

Otimização do processo de produção de cristais de $MgSO_4$ via software DWSIM e linguagem Python.

Guilherme Lucas Silva Pereira, Alexandre Bôscaro França.

Resumo

RESUMO – Neste trabalho foi realizado uma análise e modelamento matemático relacionada ao processo de obtenção de cristais de $MgSO_4$ no qual foram empregados três principais equipamentos: Trocador de Calor, Evaporador e Cristalizador. Para a simulação e otimização do processo de produção de cristais de sulfato de magnésio foram utilizados os softwares DWSIM (para simulação do trocador de calor) e, para simulação do evaporador de dois efeitos e do cristalizador, foi produzido um programa na linguagem Python. Os modelos matemáticos obtidos foram inseridos no Python e foram gerados gráficos comparativos os quais viabilizaram a escolha dos melhores parâmetros operacionais para cada equipamento, que possibilitou o dimensionamento dos mesmos. Dados termodinâmicos obtidos através da literatura técnica foram tratados utilizando-se os softwares Digitizer, Excel e OriginPro.

Palavras-chave: Otimização de processos, Trocador de Calor, Evaporador, Cristalizador, Sulfato de magnésio.

Introdução

Tendo em vista a grande importância do sulfato de magnésio para a saúde humana, e da alta demanda clínica do mesmo, as indústrias químicas nacionais atualmente operam em regimes contínuos utilizando-se de maquinários de grande porte para que seja possível e viável o abastecimento do público alvo. Portanto, cabe aos Engenheiros de Processos garantir a produção dos produtos finais com alta qualidade e baixa utilização de recursos naturais, sendo assim possível uma redução dos custos de produção, o que favorece a circulação desses produtos para a parcela mais pobre da população.

Neste trabalho foram utilizados os softwares DWSIM e a linguagem Python para realizar a simulação computacional e otimização do processo de produção de cristais de $MgSO_4$, com o objetivo de minimizar o consumo de vapor de água no processo produtivo.

Revisão Bibliográfica

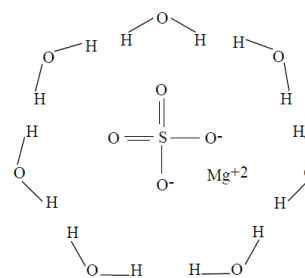
Rotas de produção de $MgSO_4$.

Devido à sua ampla utilização em diferentes áreas da sociedade, atualmente são conhecidas, através da literatura, diversas rotas de produção do $MgSO_4$.

O sulfato de magnésio pode ser encontrado de diferentes maneiras na natureza, mas as maneiras mais comuns que ocorrem naturalmente são o $MgSO_4$ monohidratado (advindo do processo de beneficiamento mineral da Kiersita) e o heptahidratado (advindo da Epsomita,

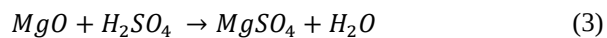
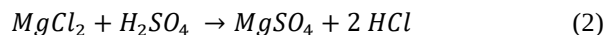
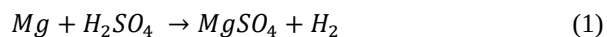
também conhecido como sal de Epson, ilustrado na Figura 1.) e anidro, de acordo com Rao *et al.*, (2007).

Figura 1. Estrutura química do $MgSO_4 \cdot 7H_2O$.



Fonte: Rao *et al.*, (2007).

Além de sua obtenção através de minerais, o $MgSO_4$ também pode ser obtido via reações químicas, tanto com o Mg (magnésio metálico) como reagente, como demonstrado na equação 1, com o $MgCl_2$ (equação 2) e com o MgO (equação 3), tal como com o $MgCO_3$ descrito na equação 4. Todas as reações foram baseadas nos trabalhos de Atkins *et al.* (2012).



Não obstante, é recorrente a produção de sulfato de magnésio heptahidratado pelo processo de beneficiamento da Epsomita. Contudo, para que seja possível a obtenção dos cristais de $MgSO_4 \cdot 7H_2O$ com certo nível de padronização, em escala industrial, é necessário a utilização de diversas operações unitárias de transferência de calor e massa em equipamentos industriais robustos.

Equipamentos envolvidos na produção de cristais de $MgSO_4 \cdot 7H_2O$.

Trocador de calor de casco e tubos

Processos de transferência de calor entre um fluido quente e um fluido frio, através de uma parede de um material condutor entre eles, são comuns em diversas áreas da Engenharia Química, segundo McCabe *et al.* (2005). Tais processos de transferência de calor recorrentemente acontecem nos trocadores de calor, contudo, há uma série de diferenças nos designs dos trocadores de calor utilizados na indústria química, onde não há um padrão bem definido a ser seguido, conforme Foust *et al.* (1982).

Ainda tendo como referência o descrito em Foust *et al.* (1982), pode-se associar o modelo de Trocadores de Calor de casco e tubos (Figura 2) como sendo uma boa opção para lidar com grandes áreas de troca térmica, tanto em plantas piloto como em plantas industriais, pois a configuração em feixes tubulares presos a um espelho possibilita, de maneira econômica e prática, uma estrutura robusta, com pouca possibilidade de vazamentos, se comparado ao modelo de placas planas.

O calor trocado entre os fluidos pode ser equacionado de acordo com a equação 5:

$$\dot{q} = -U \cdot A \cdot \Delta T_{ML} \quad (5)$$

Em que:

- $\dot{q}$ é a taxa de calor trocado entre os fluidos (quente e frio) [W];
- U é o coeficiente global de troca térmica [$W/m^2 \cdot ^\circ C$];
- A é a área de troca térmica [m^2];
- ΔT_{ML} é a média logarítmica das diferenças de temperatura [$^\circ C$], e pode ser calculado a partir da equação 6 para sistemas operando em contracorrente, ou pela equação 7, no caso de sistemas em fluxo concorrente:

$$\Delta T_{ML} = \frac{(T_{qs} - T_{fe}) - (T_{qe} - T_{fs})}{\ln \left(\frac{T_{qs} - T_{fe}}{T_{qe} - T_{fs}} \right)} \quad (6)$$

