

ENGENHARIA DE PROCESSOS: DIMENSIONAMENTO, SIMULAÇÃO E ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DE SISTEMAS DE EVAPORAÇÃO MÚLTIPLO EFEITO DE INDÚSTRIAS DE CELULOSE *KRAFT*

Jamilly Marques Gasparoni

in memoriam

Universidade Federal de São João del-Rei,
Campus Alto Paraopeba, Departamento de
Engenharia Química e Estatística
Ouro Branco – MG

Cássia Regina Santos Nunes Almeida

Universidade Federal de São João del-Rei,
Campus Alto Paraopeba, Departamento
das Engenharias de Telecomunicações e de
Mecatrônica / Centro Federal de Educação
Tecnológica de Minas Gerais, Departamento de
Engenharia Elétrica

Ouro Branco / Belo Horizonte – MG

Gustavo Matheus de Almeida

Universidade Federal de Minas Gerais, Escola
de Engenharia, Departamento de Engenharia
Química
Belo Horizonte – MG

RESUMO: A Engenharia de Processos é a engenharia de sistemas para a indústria de processos. Com a sua abordagem multidisciplinar e sistemática, o seu objetivo final é gerar conhecimento sobre as operações. Com a crescente complexidade dos processos químicos e das restrições sobre aspectos econômicos, de segurança operacional e de produção limpa, o seu papel é ainda mais fundamental. No presente trabalho, após

a modelagem matemática e validação de um sistema de evaporação múltiplo efeito de indústrias de celulose *Kraft*, exploraram-se as suas etapas de dimensionamento de equipamentos, de simulação de novos cenários e de análise de sensibilidade de variáveis-chave de processo.

PALAVRAS-CHAVE: Análise de processos químicos, Engenharia de processos, Sistema de evaporação múltiplo efeito, Dimensionamento, Simulação, Análise de sensibilidade

ABSTRACT: Process Engineering is the systems engineering for the process industry. With its multidisciplinary and systematic approach, its ultimate goal is to generate knowledge about operations. With the increasing complexity of chemical processes and restrictions on economic, operational safety and clean production, its role is even more fundamental. In the present work, after the mathematical modeling and validation of a multiple-effect evaporation system of *Kraft* pulp mills, the steps of equipment sizing, simulation of new scenarios and sensitivity analysis of key process variables were explored.

KEYWORDS: Chemical process analysis, Process engineering, Multiple-effect evaporation system, Design, Simulation, Sensitivity analysis

1 | INTRODUÇÃO

Com o advento do computador digital nos anos 40, mudou-se, por completo, a capacidade de resolução de problemas. A partir de uma representação formal do sistema de interesse, passou-se a empregar um procedimento algorítmico baseado em expressões lógicas e equações matemáticas (KLATT; MARQUARDT, 2009). Nesse contexto, surgiu a Engenharia de Sistemas de Processos (PSE; *Process Systems Engineering*), ou simplesmente Engenharia de Processos, como uma disciplina da Engenharia Química. Para melhor entendimento, citam-se os seus dois pilares: a Teoria Geral de Sistemas e a Engenharia de Sistemas.

A Teoria Geral de Sistemas define, independentemente de contexto, o que é um *sistema*: um conjunto de unidades básicas, de comportamento conhecido, cujo foco é o entendimento das interações entre elas. A Engenharia de Sistemas refere-se aos aspectos necessários para a operação de um sistema, desde a formulação do problema até a avaliação de seu desempenho. A partir desses conceitos, dado um contexto de aplicação, como o de Engenharia Química, é necessário desenvolver métodos e ferramentas para o projeto (síntese) e a análise (o foco deste capítulo) de seus sistemas (os processos químicos). A sistematização do projeto e da análise de processos é decisiva para uma operação eficiente. A Figura 1 ilustra ambos os objetivos, conhecido o modelo do processo ou do produto. Em relação à análise (problema direto), dado o fluxograma do processo, os equipamentos e os dados de operação (a estrutura e morfologia molecular do reagente), o modelo é usado para prever índices de desempenho do processo (a estrutura, morfologia e funcionalidade do produto), a partir de simulações. Em relação ao projeto (problema inverso), de modo a se atender índices de desempenho do processo (propriedades de interesse do produto), o modelo é usado para definir as condições de entrada do processo ou do produto (KLATT; MARQUARDT, 2009). Desse modo, PSE é a engenharia de sistemas para a indústria de processo, e refere-se ao tratamento, de modo sistemático, de seu comportamento em geral. Sargent (2005) descreve a engenharia química como a “Engenharia de sistemas aplicada a problemas de processos industriais”.

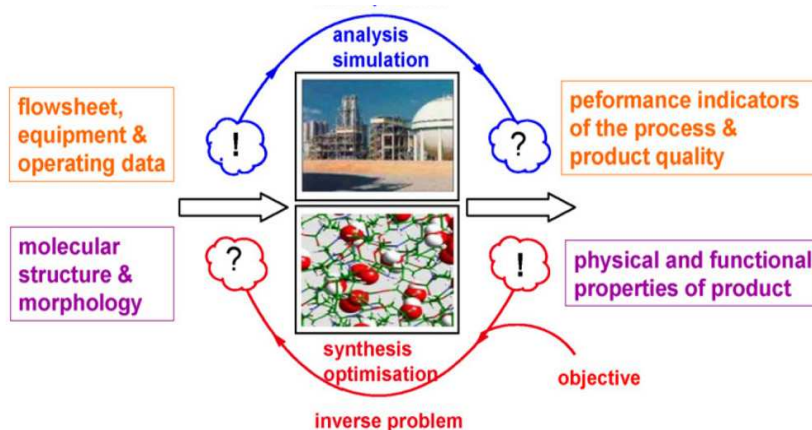


Figura 1: Síntese e análise de processo e produto, dado um modelo conhecido.
(Fonte: Klatt e Marquardt (2009))

