20	1	48	34,49275	28,30918
18	1,3598	4,20	1	51	33,91304	28,30918
19	1,3598	4,20	1	54	33,42995	28,4058
20	1,3598	4,20	1	57	30,25876	28,4058
21	1,3598	4,20	1	60	28,65897	28,50242

**Tabela E.15. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 15**

Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 4,20$   
 Altura do leito fixo,  $h = 6,6$  cm  
 Vazão de operação,  $Q = 7,2$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 31,0 g  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°C  
 Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C %, metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 4,203	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3611	0,18	0,044	0	28,405798	28,280193
2	1,3611	0,18	0,044	3	30,724638	28,376812
3	1,3610	0,49	0,117	6	33,434782	28,183575
4	1,3610	0,49	0,117	9	34,434782	28,086956
5	1,3608	1,11	0,264	12	33,434782	28,086956
6	1,3605	2,03	0,485	15	32,144928	28,560387
7	1,3602	2,96	0,705	18	30,855072	28,47343
8	1,3601	3,27	0,779	21	29,855072	28,376812
9	1,3600	3,58	0,852	24	29,661836	28,183575
10	1,3599	3,89	0,926	27	29,565218	28,797102
11	1,3598	4,20	1	30	29,275362	28,700483
12	1,3597	4,51	1,073	33	29,275362	28,700483
13	1,3598	4,20	1	36	29,275362	28,603865
14	1,3598	4,20	1	39	29,275362	28,603865
15	1,3598	4,20	1	42	28,985508	28,31401
16	1,3598	4,20	1	45	28,985508	28,217392
17	1,3598	4,20	1	48	28,985507	28,690821
18	1,3598	4,20	1	51	28,985508	28,830918
19	1,3598	4,20	1	54	28,695653	28,927536
20	1,3598	4,20	1	57	28,599034	28,743961
21	1,3598	4,20	1	60	28,502416	28,570049

**Tabela E.16. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n°- 16**

Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 2,34$   
 Altura do leito fixo,  $h = 15,0$  cm  
 Vazão de operação,  $Q = 7,2$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,50 g  
 Temperatura do banho termostatizado = 20°C  
 Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C %, metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 2,34	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3611	0,18	0,078	0	28,888889	28,797102
2	1,3610	0,49	0,210	3	28,888889	28,603865
3	1,3610	0,49	0,210	6	31,787439	28,507246
4	1,3608	1,11	0,473	9	33,806764	28,507246
5	1,3606	1,72	0,736	12	33,140097	28,603865
6	1,3605	2,03	0,868	15	34,507245	28,507246
7	1,3604	2,34	1	18	35,280195	28,507246
8	1,3604	2,34	1	21	36,710145	28,603865
9	1,3603	2,65	1,131	24	37,270531	28,507246
10	1,3602	2,96	1,263	27	35,323672	28,507246
11	1,3603	2,65	1,131	30	33,806764	28,603865
12	1,3604	2,34	1	33	32,463768	28,507246
13	1,3604	2,34	1	36	31,980675	28,507246
14	1,3604	2,34	1	39	31,400966	28,31401
15	1,3604	2,34	1	42	31,111111	28,31401
16	1,3604	2,34	1	45	30,724638	28,217392
17	1,3604	2,34	1	48	30,434782	28,217392
18	1,3604	2,34	1	51	30,434783	28,454107
19	1,3604	2,34	1	54	30,048309	28,444445
20	1,3604	2,34	1	57	29,951691	28,347826
21	1,3604	2,34	1	60	30,048309	28,294687