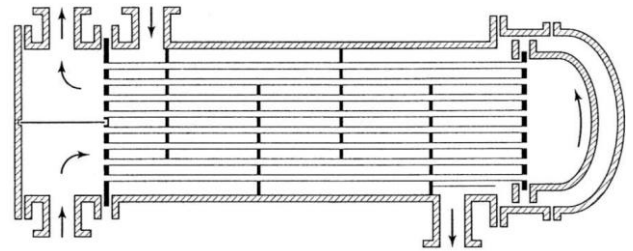
$$\Delta T_{ML} = \frac{(T_{qe} - T_{fe}) - (T_{qs} - T_{fs})}{\ln \left(\frac{T_{qe} - T_{fe}}{T_{qs} - T_{fs}} \right)} \quad (7)$$

Em que:

- T_{qe} é a temperatura do fluido quente que entra no equipamento;
- T_{qs} é a temperatura do fluido quente que sai do equipamento;
- T_{fe} é a temperatura do fluido frio que entra no equipamento;
- T_{fs} é a temperatura do fluido frio que sai do equipamento;

Para sistemas de fluxo misto, como ilustrado na Figura 2, se faz necessário a utilização de um fator de correção ao ΔT_{ML} , o que causa a seguinte alteração na equação 5:

Figura 2. Trocador de calor de fluxo misto (1-2).



Fonte: (McCabe *et al.*, 2005).

$$q = -U \cdot A \cdot \Delta T_{ML} \cdot F_{MLDT} \quad (8)$$

No qual, F_{MLDT} pode ser determinado através de diagramas disponíveis na literatura.

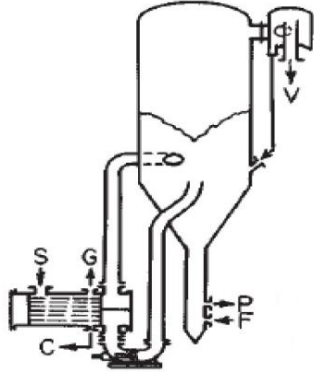
Evaporador contínuo de circulação forçada com tubos submersos em múltiplos efeitos

Segundo a definição presente em Foust *et al.* (1982) a evaporação pode ser definida como uma operação unitária na qual ocorre a concentração de uma solução através da ebulição do solvente. Apesar de apresentar diversas variantes em relação à sua construção, podemos definir, de maneira geral, que um evaporador contínuo é constituído basicamente de um trocador de calor (para que seja possível a ebulição da solução diluída) e de uma câmara de evaporação, na qual ocorre a separação entre produto concentrado e vapor de solvente.

Dentre os diversos tipos de evaporadores industriais mais utilizados, destacam-se, principalmente para concentração de soluções salinas diluídas, o modelo de evaporador de circulação forçada com tubos submersos, como ilustrado na Figura 3.

Segundo o relatado em Perry *et al.* (2008), este modelo se sobressai em relação aos demais para a utilização com salmouras pois, no interior dos tubos, ocorre apenas aquecimento da solução salina, sem evaporação, o que contribui para uma considerável diminuição de incrustação no interior dos tubos, o que aumenta a vida útil do equipamento e diminui a necessidade de manutenção periódica.

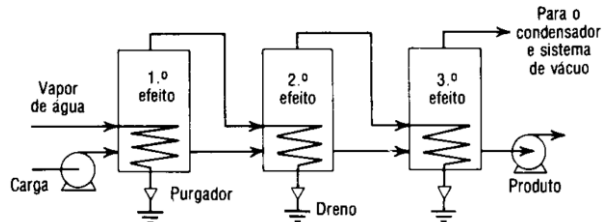
Figura 3. Evaporador de tubo submerso com circulação forçada.



Fonte: (Tadini, *et al.*, 2018).

No entanto, com o intuito de diminuir os gastos com vapor de aquecimento, que, de acordo com os trabalhos de Foust *et al.* (1982) é o principal custo envolvido no processo de uma operação evaporativa industrial, o que frequentemente ocorre é a utilização de evaporação a múltiplo efeito, conforme ilustrado pela Figura 4. Sua grande vantagem é que, ao contrário do que ocorre em uma evaporação a um único efeito (um único evaporador), quando se trabalha com mais de um efeito, pode-se reutilizar o vapor gerado no primeiro efeito como vapor de aquecimento do segundo efeito, o que reduz os gastos com vapor de caldeira, além de também reduzir o consumo industrial de água.

Figura 4. Esquema de um evaporador com três efeitos, com alimentação direta.



Fonte: (Foust, *et al.*, 1982).

Um dos principais parâmetros que deve ser observado e equacionado durante o projeto de um evaporador de um ou mais efeitos é a elevação do ponto de ebulição (EPE),

que ocorre em decorrência da concentração de sal dissolvido na solução aquosa. Uma das maneiras mais práticas de se equacionar a EPE, segundo Atkins *et al.*, (2012), é o que se observa através da equação 9:

$$EPE[K] = k_B \cdot i \cdot m \quad (9)$$

Em que:

- k_B é a constante ebuliométrica do solvente [$K \cdot kg \cdot mol^{-1}$];
- i é o fator de Van't Hoff (adimensional);
- m é a molalidade [$mol \cdot kg^{-1}$] e pode ser expressa de acordo com a equação 10:

$$m = \frac{x_{pi}}{M \cdot (1 - x_{pi})} \quad (10)$$

Na qual M representa o peso molecular do soluto, e deve ser expressado em kg/mol , e x_{pi} é a concentração de soluto na corrente de produtos do estágio i .