Há um histórico de avanços em PSE (*Process Systems Engineering*) desde os anos 50, principalmente por causa dos impactos, econômico e social, das indústrias de óleo e gás. Utilizou-se esse termo, pela primeira vez, em 1961, em um volume especial de um simpósio da AIChE (*American Institute of Chemical Engineers*). Porém, a sua difusão aconteceu apenas a partir de um primeiro simpósio internacional, em Kyoto, no Japão, em 1982 (GLAVIC, 2012). Segundo Takamatsu (1983), “PSE é um campo acadêmico e tecnológico relacionado a metodologias para decisões em Engenharia Química.” Essas decisões referem-se ao planejamento, projeto, operação e controle de operações unitárias, processos químicos, ou da indústria química como um todo. A Figura 2 mostra o conceito de PSE segundo o autor, a partir de um conjunto de pilares: os fundamentos de engenharia química (termodinâmica, cinética de reação etc), a engenharia de equipamentos (reator, separador etc), os processos industriais (petroquímicos, papel e celulose etc) e as cadeias de valor (fábrica, política energética, questões sócio-econômicas). Portanto, PSE não diz respeito apenas ao processo industrial em si; porém, à cadeia de valor em seu entorno. Nessa direção, segundo a definição mais abrangente de Grossmann e Westerberg (2000), “PSE é uma série de métodos e ferramentas para melhorar o processo de tomada de decisão em relação à criação e operação da cadeia de valor de produtos químicos, ou seja, à descoberta, projeto, manufatura e distribuição de produtos químicos, em um contexto de objetivos conflitantes”. Segundo Glavic (2012), “o foco de PSE é, além do projeto, operação e controle, a otimização de processos químicos, físicos e biológicos, com o auxílio sistemático de métodos computacionais”. Portanto, o leque atual de PSE reúne os mais variados setores industriais, como por exemplo, petroquímico, mineração, material avançado, alimentício, farmacêutico e biotecnológico.

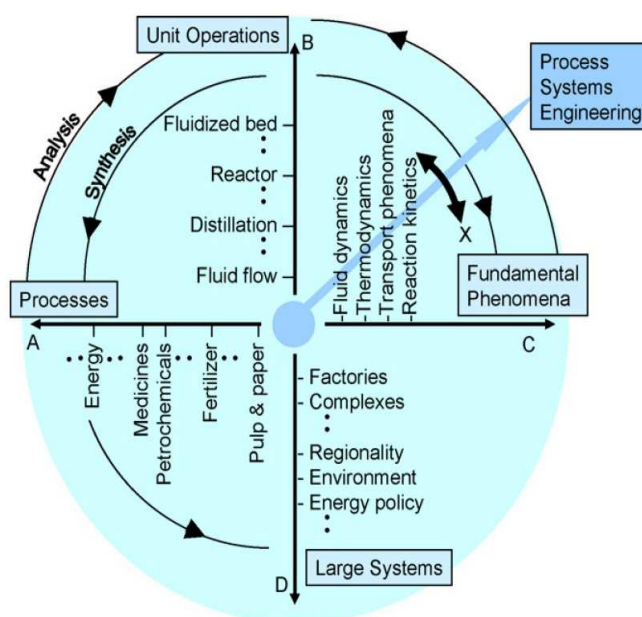


Figura 2: Natureza da Engenharia de Sistemas de Processos.

(Fonte: Takamatsu (1983))

PSE é uma disciplina com uma interface entre engenharia química, ciência da computação e métodos matemáticos. Combinam-se essas áreas para a construção, a implementação e a resolução dos modelos das unidades de processamento. Com a integração desses modelos, obtém-se o comportamento global do processo químico. Portanto, o foco de PSE é desenvolver metodologias e ferramentas para a modelagem, a simulação e a otimização de processos químicos, com o objetivo final de projeto, operação e controle de processos e produtos. Exemplos de aplicações: avaliação de rotas de produção (etapa de síntese) e de cenários de operação ou de falhas (etapa de análise). PSE tem se mostrado uma abordagem poderosa e flexível para o entendimento de sistemas químicos complexos (KLATT; MARQUARDT, 2009).

2 | OBJETIVO

O foco é a Análise de processos químicos. O objetivo é demonstrar o seu procedimento sistemático para o dimensionamento de equipamentos, a simulação de cenários operacionais e a análise de sensibilidade sobre variáveis-chave em processos. O estudo de caso é o sistema de evaporação múltiplo efeito de indústrias de celulose *Kraft*. Esse capítulo é baseado em Jamilly (2014) e Jamilly et al. (2017).

3 | SISTEMA DE EVAPORAÇÃO MÚLTIPLO EFEITO

O sistema de evaporação múltiplo efeito é uma das unidades de processamento de indústrias de celulose *Kraft*. O processo *Kraft* é o principal meio de obtenção de polpa de celulose, a matéria-prima para a fabricação de papel, em todo o mundo.

A etapa inicial desse processo é a polpação (cozimento) dos cavacos (pequenos pedaços) de madeira, cujo produto principal é a polpa de celulose, e cujo sub-produto é uma solução aquosa com compostos orgânicos (lignina, entre outros) e compostos inorgânicos de sódio e enxofre, denominada licor fraco. Essa notação é devido ao seu baixo teor de sólidos, entre 15 e 20% em massa. A viabilidade econômica do processo *Kraft* depende da recuperação e regeneração desses compostos inorgânicos para reuso na etapa de polpação. A primeira etapa nessa direção é a combustão desse licor em uma caldeira; porém, por causa de sua grande quantidade de água, é necessário, primeiramente, concentrá-lo. Esse é o papel do sistema de evaporação múltiplo efeito, isto é, aumentar a concentração do licor fraco acima de 60% em massa (VAKKILAINEN, 2000; SENAI, 1988).

O princípio dessa operação é a evaporação de parte da água do licor, que ocorre em um conjunto de trocadores de calor em série, denominados evaporadores. Para uma operação mais eficiente, o calor latente do vapor vivo (vapor de fonte externa; geralmente, a caldeira) ou do evaporado (a água evaporada do licor) do efeito anterior é usado como meio de aquecimento no efeito subsequente, à menor pressão. Esse

aproveitamento energético é o princípio fundamental de um sistema de evaporação múltiplo efeito. Um efeito é composto por um ou mais evaporadores (HOLMLUND; PARVIAINEN, 1999; VENKATESH; NGUYEN, 1985). A Figura 3 é um esquema com a configuração do sistema de evaporação múltiplo efeito usado como estudo de caso, composto por 6 efeitos (a quantidade usual), cada um com um evaporador. Tem-se a alimentação do licor fraco (ou diluído) no efeito 5 e a saída do licor forte (concentrado) no efeito 1 (ou seja, $5 \rightarrow 6 \rightarrow 4 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$). A sequência do fluxo de vapor é direta, com a alimentação de vapor vivo no efeito 1, e a saídas de evaporado (oriundo do efeito 6) e de condensado (oriundo do efeito 5) no efeito 6 (KUMAR et al., 2013).