**Tabela E.17. Sistema Metanol-etanol: Corrida experimental n° - 17**

Concentração inicial, metanol,  $C_0 = 5,74$

Altura do leito fixo,  $h = 15,0$  cm

Vazão de operação,  $Q = 7,2$  cm<sup>3</sup>/s

Quantidade de zeólitas utilizadas = 76,80 g

Temperatura do banho termostatizado = 20°C

Temperatura ambiente = 27°C

dados	I.R	C, %, metanol	C/C <sub>0</sub> C <sub>0</sub> = 5,74	tempo	Sensor superior	Sensor inferior
1	1,3608	1,11	0,193	0	26,859903	26,376812
2	1,3608	1,11	0,193	3	26,956522	26,280193
3	1,3607	1,42	0,247	6	26,956522	26,183575
4	1,3606	1,72	0,301	9	27,05314	26,570048
5	1,3604	2,34	0,408	12	27,342995	26,763285
6	1,3601	3,27	0,569	15	28,985508	27,05314
7	1,3598	4,20	0,731	18	34,782608	28,405798
8	1,3597	4,51	0,784	21	35,942028	28,502416
9	1,3595	5,12	0,892	24	36,811595	28,695653
10	1,3594	5,43	0,946	27	37,584541	28,792271
11	1,3593	5,74	1	30	36,038648	28,695653
12	1,3593	5,74	1	33	34,782608	28,695653
13	1,3592	6,05	1,053	36	33,913044	28,115942
14	1,3592	6,05	1,053	39	33,623188	28,115942
15	1,3593	5,74	1	42	33,333332	28,405798
16	1,3593	5,74	1	45	33,140097	28,212561
17	1,3593	5,74	1	48	32,753624	28,212561
18	1,3593	5,74	1	51	28,753624	28,212561
19	1,3593	5,74	1	54	28,381643	28,309179
20	1,3593	5,74	1	57	28,062802	29,661836
21	1,3593	5,74	1	60	28,497584	29,758454

## **ANEXO F**

### **Parâmetros Utilizados na Modelagem dos Dados Experimentais**

Parâmetros utilizados na modelagem dos dados experimentais

### 1.1. Cálculo do coeficiente de difusão, do etanol em tolueno: ( $D_{AB}$ )

Para o cálculo do coeficiente de difusão foi utilizada a relação por Wilke e Chang (Bennett & Myers, 1978)

$$\frac{D_{AB} \cdot \mu_B}{T} = 7,4 \times 10^{-8} \frac{(X M_B)^{1/2}}{V_A^{0,6}}$$

onde

X = Parâmetro de associação do solvente, 1,0, para o tolueno,

### 1.2. Cálculo do Volume molar do etanol

Para o cálculo do volume molar do etanol foi utilizado a seguinte relação: (Perry & Chilton, 1980)

$$V_A = 0,285 V_c^{1,084}$$

onde

$V_c$  = volume crítico do etanol, 167 cm<sup>3</sup>/mol, (Smith & Van Ness).

### 1.3. Cálculo do Número de Reynolds

$$Re = \frac{\rho u_m D_p}{\mu}$$

onde

$u_m$  = velocidade média do fluido

#### 1.4. Cálculo do Número de Schmidt

$$Sc = \frac{\mu}{\rho \cdot D_{AB}}$$

#### Valores utilizados na modelagem

Densidade do tolueno, $\rho_B$	0,87 g/cm <sup>3</sup>	Volume crítico do etanol, $V_c$	60,848 cm <sup>3</sup> /mol
Densidade do etanol, $\rho_A$	0,788 g/cm <sup>3</sup>	Coefficiente de difusão do etanol, $D_{AB}$	2,646 x 10 <sup>-5</sup> cm <sup>2</sup> /s
Densidade do pellet, $\rho_{\text{solido}}$	1,267 g/cm <sup>3</sup>	Diâmetro da coluna	2,94cm
Viscosidade do tolueno, $\mu_B$	0,008g/cm.s	Área da seção transversal da coluna	6,78 cm
Peso Molecular do Tolueno	92,14	Diâmetro do pellet (esfera equivalente), $D_p$	0,2265 cm
Peso Molecular do Etanol	46,07		
Porosidade do Leito, $\epsilon$	0,46		
Constante de Langmuir, $b$	389g/g	(Almeida, 1997)	
$q_s$	12,98g/g	(Almeida, 1997)	

Tabela E.1. Parâmetros da Modelagem

Vazão de operação (cm <sup>3</sup> /s)	Velocidade Superficial (cm/s)	Velocidade intersticial (cm/s)	Número de Reynolds	Número de Schmidt	Número de Sherwood	Valores de $K_r$ (cm/s)	$\frac{R_p}{3k_f}$ (s <sup>-1</sup> )
2,5	0,37	0,80	19,72	347,52	43,69	0,00510	7,3987
4,4	0,65	1,41	34,71	347,52	52,65	0,00615	6,135
7,2	1,06	2,31	56,80	347,52	60,79	0,0071	5,3145
10,0	1,47	3,20	78,89	347,52	76,25	0,0089	4,239
11,9	1,75	3,81	93,87	347,52	85,97	0,01005	3,754