Além disso, para fins de projeto, faz-se necessário a realização de balanços de massa, energia e componente globais para o evaporador em múltiplos efeitos, conforme descrito pelas equações 11, 12 e 13, respectivamente, para o caso de um evaporador operando em dois efeitos:

$$\dot{m}_{S1} - \dot{m}_{C1} - \dot{m}_{C2} + \dot{m}_{F1} - \dot{m}_{V2} - \dot{m}_{P2} = 0 \quad (11)$$

$$\dot{m}_{S1}h_{S1} - \dot{m}_{C1}h_{C1} - \dot{m}_{C2}h_{C2} + \dot{m}_{F1}h_{F1} - \dot{m}_{V2}h_{V2} - \dot{m}_{P2}h_{P2} = 0 \quad (12)$$

$$\dot{m}_{F1}x_{F1} - \dot{m}_{P2}x_{P2} = 0 \quad (13)$$

Em que:

- $\dot{m}_{Si}$ é a taxa mássica da corrente de aquecimento no estágio i , e h_{Si} sua entalpia associada;
- $\dot{m}_{Ci}$ é a taxa mássica da corrente de condensado que deixa o equipamento no estágio i , e h_{Ci} sua entalpia associada;
- $\dot{m}_{Fi}$ é a taxa mássica da corrente de alimentação que entra no estágio i , e h_{Fi} sua entalpia associada;
- $\dot{m}_{Pi}$ é a taxa mássica da corrente de produtos que deixa o estágio i , h_{Pi} sua entalpia associada.

Por fim, ainda podemos representar o calor trocado entre os fluidos no interior do trocador de calor (devido à EPE), pode ser equacionado de acordo com a equação 14:

$$\dot{q} = \dot{m}_{Si} \cdot \Delta H_{Si(vap)} = U \cdot A \cdot EPE \quad (14)$$

Na qual $\Delta H_{Si(vap)}$ é a diferença de entalpia de vaporização no estágio i .

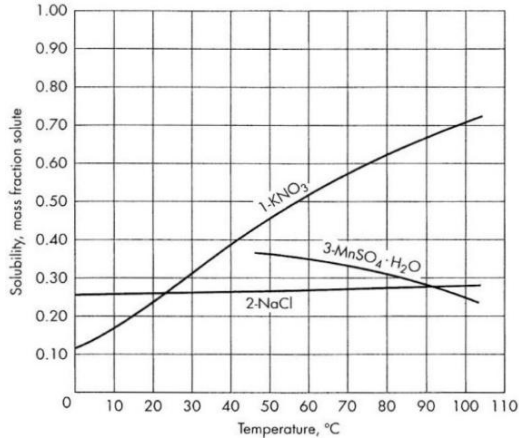
Cristalizador Oslo

De acordo com a definição presente em Foust *et al.* (1982), “um cristal é uma configuração muito organizada de átomos, de moléculas ou de íons dispostos em redes espaciais tridimensionais”. Acontece que, ao longo de toda a história da indústria química, por diversos motivos, sempre foi desejada a produção de cristais de diversas substâncias, em especial dos sais, com forma e tamanho contendo certa uniformidade e padronização.

Para que seja possível se realizar o dimensionamento de um equipamento industrial de cristalização, é de suma importância conhecer a fundo as características do sal a precipitar e como as propriedades do sal de interesse se comportam com a variação das propriedades de estado no sistema.

Dentre os diferentes sais que ocorrem na natureza podem ser observados comportamentos diversos em relação à sua curva de solubilidade, conforme demonstrado pela Figura 5, na qual é possível perceber comportamentos totalmente distintos em relação a solubilidade com a variação de temperatura, para três sais distintos.

Figura 5. Curvas de solubilidade para diferentes sais, em solução aquosa.



Fonte: (McCabe, *et al.*, 2005).

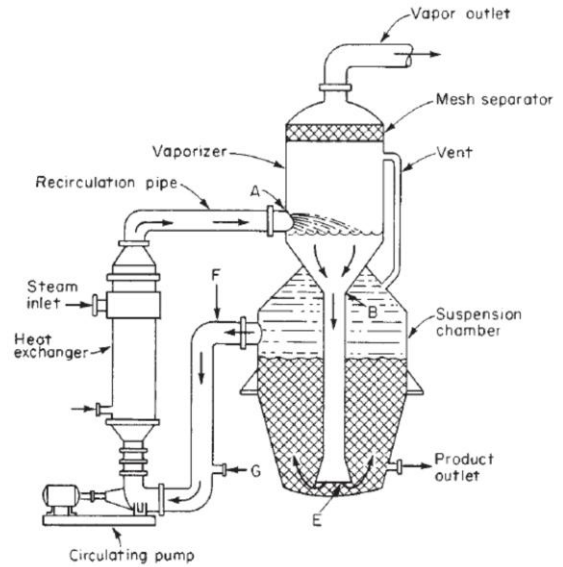
Dentro do processo de cristalização em escala industrial tem-se por equipamento em destaque o Cristalizador. Diferentemente dos Evaporadores que, apesar de suas diferenças relativas à construção, todos operam com a mesmo princípio termodinâmico de concentração da solução devido à evaporação do solvente, no caso dos Cristalizadores, podemos ter entre suas variantes mais de um princípio fundamental de funcionamento. Os quais, segundo Foust *et al.* (1982), se subdividem da seguinte maneira:

- Cristalizadores que efetuam a precipitação do soluto através do resfriamento da solução concentrada;

- Cristalizadores que conseguem a precipitação mediante a evaporação de uma solução (Cristalizador-evaporador);
- Cristalizadores que conseguem realizar a precipitação pela evaporação adiabática do solvente e pelo resfriamento;

Dentre as variantes de modelos operacionais de cristalizadores citados acima destaca-se, mais especificamente no segundo tipo citado (Cristalizador-evaporador), o Cristalizador do tipo Oslo (Figura 6):

Figura 6. Representação esquemática de um Cristalizador Industrial do tipo Oslo.



Fonte: (Foust, *et al.*, 1982).

Seu destaque deve-se, além de sua grande utilização industrial, à sua capacidade de produção de cristais altamente uniformes, grandes e arredondados. Tal fato se deve a presença de um classificador de partículas, o qual possui um sistema que permite a passagem de apenas os cristais de diâmetro maior, fazendo com que os cristais menores continuem em suspensão, para que aconteça o crescimento do cristal, para sua posterior classificação.