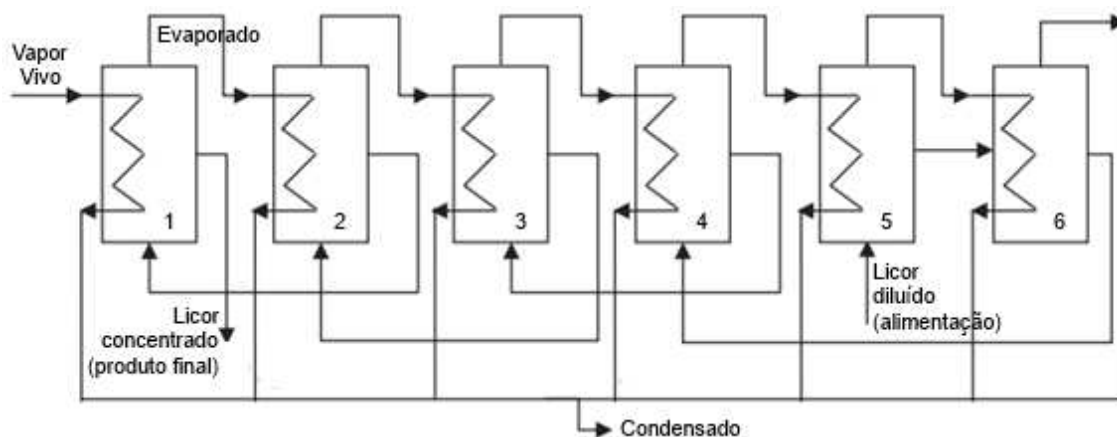


Figura 3: Esquema do sistema de evaporação de múltiplo efeito usado como estudo de caso.
(Fonte: Adaptado de Kumar et al. (2013))

4 | METODOLOGIA

A Análise de processos químicos é composta por duas etapas principais, com suas respectivas sub-etapas, conforme a seguir (PERLINGEIRO, 2011). Com fins didáticos, optou-se por apresentar cada sub-etapa de modo combinado com os resultados (seção subsequente).

- **Etapas Preparatórias**
 - Reconhecimento do processo
 - Modelagem matemática
 - Estimação de propriedades físicas e coeficientes técnicos
- **Etapas Executivas**
 - Dimensionamento
 - Simulação
 - Análise de sensibilidade

5 | APRESENTAÇÃO E DISCUSSÃO DE RESULTADOS

5.1 Etapas Preparatórias

Reconhecimento do processo: Refere-se à identificação dos equipamentos, das correntes de processo e de sua estrutura geral (reciclos etc), conforme o fluxograma do sistema de evaporação múltiplo efeito do estudo de caso (Figura 3).

Modelagem matemática do processo: Diz respeito à construção do modelo matemático do processo a partir dos modelos dos equipamentos e da estrutura do fluxograma de processo. Para o estudo de caso, o modelo matemático consiste em equações de balanço de massa para o vapor (Equação 1), o licor (Equação 2) e o soluto do licor (Equação 3); equações de balanço de energia para o vapor (Equação 4) e o licor (Equação 5), em cada efeito, conforme o princípio de conservação: acúmulo = entrada - saída + geração - consumo ; e na equação de capacidade (Equação 6), com a descrição global de transferência de calor em cada evaporador. Ao substituir as Equações 1 e 2 nas Equações 4 e 5, respectivamente, e igualá-las à Equação 6, obtêm-se duas equações, uma para o vapor e outra para o licor, para cada efeito. Desse modo, o modelo matemático final é composto por 13 equações, ao se considerar ainda a equação de balanço global de sólidos (Equação 3), e 19 variáveis (KUMAR et al., 2013; MCCABE et al., 2005). No quadro a seguir, a notação, os subscritos e as considerações do modelo matemático.

Notação: \dot{n} = vazão mássica (kg/s); X = concentração de sólidos do licor; H = entalpia específica (kJ/kg); q = taxa de transferência de calor (kJ/s); U = coeficiente global de transferência de calor ($W/(m^2 \cdot ^\circ C)$), uma medida da resistência total ao fluxo de calor do meio de aquecimento para o licor; A = área de troca térmica (m^2); T = temperatura ($^\circ C$).

Subscritos: e , s , lic , liq , vap , sat , e as , entrada, saída, licor, líquido, vapor, saturado e superaquecido, respectivamente.

Considerações: (1) Vapor de saída como líquido saturado (a partir das Equações 1 e 4, $q_s = \dot{m} \cdot \gamma$, em que $\dot{m}_e = \dot{m}_s = \dot{m}$ e γ = calor latente); (2) Não há perda de calor ($q_s = q_e$); (3) Não há perda de sólidos do licor (Equação 3); (4) Coeficientes globais de transferência de calor (U), constantes ([1160 (efeito 1), 1220, 1280, 1335, 1365, 1400 (efeito 6)] $W/(m^2 \cdot ^\circ C)$); (5) Configuração do fluxo do licor: efeito 5 (alimentação do licor diluído) \rightarrow 6 \rightarrow 4 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow efeito 1 (saída do licor concentrado); (6) Configuração do fluxo de vapor: efeito 1 (alimentação de vapor vivo) \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow efeito 6 (saídas de evaporado e de condensado) (KUMAR et al., 2013).

$$\dot{m}_e = \dot{m}_s \quad (1)$$

$$\dot{m}_e = \dot{m}_s + (\dot{m}_e - \dot{m}_s) \quad (2)$$

$$\dot{m}_e \cdot X_e = \dot{m}_s \cdot X_s \quad (3)$$

$$\dot{m}_e \cdot H_e = \dot{m}_s \cdot H_s + q_s \quad (4)$$

$$\dot{m}_e \cdot H_e + q_e = \dot{m}_s \cdot H_s + (\dot{m}_e - \dot{m}_s) \cdot H_s \quad (5)$$

$$q = U \cdot A \cdot (T_{vap,sat} - T_{lic,s}) \quad (6)$$

Ainda calcularam-se os índices usuais de desempenho de sistemas de evaporação múltiplo efeito, conforme as Equações 7 a 9 (MCCABE et al., 2005).

$$economia\ de\ vapor = massa_{\acute{a}gua\ evaporada} / massa_{vapor\ vivo} \quad (7)$$

$$capacidade\ de\ evapora\c{c}\tilde{a}o = massa_{\acute{a}gua\ evaporada} / \Delta t \quad (8)$$

$$consumo\ de\ vapor = capacidade / economia \quad (9)$$

Estimação de propriedades físicas e coeficientes técnicos: Refere-se à estimação de parâmetros e coeficientes contidos no modelo matemático. Para o licor, empregaram-se as correlações experimentais a seguir (HOLMLUND; PARVIAINEN, 1999; MASSE et al., 1986): Massa específica (kg/m³) (Equação 10), calor específico (kJ/(kg·K)) (Equação 11), viscosidade cinemática (mm²/s) (Equação 12), entalpia específica (kJ/kg) (Equação 13), e elevação do ponto de ebulição (EPE) (Equação 14). O EPE é a diferença entre as temperaturas de ebulição do licor e da água pura à mesma pressão, dado o teor de sólidos do licor. Observa-se que as propriedades do licor são função de sua concentração (X) e temperatura (T).

$$\rho = (997 + 649 \cdot X)[1,008 - 0,237 \cdot (T_{lic}/1000) - 1,94 \cdot (T_{lic}/1000)^2] \quad (10)$$

$$c_p = 4,216 \cdot (1 - X) + [1,675 + (3,31 \cdot T_{lic})/1000] \cdot X + (4,87 - 20 \cdot T_{lic}/1000) \cdot (1 - X) \cdot X^3 \quad (11)$$

$$\mu = \exp((-2,4273 + 3,3532 \cdot X + 3,7654 \cdot X^2 - 2,4907 \cdot X^3) + (6,1347e7 - 5,442e7 \cdot X + 21,915e7 \cdot X^2 + 17,042e7 \cdot X^3)/T_{lic}^3) \quad (12)$$

$$H = c_p(T_{lic} - T_{ref}) \quad (13)$$

$$EPE = (6,173 \cdot X - 7,48 \cdot X^{1,5} + 32,747 \cdot X^2) \cdot [1 + 0,006 \cdot (T_{vap} - 3,7316)] \quad (14)$$

Para a água, empregaram-se as correlações experimentais a seguir (HOLMLUND; PARVIAINEN, 1999): Entalpia da água (kJ/kg) (Equação 15), entalpia do vapor saturado (kJ/kg) (Equação 16), entalpia do vapor superaquecido (kJ/kg) (Equação 17), e calor latente de vaporização (kJ/kg) (Equação 18).

$$H_{liq} = \alpha \cdot T_{liq} + \beta \quad (\text{em que } \alpha = 4,1832 \text{ e } \beta = 0,127011) \quad (15)$$

$$H_{vap} = \gamma \cdot T_{vap} + \delta \quad (\text{em que } \gamma = 1,75228 \text{ e } \delta = 2.503,35) \quad (16)$$

$$H_{vap,sa} = \left[\frac{A \cdot (T_{vap,sa} - T_{vap,sat}) + B/2 \cdot (T_{vap,sa}^2 - T_{vap,sat}^2) + C/3 \cdot (T_{vap,sa}^3 - T_{vap,sat}^3) + D/4 \cdot (T_{vap,sa}^4 - T_{vap,sat}^4)}{MM_{\hat{a}gua}} \right]$$

(em que $A = 33,46, B = 0,6880 \cdot 10^{-2}, C = 0,7604 \cdot 10^{-5},$
 $D = -3,593 \cdot 10^{-9}, e MM_{\hat{a}gua}(\text{massa molecular}) = 18,01508 \text{ g/mol}$)

(17)

$$\lambda = 2.519,5 - 2,653 \cdot T_{vap} \quad (18)$$

5.2 Etapas Executivas

A segunda fase de uma Análise de processos químicos diz respeito às etapas executivas, ou seja, ao dimensionamento e à simulação. No dimensionamento, utiliza-se o modelo matemático para o cálculo das dimensões dos equipamentos e dos consumos de insumos e utilidades, de modo a atender as variáveis especificadas, subdivididas em condições conhecidas (CC) e em metas de projeto e de operação (MPO). Na simulação, com o mesmo modelo matemático, o objetivo é obter o comportamento do processo dimensionado sob cenários diferentes de operação, dado um conjunto de condições conhecidas (CC), definido com as dimensões dos equipamentos e as vazões e condições das correntes de alimentação (PERLINGEIRO, 2011).

Dado o modelo matemático com 13 equações e 19 variáveis (Tabela 1), e a especificação de 6 variáveis (Tabela 2), o número de incógnitas é 13, e o número de graus de liberdade (GL), zero. Portanto, seja para o dimensionamento ou para a simulação, o sistema de equações é consistente determinado, quando não é necessário um módulo de otimização para a sua resolução. Pode-se observar que há um sistema de equações não-lineares próprio de cada abordagem. Utilizou-se o método simultâneo para a resolução de ambos, com a função *fsolve* do *software* MATLAB (vR2009a; aquisição via projeto FAPEMIG Demanda Universal 01/2009, APQ-02544-09).

Variáveis
Área de troca térmica (a mesma entre os evaporadores)
Pressão de operação (em cada evaporador; efeito 1 – efeito 6)
Vazão mássica de entrada do vapor vivo (efeito 1)
Pressão de entrada do vapor vivo (efeito 1)
Vazão mássica de entrada do licor (efeito 5)
Temperatura de entrada do licor (efeito 5)
Concentração de entrada do licor (efeito 5)
Vazão mássica de saída do licor (em cada evaporador; efeito 1 – efeito 6)
Concentração de saída do licor (efeito 1)

Tabela 1: Modelo matemático: Variáveis.