De maneira análoga ao que ocorre nos evaporadores contínuos, para que seja possível projetar e dimensionar os equipamentos de cristalização, fazem-se necessários os cálculos de balanço de massa, energia e componentes, como exposto nas equações 15, 16 e 17, respectivamente:

$$\dot{m}_{Si} - \dot{m}_{Ci} + \dot{m}_{Fi} - \dot{m}_{Vi} - \dot{m}_{Pi} = 0 \quad (15)$$

$$\dot{m}_{Si}h_{Si} - \dot{m}_{Ci}h_{Ci} + \dot{m}_{Fi}h_{Fi} - \dot{m}_{Vi}h_{Vi} - \dot{m}_{Pi}h_{Pi} = 0 \quad (16)$$

$$\dot{m}_{Fi}x_{Fi} - \dot{m}_{Pi}x_{Pi} = 0 \quad (17)$$

Outro parâmetro de extrema importância na análise e projeto de Cristalizadores é a fração de cristais no magma, ou seja, o valor percentual de soluto que estivera solubilizado na solução que irá precipitar no Cristalizador. Valores de referência para projetos são facilmente encontrados na literatura técnica e a fração de cristais no magma pode ser relacionada matematicamente à concentração de soluto na corrente aquosa utilizando-se uma regra da alavanca, utilizando como base a isoterma de trabalho.

Metodologia

No presente trabalho foi concebido um processo de produção tradicional de cristais de sulfato de magnésio heptahidratado ($\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) realizado após um processo de beneficiamento de Epsomita.

Assumiram-se, como condições iniciais para o projeto, uma solução aquosa estoque contendo 5% (m/m) em MgSO_4 dissolvido a 20°C, com uma vazão volumétrica de 5000 L/h.

Para a simulação e otimização do projeto foram simulados três equipamentos industriais:

- Um Trocador de Calor de feixes tubulares, operando em fluxo misto com dois passes no tubo e um passe no casco (1-2);
- Um Evaporador contínuo de circulação forçada com tubos submersos, operando em dois estágios, com efeito cascata;
- Um Cristalizador Oslo, o qual se utiliza do vapor proveniente do segundo estágio do evaporador para realizar a precipitação dos cristais de MgSO_4 , devido à supersaturação da solução.

Simulação do Trocador de Calor

Para a simulação do Trocador de Calor, utilizou-se o software brasileiro de código aberto DWSIM, utilizando-se como base de cálculo o pacote de propriedades termodinâmicas da Lei de Raoult. Levando em consideração que durante todo o processo produtivo presente neste trabalho não se utilizaram temperaturas superiores a 120°C e pressões maiores que 2 bar, este pacote termodinâmico foi escolhido devido à sua maior simplicidade em termos matemáticos e convergência rápida.

O DWSIM foi utilizado para cálculos de balanço energético e de massa, cálculos entálpicos das correntes, da área de troca térmica do equipamento, e da eficiência térmica.

A razão principal para se utilizar um trocador de calor neste tipo de planta industrial é justamente aquecer a solução estoque para uma temperatura mais próxima à temperatura de operação do evaporador, com isso reduzindo substancialmente as dimensões físicas dos dois

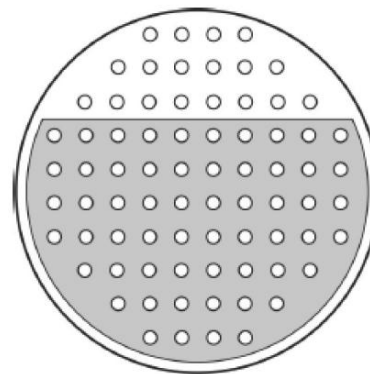
estágios de evaporação, o que economiza espaço devido à possibilidade de verticalização do trocador de calor.

Para aquecimento da solução salina diluída no Trocador de Calor, utilizou-se como fluido de trabalho água, a 92 °C e 1 atm, devido à sua melhor eficiência em troca térmica se comparado ao vapor, em condições similares. Para a realização da simulação, nossa variável de interesse era exatamente a área de troca térmica, portanto foi assumido o valor de $T_{fs} = 65^\circ\text{C}$ como constante para efeito de cálculo.

O coeficiente global de troca térmica do equipamento (U), presente nas equações 5 e 8 foi tirado da literatura técnica Perry *et al.* (1999), e cujo valor utilizado foi de $993,696 \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \cdot \text{K}}$.

Para a escolha do tipo de trocador de calor foi utilizado como justificativa as maiores vantagens relativas ao modelo de casco e tubos, para o nosso caso de uma solução salina não halogenada diluída. Seguindo ainda o explorado em Perry *et al.* (2008), foi escolhido a configuração de (1-2), ou seja, um passe no casco e dois passes nos tubos, com a configuração de feixes quadrangular, como ilustra a Figura 7.

Figura 7. Configuração de quadrangular de feixes tubulares num Trocador de Calor de casco e tubos.



Fonte: (Tadini, *et al.*, 2005).

Posteriormente, para dimensionamento físico do equipamento, buscou-se na literatura dados de tubulações reais para Trocadores de Calor, através das quais foi possível definir-se as dimensões físicas do equipamento, além de sua perda de calor para o meio, calculada pela Lei do Resfriamento de Newton, para posterior adequação da área de troca térmica do equipamento, desta vez considerando-se sua perda de calor para o meio.

Simulação do Evaporador

Dentro da simulação do processo de evaporação em dois estágios realizado neste trabalho, foi tido como objetivo principal a redução da utilização de vapor de aquecimento no primeiro estágio do evaporador, ou seja, a redução de vapor advindo de uma caldeira (vapor vivo), o que além de

reduzir consideráveis gastos em combustível para a caldeira e possibilitar a utilização de uma caldeira menor, ainda reduz a utilização de água no processo, pois, para o aquecimento do segundo efeito e, posteriormente, do Cristalizador, é utilizado o vapor de água gerado a partir da evaporação do solvente presente na própria solução estoque.

Para tal otimização, toda a simulação, realizada em linguagem Python com auxílio das bibliotecas “Matplot” e “Numpy”, teve por objetivo entender, através da análise dos gráficos posteriormente gerados, como o gráfico que demonstra como a concentração de produtos no primeiro efeito (x_{p1}) afeta a utilização de vapor vivo no primeiro efeito, e, em decorrência disso, de todo o processo em si.

Para que os cálculos fossem efetivos, realizaram-se balanços de massa, de energia e de componente em ambos os estágios, além dos balanços globais, todos em função de x_{Pi} .