Dimensionamento		Valor
Fluxo de licor(e) (kg/s) ⁽¹⁾		23,98
Concentração do licor(e) (kg/kg) ⁽¹⁾		0,10
Temperatura do licor(e) (°C) ⁽¹⁾		80
Pressão do vapor vivo (Pa) ⁽¹⁾ (ou T = 139 °C)		3,510×10 ⁵
Concentração do licor(s) (kg/kg) ⁽²⁾		0,5
Pressão de operação (efeito 6) (Pa) ⁽²⁾		11.727
Simulação		Valor
Fluxo de licor(e) (kg/s) ⁽¹⁾		23,98
Concentração do licor(e) (kg/kg) ⁽¹⁾		0,10
Temperatura do licor(e) (°C) ⁽¹⁾		80
Pressão do vapor vivo (Pa) ⁽¹⁾ (ou T = 139 °C)		3,510×10 ⁵
Fluxo de vapor vivo (kg/s) (perturbação de +5%) ⁽¹⁾		4,4586
Área de troca térmica (a mesma entre os evaporadores) (m ²) ⁽¹⁾		554,4000

Tabela 2: Variáveis especificadas: Dimensionamento e Simulação, conforme Kumar et al. (2013) ((e) = entrada efeito 5 e (s) = saída efeito 6).

⁽¹⁾ Condições conhecidas.

⁽²⁾ Metas de projeto e de operação.

5.2.1 Dimensionamento

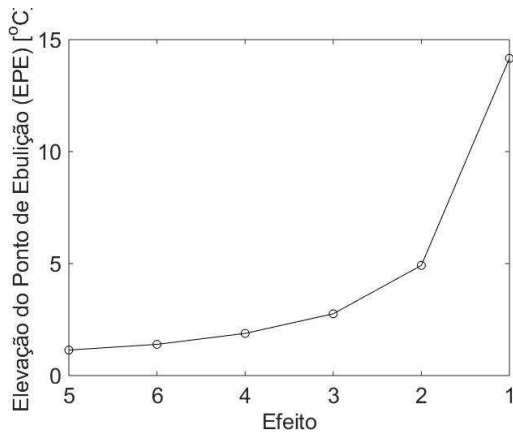
A Tabela 3 contém o resultado da etapa de dimensionamento, com os valores para as variáveis do vapor e do licor em cada efeito, além dos índices de desempenho. Validou-se esse resultado, e portanto, o modelo matemático (subseção 5.1), ao compará-lo com aquele em Kumar et al. (2013) (valores entre parênteses). Pode-se observar que a área de troca térmica, comum a cada evaporador, é igual a 554,4 m², e a vazão mássica de vapor vivo, a 4,2 kg/s.

Variável / Efeito	1	2	3	4	5	6
Licor						
Concentração(e) (kg/kg)	0,2806 (0,2883)	0,2013 (0,2067)	0,1606 (0,1639)	0,1384 (0,1401)	0,1	0,1151 (0,1157)
Concentração(s) (kg/kg)	0,5	0,2806 (0,2883)	0,2013 (0,2067)	0,1606 (0,1639)	0,1151 (0,1157)	0,1384 (0,1401)
Vazão(e) (kg/s)	8,5457 (8,3173)	11,9117 (11,6031)	14,9256 (14,627)	17,3247 (17,1105)	23,98	20,8200 (20,7300)
Vazão(s) (kg/s)	4,7960 (4,7960)	8,5457 (8,3173)	11,9117 (11,6031)	14,9256 (14,627)	20,8200 (20,7300)	17,3247 (17,1105)
Temperatura(e) (°C)	98,2855 (99,4662)	82,5867 (83,4384)	70,4266 (71,0077)	50,3945 (50,419)	80	61,1306 (61,3928)
Temperatura(s) (°C)	124,7940 (125,2157)	98,2855 (99,4362)	82,5867 (83,4384)	70,4266 (71,0077)	61,1306 (61,3928)	50,3945 (50,4190)
EPE (°C)	14,1631 (14,1838)	4,9192 (5,1611)	2,7591 (2,8805)	1,8824 (1,9428)	1,1405 (1,1489)	1,394 (1,4190)
Calor específico (kg/(kg×K))	3,6404 (3,3006)	3,7804 (3,6275)	3,8572 (3,7704)	3,8962 (3,8507)	3,9913 (3,9506)	3,9516 (3,8924)
Vapor						

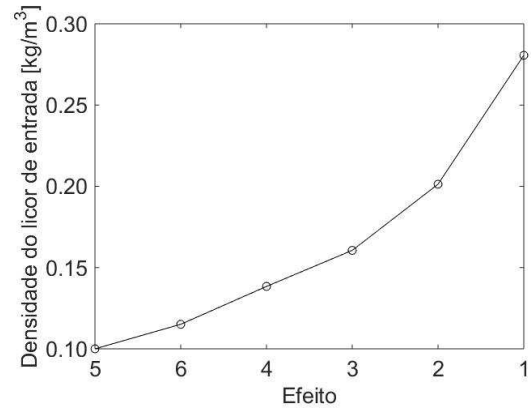
Temperatura(e) (°C)	139	110,6310 (111,0319)	93,3663 (94,3051)	79,8276 (80,5579)	68,5442 (69,0649)	59,9900 (60,2439)	
Temperatura(s) (°C)		110,6310 (111,0319)	93,3663 (94,3051)	79,8276 (80,5579)	68,5442 (69,0649)	59,9900 (60,2439)	49
Vazão(e) (kg/s)		4,2463 (3,8028)	3,7497 (3,5213)	3,3659 (3,2858)	3,0139 (3,0239)	2,3991 (2,4835)	3,1500 (3,2500)
Vazão(s) (kg/s)		3,7497 (3,5213)	3,3659 (3,2858)	3,0139 (3,0239)	2,3991 (2,4825)	3,1500 (3,2500)	3,5010 (3,6195)
Índice de desempenho							
Área (m ²)	554,4000 (591,9614)	-	-	-	-	-	-
Consumo de vapor (kg/s)	4,2463 (3,8028)	-	-	-	-	-	-
Capacidade de evaporação (kg/s)	19,1796 (19,1840)	-	-	-	-	-	-
Economia de vapor (kg/kg)	4,5167 (5,0447)	-	-	-	-	-	-

Tabela 3: Dimensionamento: Resultado e validação (variáveis especificadas em negrito, conforme a Tabela 2); resultado de Kumar et al. (2013) entre parêntesis; (e) = entrada e (s) = saída)