No entanto, para que a otimização pudesse ser possível, fez-se necessário a estimação de alguns parâmetros principais (principalmente a determinação do estado termodinâmico da solução nos efeitos), nos quais os seguintes cálculos hão de se basear. Tais considerações estão listadas abaixo:

- Temperatura de operação do 1º efeito = 190F ~ 87,78°C;
- Temperatura de operação do 2º efeito = 150F ~ 65,56°C;
- Concentração de soluto na corrente de produtos do segundo efeito (x_{p2}) = 35%. Definido com base na linha de saturação (Figura 8).

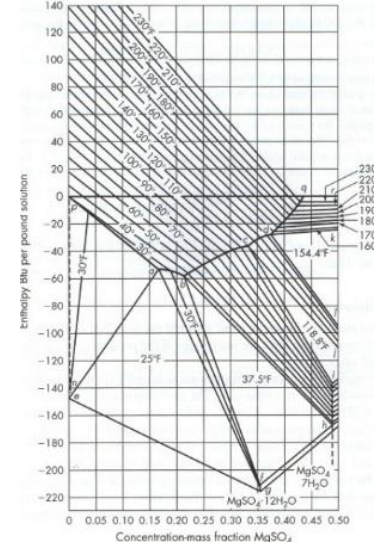
Para ser possível visualizar de maneira mais efetiva se o vapor cedido pelo primeiro efeito seria suficiente para suprir a demanda de calor requerido pelo segundo efeito, foi utilizada a seguinte relação:

$$\dot{m}_{V1}(h_{V1} - h_{C2}) = \dot{m}_{P2}h_{P2} + \dot{m}_{V2}h_{V2} - \dot{m}_{F2}h_{F2} \quad (18)$$

Na qual o lado esquerdo ($\dot{m}_{V1}(h_{V1} - h_{C2})$) refere-se ao calor cedido pelo primeiro efeito, e o lado direito da equação ($\dot{m}_{P2}h_{P2} + \dot{m}_{V2}h_{V2} - \dot{m}_{F2}h_{F2}$) refere-se ao calor requerido para o segundo efeito.

Portanto, ao serem representados ambos os lados dessas funções em um único gráfico, torna-se possível visualizar com certa facilidade como é o comportamento de tais correntes quando x_{p1} varia. De maneira que, onde for possível perceber uma intersecção entre ambas as funções, será possível encontrar uma cota inferior para a concentração requerida na corrente de produtos do primeiro efeito, ou seja, um valor mínimo para que o calor cedido pelo primeiro efeito seja no mínimo equivalente ao valor requerido pelo segundo efeito de evaporação.

Figura 8. Diagrama Entalpia x Concentração do sal $MgSO_4$.



Fonte: (McCabe, *et al.*, 2005).

Contudo, para que seja possível a criação de um gráfico de vazão de vapor por x_{p1} , é necessário deixar as funções presentes na equação 18 em função de x_{p1} .

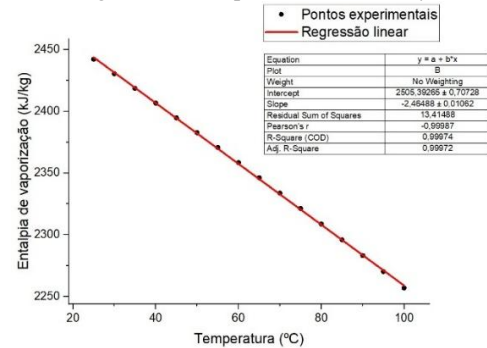
Com isso, seguem as equações 19 e 20, que foram utilizadas para tal:

$$\dot{m}_{V1} = \dot{m}_{F1} \left(1 - \frac{x_{F1}}{x_{P1}}\right) \quad (19)$$

$$h_{V1} = -2.465 (T_{OP} - EPE_1) + 2504,7 + (C_P \cdot EPE_1) \quad (20)$$

A equação 20 trata-se de uma regressão linear realizada a partir dos dados obtidos através da tabela A2 do livro Moran *et al.* (2014). Foram recolhidos dados de temperatura e entalpia de vaporização de 25 até 100°C (que engloba todo o range de temperaturas do processo), variando-se de 5 em 5 graus. A regressão linear resultou nos valores de -2.465 para o coeficiente angular e de 2504,7 para o coeficiente linear e está registrada na Figura 9:

Figura 9. Regressão linear para se encontrar h_{V1} .



Fonte: (Autorial, 2025).

Não obstante, o termo T_{Op} refere-se à temperatura de operação do 1º estágio (87,78°C); C_p refere-se à capacidade calorífica a pressão constante do vapor saturado (1,98 kJ/kg, considerando-se comportamento ideal); e o termo EPE_1 se refere à elevação do ponto de ebulição no 1º estágio e pode ser equacionado segundo a equação 9.

Para a definição da corrente de produtos que seguirá para a cristalização ($\dot{m}_{p2}$, que tem por sua composição x_{p2}), utilizou-se de um diagrama Entalpia x Composição para o $MgSO_4$, conforme o disposto na Figura 8.

O termo h_{c2} foi obtido através de interpolações lineares com os dados obtidos através dos trabalhos de Moran *et al.* (2014) e seu valor numérico, já convertido para o S.I. é de 367,58 kJ/kg.

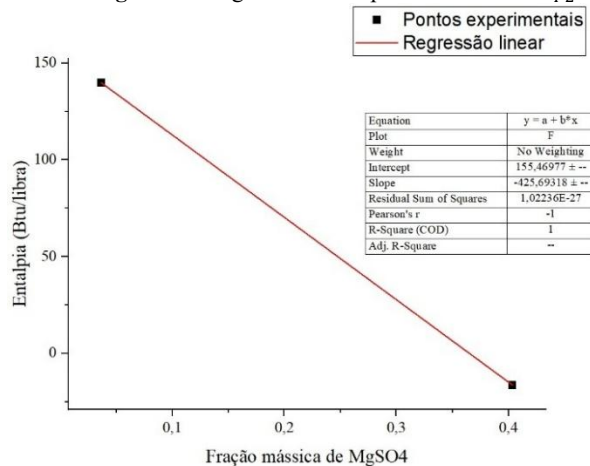
Para o lado direito da equação 18 (ou seja, o calor requerido pelo segundo efeito), os termos foram obtidos da seguinte maneira:

O termo h_{p2} (entalpia da corrente de produtos do segundo estágio) foi obtido via leitura do diagrama presente na Figura 8. Posteriormente à leitura, o valor da entalpia encontrada foi convertido para o S.I., para efeito de cálculo. Já o termo h_{v2} foi obtido de forma análoga ao exposto no cálculo de h_{v1} , com a mudança apenas em relação ao termo referente à elevação do ponto de ebulição, que foi adaptado para x_{p2} , como exposto na equação 9.

O termo relacionado à entalpia da corrente de alimentação do segundo efeito h_{f2} foi calculado através de uma regressão linear realizada a partir da isoterma de 190F, antes da curva de saturação (Figura 8), e, doravante, os resultados obtidos foram multiplicados, no código do Python, por 2.326, que é o fator de conversão de Btu/libra para kJ/kg. O resultado da regressão linear está representado no gráfico disponível na Figura 10, e a equação resultante está explicitada como a equação 21:

$$h_{F2} = -425,67 \cdot x_{p1} + 155,47 \quad (21)$$

Figura 10. Regressão linear para se encontrar h_{F2} .



Fonte: (Autoral, 2025).

Contudo, para ser possível ainda se avaliar como a vazão requerida de vapor de aquecimento no 1º efeito (vapor esse advindo de uma caldeira) se comporta com a variação da concentração do produto no primeiro efeito, e ainda para se ter mais um parâmetro de otimização do processo, fez-se necessária a construção de um gráfico de S1 por fração mássica de $MgSO_4$.

A construção deste gráfico foi realizada a partir de um balanço energético global, entre os dois estágios de evaporação, segundo o descrito pela equação 22:

$$\dot{m}_{s1} = \frac{\dot{m}_{c2}h_{c2} - \dot{m}_{f1}h_{f1} + \dot{m}_{v2}h_{v2} + \dot{m}_{p2}h_{p2}}{(h_{s1} - h_{c1})} \quad (22)$$

Entre as variáveis já apresentadas neste trabalho, ainda faltam definir, para que a equação 22 seja totalmente satisfeita, os parâmetros h_{f1} , h_{c1} e h_{s1} , que foram definidos da seguinte maneira:

- h_{f1} fora lido através da Figura 8 e, posteriormente, suas unidades foram transformadas para o Sistema Internacional.;
- h_{c1} (entalpia do líquido saturado no condensado no 1º estágio) e h_{s1} (entalpia do vapor saturado que aquece o 1º estágio) foram lidas através das tabelas presentes em Moran *et al.* (2014).

Ainda foi realizado, como parâmetro complementar ao projeto um gráfico para se entender como as correntes $\dot{m}_{p1}$, $\dot{m}_{v2}$, $\dot{m}_{p2}$ e $\dot{m}_{f2}$ (que são as correntes envolvidas no balanço entálpico apresentado na equação 18, ou que se necessitam para que o balanço feche) se comportam com a variação de x_{p1} . Para a construção desse gráfico foram-se utilizadas as equações que se seguem (23, 24, 25 e 26). Todas essas equações foram advindas de balanços de massa e componente.

$$\dot{m}_{p1} = \left(\frac{\dot{m}_{f1}x_{f1}}{x_{p1}} \right) \quad (23)$$

$$\dot{m}_{v2} = \dot{m}_{f1} \left[\left(\frac{x_{f1}}{x_{p1}} \right) - \left(\frac{x_{f1}}{x_{p2}} \right) \right] \quad (24)$$

$$\dot{m}_{p2} = \dot{m}_{p1} \left(\frac{x_{p1}}{x_{p2}} \right) \quad (25)$$

$$\dot{m}_{f2} = \dot{m}_{f1} \left(\frac{x_{f1}}{x_{p1}} \right) \quad (26)$$

Simulação do Cristalizador

Por fim, a simulação do Cristalizador foi realizada de maneira análoga à do Evaporador. Mantendo-se como objetivo principal a economia de vapor, utilizou-se, como corrente de aquecimento do Cristalizador Oslo a corrente de vapor advinda do segundo estágio do Evaporador.

Para entender se seria viável a utilização do vapor proveniente do segundo efeito para que o processo de

cristalização ocorra como devido, fez-se necessário a elaboração de um gráfico (análogo ao observado na Figura 10), no qual estariam disponíveis as curvas de calor cedido pelo 2º efeito e de calor requerido pelo Cristalizador, em função da fração mássica de MgSO_4 .

Não obstante, como o cristalizador opera após a linha de saturação (Figura 8), fez-se necessário, para definir a função de calor por fração mássica de soluto, valores mínimos e máximos referentes à fração de cristais no magma, que foram calculados através da regra da alavanca aplicada à isoterma de 90F (temperatura de operação do cristalizador, definida pelos projetistas).

Para a produção do gráfico citado, utilizou-se da equação 27 que fora obtida de forma análoga à equação 16, na qual o índice 3 faz referência ao estágio de cristalizador.

$$\dot{m}_{V2}(h_{V2} - h_{C3}) = \dot{m}_{P3}h_{P3} + \dot{m}_{V3}h_{V3} - \dot{m}_{F3}h_{F3} \quad (27)$$

Em que:

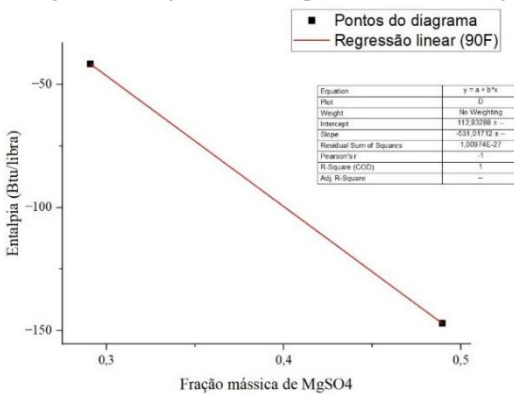
- h_{C3} foi calculado via interpolação linear com os dados fornecidos pela tabela A2, presente em Moran *et al.* (2014);
- $\dot{m}_{P3}$ foi obtido através do balanço de componente e está descrito na equação 28:

$$\dot{m}_{P3} = \left(\frac{\dot{m}_{F3}x_{P2}}{x_{P3}} \right) \quad (28)$$

- h_{P3} foi calculado a partir de uma regressão linear realizada com os dados obtidos pela Figura 8, na isoterma de 90F, após a curva de saturação e a equação encontrada está presente na equação 29 e o gráfico da regressão linear se faz ilustrado na Figura 11.

$$h_{P3} = -531,017 \cdot x_{P3} + 112,83 \quad (29)$$

Figura 11. Regressão linear para se encontrar h_{P3} .