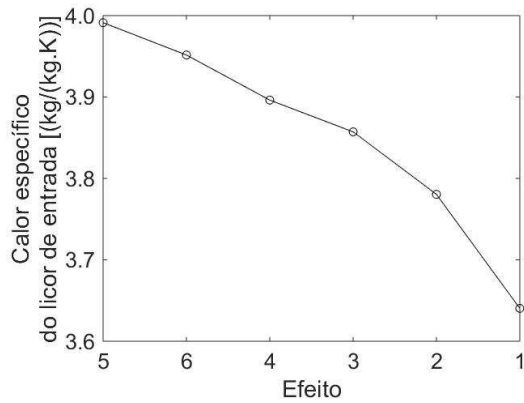
Segue um exemplo de uso desses resultados. A Figura 4 mostra o comportamento de propriedades do licor ao longo do sistema de evaporação múltiplo efeito. A elevação de ponto de ebulição (EPE) do licor, em (a), depende da quantidade e composição de seus compostos orgânicos e inorgânicos. Quanto mais diluído o licor, menor essa diferença de temperatura em relação à água pura à mesma pressão. Pode-se observar o seu menor valor para o efeito 5, que é o ponto de alimentação do licor. O EPE aumenta gradativamente até o efeito 1, que é o ponto de maior concentração do licor. O comportamento da densidade do licor, em (b), é similar ao do EPE, sendo, em baixas concentrações, em torno de 10% (valor de entrada no efeito 5), próximo a da água à pressão atmosférica (1000 kg/m³). O calor específico do licor, em (c), depende dos calores específicos das substâncias elementares. Quanto maior a sua concentração e temperatura, menor o seu valor, e conseqüentemente, de sua entalpia. O menor valor ocorre na saída do sistema de evaporação múltiplo efeito (efeito 6), quando a concentração e a temperatura do licor são máximos. A viscosidade dinâmica do licor (μ , em Pa·s), em (d), é obtida a partir da viscosidade cinemática (ν , em m²/s; Equação 12) ($\nu = \mu / \rho$, em que ρ é a densidade do licor, em kg/m³). Quanto menor o seu valor, mais fácil o escoamento do licor ao longo dos evaporadores. Com o seu aumento em concentrações mais altas de licor e a sua diminuição em temperaturas mais baixas de licor, o fluxo de licor em contra-corrente com o de vapor favorece o escoamento do licor, dada a sua máxima temperatura no efeito 1 (HOLMLUND; PARVIAINEN, 1999).



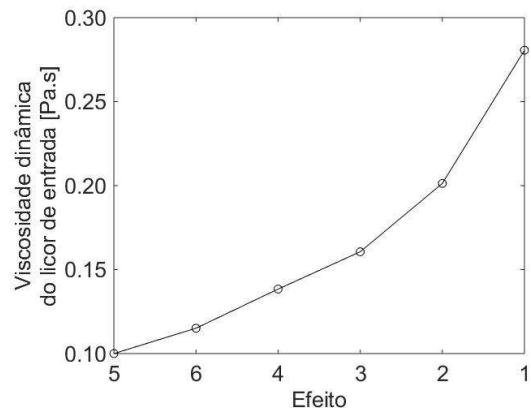
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 4: Propriedades físicas do licor em cada evaporador: (a) Elevação do ponto de ebulição, (b) densidade, (c) calor específico e (d) viscosidade dinâmica.

A etapa de simulação, a seguir, usa o modelo o conjunto de valores obtidos na etapa de dimensionamento, da vazão mássica de vapor vivo e da área de troca térmica dos evaporadores, como o caso-base para a análise de cenários.

5.2.2 Simulação

Após a obtenção e validação do modelo matemático, com o objetivo de se obter o comportamento do sistema de evaporação sob novos cenários, perturbou-se a vazão de vapor vivo em +5% (cenário 1) e em -5% (cenário 2), a partir do valor-base de 4,2 kg/h (Tabela 3). Desse modo, os dados de entrada para as simulações são aqueles do dimensionamento, exceto para a vazão de vapor vivo. A Tabela 4 contém o resultado da etapa de simulação para o cenário 1, com os valores para as variáveis do vapor e do licor em cada efeito, além dos índices de desempenho.

Pode-se observar que a concentração final do licor aumenta de 50% (caso-base; Tabela 3) para 62,9% (cenário 1) e diminui para 36,2% (cenário 2; não mostrado). Já a capacidade de evaporação da planta aumenta para 21,1 kg/s (cenário 1) e diminui para 17,4 kg/s (cenário 2), em relação ao valor-base de 19,2 kg/s (Tabela 3). Esse tipo de análise mostra a importância da etapa de simulação, com o objetivo de análise de

novos cenários e avaliação de sua viabilidade prática.

Variável / Efeito	1	2	3	4	5	6
Licor						
Concentração(e) (kg/kg)	0,3541	0,2330	0,1781	0,1498	0,1	0,1187
Concentração(s) (kg/kg)	0,6289	0,3541	0,2330	0,1781	0,1187	0,1498
Vazão(e) (kg/s)	6,7707	10,2882	13,4623	16,0022	23,98	20,1853
Vazão(s) (kg/s)	2,8680	6,7707	10,2882	13,4623	20,1853	16,0022
Temperatura(e) (°C)	90,1983	71,8326	58,5037	35,6423	80	48,4722
Temperatura(s) (°C)	124,0833	90,1983	71,8326	58,5037	48,4722	35,6423
EPE (°C)	20,9217	6,9675	3,3000	2,0746	1,1219	1,4506
Calor específico (kg/kg×K)	3,5097	3,7125	3,8150	3,8647	3,9913	3,9389
Vapor						
Temperatura(e) (°C)	139	103,1615	83,2308	68,5326	56,4290	47,3502
Temperatura(s) (°C)	103,1615	83,2308	68,5326	56,4290	47,3502	34,1916
Vazão(e) (kg/s)	4,4586	3,9026	3,5174	3,1740	2,5399	3,7946
Vazão(s) (kg/s)	3,9026	3,5174	3,1740	2,5399	3,7946	4,1830
Índice de desempenho						
Área (m ²)	554,4000	-	-	-	-	-
Consumo de vapor (kg/s)	4,4586	-	-	-	-	-
Capacidade de evap. (kg/s)	21,1115	-	-	-	-	-
Economia de vapor (kg/kg)	4,7349	-	-	-	-	-

Tabela 4: Simulação: Resultado após perturbação de +5% na vazão de vapor vivo (variáveis especificadas em negrito, conforme a Tabela 2); (e) = entrada e (s) = saída)

A Figura 5 mostra os perfis da concentração e da temperatura do licor ao longo dos evaporadores para o caso-base (etapa de dimensionamento) e os novos cenários (etapa de simulação). Esse tipo de gráfico é válido para prever o comportamento de variáveis-chave do processo em torno de seu ponto nominal de operação.

Concluindo, observa-se a importância da Análise de processos químicos para o projeto e a operação dos processos. Ao se conhecer o comportamento do processo no ponto nominal (etapa de dimensionamento) e no seu entorno (etapa de simulação), pode-se avaliar se o seu desempenho irá atender às metas de projeto e de operação, dado as condições conhecidas.

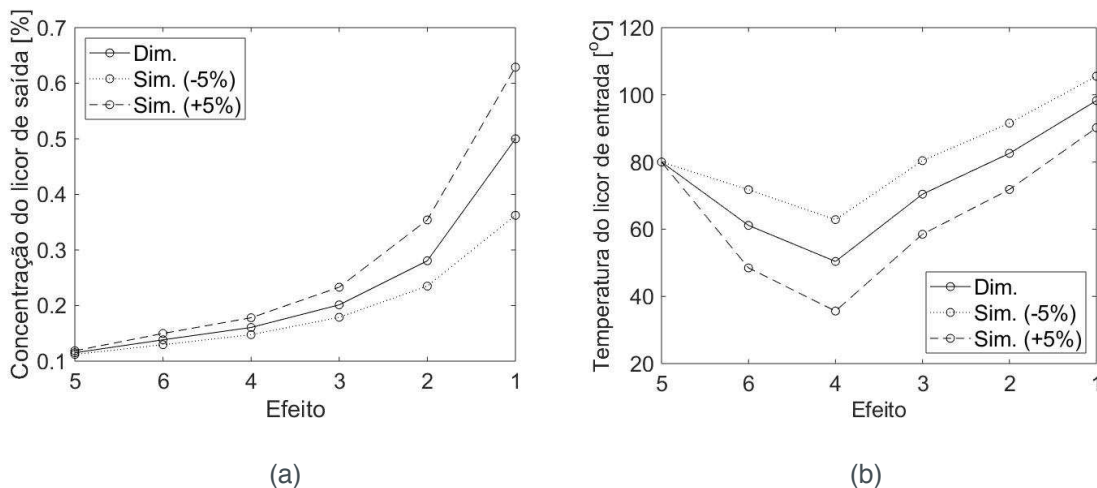


Figura 5: Comportamento da concentração e da temperatura do licor em cada evaporador nas etapas de dimensionamento (caso-base) e simulação (com perturbações de $\pm 5\%$ na vazão de vapor vivo em relação ao caso-base).

5.2.3 Análise de Sensibilidade

A Análise de processos químicos (dimensionamento e simulação) desenvolve-se em um ambiente de incertezas. As principais fontes de incerteza são os modelos matemáticos e os valores dos parâmetros físicos. Um modelo nem sempre é capaz de descrever, com precisão adequada, os fenômenos que ocorrem nos equipamentos e nas correntes de processo. A determinação de um parâmetro é geralmente a partir de experimentos, portanto, sujeita a erros experimentais, ou a partir de condições conhecidas, diferentes daquelas do processo. Esse é o caso do calor específico do licor e do coeficiente global de transferência de calor. Ainda é possível ter a sua variação durante a operação do processo, a partir de alterações estruturais nos equipamentos, como incrustações em evaporadores, ou devido à influência de outras unidades de processamento a montante e/ou a jusante (PERLINGEIRO, 2011).

Com a possível discrepância entre o comportamento previsto, segundo o modelo matemático, e aquele real, conforme o processo em operação, deve-se realizar uma análise de sensibilidade de variáveis relevantes para o processo, geralmente metas de projeto e de operação, em função de desvios em variáveis especificadas e parâmetros. Em resumo, o objetivo de um estudo de análise de sensibilidade é avaliar o efeito da incerteza, comum às etapas de modelagem matemática e de estimativa de propriedades e coeficientes, sobre o projeto (dimensionamento) e a operação (simulação) (PERLINGEIRO, 2011).

Para a sua formulação matemática, considerar uma variável relevante para o dimensionamento ou a simulação, e, um parâmetro de valor incerto. O valor exato da função Sensibilidade é obtido a partir de, em, ou seja, com os parâmetros e variáveis especificadas em seus respectivos valores-base. Para uma análise independente das unidades de e, dividi-se, respectivamente, pelos valores-base, e (Equação 19). Como o cálculo exato é geralmente inviável, utiliza-se uma aproximação numérica

(Equação 20), em que $\Delta\xi$ é o incremento em relação ao ponto-base. Desse modo, a função Sensibilidade da variável em relação ao parâmetro é dada conforme a Equação 21 (PERLINGEIRO, 2011).

$$S(F; \xi) = \left| \frac{\partial [F(\xi)/F(\bar{\xi})]}{\partial (\xi/\bar{\xi})} \right|_{\bar{\xi}} = \left| \frac{\partial F(\xi)}{\partial \xi} \right|_{\bar{\xi}} \cdot \frac{\bar{\xi}}{F(\bar{\xi})} \quad (19)$$

$$\frac{\partial F(\xi)}{\partial \xi} \approx \frac{F(\bar{\xi} + \Delta\xi) - F(\bar{\xi})}{\Delta\xi} \quad (20)$$

$$S(F; \xi) \approx \frac{F(\bar{\xi} + \Delta\xi) - F(\bar{\xi})}{\Delta\xi} \cdot \frac{\bar{\xi}}{F(\bar{\xi})} = \frac{F(\bar{\xi} + \Delta\xi) - F(\bar{\xi})}{F(\bar{\xi})} \cdot \frac{\bar{\xi}}{\Delta\xi} \quad (21)$$

Realizou-se um estudo de análise de sensibilidade sobre a concentração final do licor. A Figura 6 mostra a sua função Sensibilidade em relação à incerteza no coeficiente global de transferência de calor (U) do efeito 6, entre -5% e +5%, dado o seu valor nominal de 1400 W/(m²·°C). Por exemplo, para uma incerteza de +5% no parâmetro U, a sensibilidade da concentração final do licor é baixa, igual a 0,2%, ou seja, o seu valor passaria de 0,5 (valor de referência; Tabela 1) para 0,505.