Fonte: (Autorial, 2025).

- $\dot{m}_{V3}$ foi calculado via balanço de massa no cristalizador e a equação resultante está exposta na equação 30:

$$\dot{m}_{V3} = (\dot{m}_{F3} - \dot{m}_{P3}) \quad (30)$$

Na equação citada acima, $\dot{m}_{F3}$ foi calculado via balanço de massa e está descrito pela equação 31:

$$\dot{m}_{F3} = \left(\frac{\dot{m}_{F1}x_{F1}}{x_{P2}} \right) \quad (31)$$

- h_{V3} , assim como h_{V2} e h_{V1} , foi calculado utilizando-se da equação 20, com o termo de $x_{Pi} = x_{P3}$.
- Para h_{F3} assumiu-se o mesmo valor de h_{P2} , portanto: $h_{F3} = h_{P2} = 11,46 \text{ kJ/kg}$.

Novamente, o lado esquerdo da equação 27 ($\dot{m}_{V2}(h_{V2} - h_{C3})$) é referente ao calor cedido pelo segundo efeito, enquanto o lado direito ($\dot{m}_{P3}h_{P3} + \dot{m}_{V3}h_{V3} - \dot{m}_{F3}h_{F3}$) faz referência ao calor requisitado pelo Cristalizador.

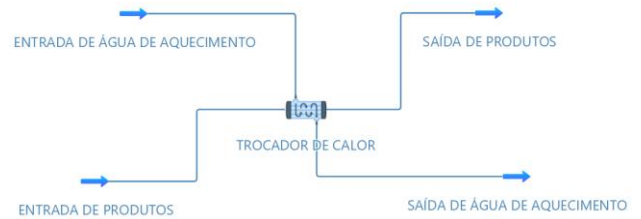
Findada a etapa de modelagem matemática, todas as equações descritas nesta metodologia foram inseridas em um código na linguagem Python na qual também se realizou a plotagem dos gráficos requeridos.

Resultados e Discussões

Resultados da simulação do Trocador de Calor

Após realizados os cálculos, obteve-se, como exposto na Figura 12, o seguinte layout no DWSIM:

Figura 12. Trocador de calor e suas correntes, inseridas no software DWSIM.



Fonte: (Autorial, 2025).

Como exposto, havíamos definido as propriedades das correntes de entrada de produtos, entrada da água de aquecimento tal como a temperatura da saída de produtos. Com isso e findada os cálculos da simulação inicial, obteve-se os seguintes valores:

- Temperatura de saída da água de aquecimento = 44,628°C;
- Carga térmica = 249,32 kW
- Área de troca térmica = 9,023 m².
- Eficiência térmica = 61,68%.

É importante ressaltar que, para esta simulação, o software considerou um sistema adiabático, logo, o trocador de calor não iria perder calor para o meio e, com isso, todo o calor cedido pelo fluido quente iria em sua totalidade para o fluido frio.

Com o intuito de deixar a simulação realizada mais próxima da realidade das operações industriais foi realizado um cálculo, de maneira manual, para estimar-se qual seria a perda de calor para o meio que este equipamento apresentaria.

Para tal, buscou-se em Perry *et al.* (2008) informações sobre diâmetros de tubulações industriais utilizadas em trocadores de calor com feixes de tubos. Após realizada a análise, foram-se definidos os seguintes parâmetros:

- Diâmetro interno dos tubos: $\phi_{int} = 4,526 \text{ cm}$;
- Diâmetro externo dos tubos: $\phi_{ext} = 5,080 \text{ cm}$;
- Número de tubos por passe = 8 (como são dois passes, teremos 16 tubos).

Utilizando-se da área de troca térmica calculada pelo software e dividindo-a pelo número de tubos, teremos:

$$A_{tubo} = \left(\frac{A_{total}}{N_{tubos}} \right) = \left(\frac{9,023}{16} \right) \frac{m^2}{tubo} = 0,569 \frac{m^2}{tubo} = 5690 \frac{cm^2}{tubo} \quad (32)$$

Como o diâmetro interno dos tubos, e, consequentemente o seu raio interno já fora escolhido, faz-se possível o cálculo do comprimento (L) dos tubos cilíndricos da seguinte maneira:

$$L_{tubo} = \left(\frac{A_{tubo}}{2\pi r_{tubo}} \right) = \left(\frac{5690}{2\pi \cdot 2,263} \right) \frac{cm}{tubo} = 400 \frac{cm}{tubo} = 4 \frac{m}{tubo} \quad (33)$$

A próxima etapa do cálculo da perda de calor para o meio consiste em assumir uma geometria cilíndrica para o casco, utilizando o comprimento do casco como sendo, aproximadamente, o comprimento dos feixes tubulares (L).

Para o cálculo do diâmetro do casco, foi utilizado como referencial teórico o descrito em Tadini *et al.* (2018), como ilustra a Figura 13. Foi admitido, como distância entre os centros de cada feixe (s) duas vezes o diâmetro externo dos tubos, e, não obstante, como distância entre o centro do

tubo e a parede do casco, foi admitido uma distância igual à do diâmetro externo.

Para se definir uma espessura ideal para o casco do trocador de calor, novamente fez-se necessário uma consulta às tabelas presentes em Perry *et al.* (2008), logo, foi-se admitido uma espessura de parede de 5,08 cm. O cálculo do diâmetro interno se deu da maneira que se segue (equação 34):

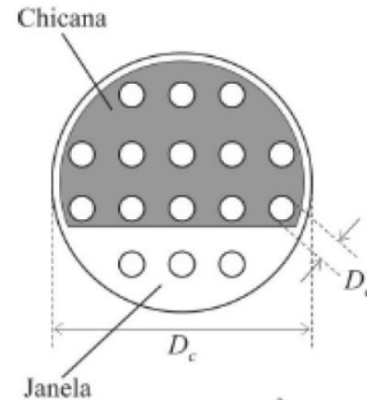
$$\phi_{int(casco)} = 4 \cdot s = 4 \cdot 10,16 = 40,64 \text{ cm} \quad (34)$$

Em que $s = 2\phi_{ext}$.