Esse tipo de análise é útil para avaliar a margem de operação do processo sem perdas significativas de desempenho. Em outras palavras, dadas as fontes de incerteza, a análise de sensibilidade é importante para verificar a robustez das operações, ou seja, até que ponto é viável operar o processo sem comprometer, de modo significativo, as metas de projeto e de operação.

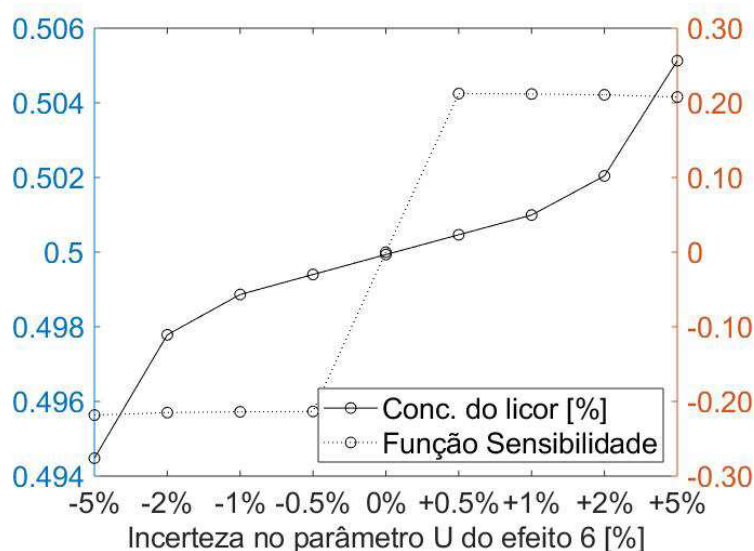


Figura 6: Análise de sensibilidade da concentração final do licor em relação ao coeficiente global de transferência de calor (U) do efeito 6, com valor nominal de nominal de 1400 W/(m²·°C).

6 | CONSIDERAÇÕES FINAIS

Demonstrou-se uma aplicação da Análise de processos químicos, com a exemplificação das atividades de dimensionamento de equipamentos, de simulação de novos cenários, e de análise de sensibilidade de variáveis-chave, após a modelagem matemática, seguida de validação, de um sistema de evaporação múltiplo efeito de indústrias de celulose *Kraft*. Ressalta-se o caráter sistemático e multidisciplinar da área de Engenharia de (Sistemas de) Processos (PSE; *Process Systems Engineering*), e o seu papel para um maior entendimento das operações. Com a maior complexidade dos processos, e as regulamentações mais restritivas sobre aspectos econômicos, de segurança operacional e de produção limpa, é crescente a sua importância para a manutenção e a expansão das indústrias químicas.

REFERÊNCIAS

GASPARONI, J.M. **Análise de processos químicos: Dimensionamento, simulação e análise de sensibilidade de sistemas de evaporação múltiplo efeito de indústrias de celulose Kraft**. Trabalho de Conclusão de Curso, Orientador: Gustavo Matheus de Almeida, Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, p. 47, 2014.

GASPARONI, J.M.; OLIVEIRA, L.A.F.; AGUIAR, M.O.; ALMEIDA, C.R.S.N.; ALMEIDA, G.M. **Dimensionamento, simulação e análise de sensibilidade de sistemas de evaporação múltiplo efeito de indústrias de celulose Kraft**. In: **Anais do XII Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica (COBEQ-IC)**, 3335-3340, São Paulo, Blucher, 2017. DOI: <http://www.dx.doi.org/10.5151/chemeng-cobeqic2017-417>

GLAVIC, P. Thirty Years of International Symposia on Process Systems Engineering, **Current Opinion in Chemical Engineering**, vol. 1, p. 421-429, 2012.

GROSSMANN, I. E.; WESTERBERG, A. W. Research challenges in process systems engineering. **AIChE Journal**, vol. 46, no. 9, p. 1700-1703, 2000.

HOLMLUND, K.; PARVIAINEN, K. Evaporation of black liquor, In: GULLICHSEN, J.; FOGELHOLM, C.J. (eds.) **Chemical pulping** (book 6B), Cap. 12, Helsinki: Fapet Oy, 1999.

KLATT, K.-U.; MARQUARDT, W. Perspectives for process systems engineering: Personal views from academia and industry, **Computers and Chemical Engineering**, vol. 33, no. 3, p. 536-550, 2009.

KUMAR, D.; KUMAR V.; SINGH, V. P. Modeling and dynamic simulation of mixed feed multi-effect evaporators in paper industry. **Applied Mathematical Modelling**, v. 37, p. 384-397, 2013.

MASSE, M. A.; KIRAN, E.; FRICKE, A. L. Freezing and glass transition phenomena in polymer-diluent mixtures, **Polymer**, v. 27, p. 619-622, 1986.

MCCABE, W. L.; SMITH, J. C.; HARRIOT, P. **Unit operations of chemical engineering**, 7th ed., Singapura: McGrawHill, 2005.

PERLINGEIRO, C. A. G. Engenharia de processos: **Análise, simulação, otimização e síntese de processos químicos**, 1a ed., São Paulo: Edgard Blücher, 2005.

SARGENT, R. Process systems engineering: A retrospective view with questions for the future,

Computers and Chemical Engineering, vol. 29, no. 6, p. 1237-1241, 2005.

SENAI (Serviço Nacional de Aprendizagem Industrial); IPT (Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo S.A.). **Celulose e papel: Tecnologia de fabricação da pasta celulósica**, vol. 1, 2a ed., São Paulo: IPT, 1988.

TAKAMATSU, T. The nature and role of process systems engineering. **Computers and Chemical Engineering**, vol. 7, no. 4, p. 203-218, 1983.

VAKKILAINEN, E. Chemical Recovery. In: Gullichsen, J. e Fogelholm, C.-J. (eds.), **Chemical pulping**, Book 6B, Papermaking and Science Technology Series, Cap. 11, B6-B34, FapetOy, 2000.

VENKATESH, V.; NGUYEN, X. N. Evaporation and concentration of black liquor, In: HOUGH, G. **Chemical recovery in the alkaline pulping process**, Cap. 3, Atlanta: Tappi, 1985.