Ao somar o valor do diâmetro interno calculado acima, com a espessura de parede presente na literatura, obtém-se o diâmetro externo do casco do trocador de calor.

$$\phi_{ext(casco)} = \phi_{int(casco)} + esp_{parede} = 40,64 + 5,08 = 45,72 \text{ cm} \quad (35)$$

Figura 13. Recorte radial de um trocador de feixes tubulares com 16 tubos.



Fonte: (Tadini *et al.*, 2018).

Logo, a área superficial do trocador de calor (que fará a troca térmica com o meio) será dada por:

$$A_{casco} = 2\pi r_{casco} L_{casco} = 2\pi \cdot 22,86 \cdot 400 = 57453,45 \text{ cm}^2 = 5,75 \text{ m}^2 \quad (36)$$

Tendo em mãos a área superficial do casco do trocador de calor, aplicou-se a Lei do Resfriamento de Newton (equação 37) para se calcular um valor médio de perda de calor para o meio:

Pela Lei do Resfriamento de Newton, teremos:

$$\dot{q} = h \cdot A \cdot (T_{superfície} - T_{fluido}) \quad (37)$$

Em que:

- q é o calor trocado pelo sistema;
- h é o coeficiente convectivo do fluido envolvido na convecção;
- A é a área de troca térmica com o fluido;
- $T_{superfície}$ é a temperatura da superfície de troca térmica;
- T_{fluido} é a temperatura do fluido refrigerante.

Para efeito de cálculo, admitiu-se um valor médio de $h = 15 \frac{W}{m^2 K}$, segundo Incropera *et al.* (2011), e um valor de $T_{fluido} = 25 \text{ } ^\circ\text{C}$ (considerando-se um valor médio, devido às variações diárias). Para o valor de $T_{superfície}$ calculou-se uma média entre a temperatura de entrada do fluido quente ($92 \text{ } ^\circ\text{C}$) e a temperatura de saída do fluido quente ($44,68 \text{ } ^\circ\text{C}$), então $T_{superfície} = 68,34 \text{ } ^\circ\text{C}$. Substituindo esses valores na equação 36, teremos:

$$\dot{q} = 15 \cdot 5,75 \cdot (68,34 - 25) = 3738,08 \text{ W} \quad (38)$$

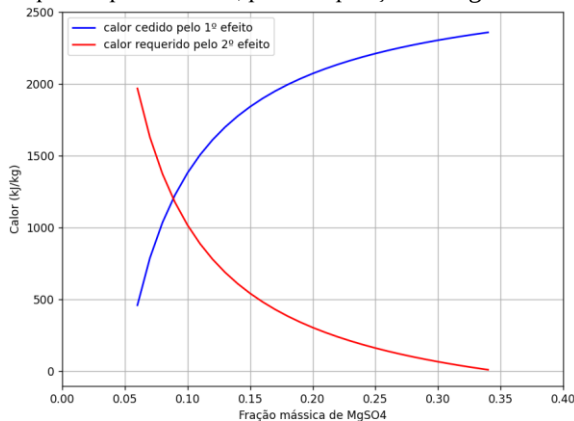
Com isso, através de uma opção no software DWSIM, foi possível inserir o valor numérico da perda de calor para o meio. Com isso, alguns dos parâmetros citados anteriormente sofreram alguma alteração, mais especificamente a área de troca térmica e a eficiência térmica do equipamento.

Logo, nossa nova área de troca térmica, considerando a perda de calor para o meio será de $9,131 \text{ m}^2$, e a eficiência térmica, considerando-se a perda de calor para o meio será de $60,75\%$.

Resultados da simulação do Evaporador Contínuo

Através da inserção das equações apresentadas na metodologia no software VsCode, utilizando-se da linguagem de programação Python, foi possível realizar o gráfico de calor cedido pelo 1º efeito do evaporador e calor requerido pelo segundo efeito, como consta na Figura 14:

Figura 14. Gráfico de calor cedido pelo 1º efeito e calor requerido pelo 2º efeito, pela composição de MgSO_4 .

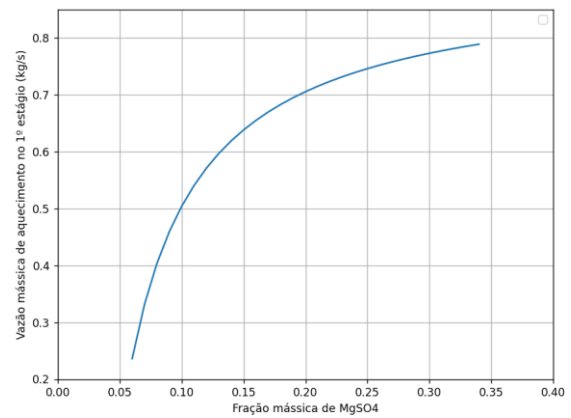


Fonte: (Autorial, 2025).

Ao se analisar o gráfico, foi possível obter uma cota inferior para a composição $x_{p1} = 0,09$ (onde as curvas de calor requerido e calor cedido se cruzam). Com isso, sabemos que quanto mais perto deste ponto de encontro entre as curvas o projeto for dimensionado, maior será, efetivamente a economia de vapor vivo, ou seja, do valor requerido para geração na caldeira, o que impacta diretamente o custo operacional do processo, diminuindo bruscamente as dimensões físicas necessárias da caldeira, além de requerer menos combustível para a queima, necessária para o aquecimento da água presente na caldeira.

Contudo, para uma análise mais assertiva, é necessário analisar o gráfico que relaciona como a vazão de vapor no primeiro efeito varia conforme a fração mássica de MgSO_4 . Os resultados obtidos estão disponíveis na Figura 15.

Figura 15. Gráfico da vazão mássica de vapor de aquecimento requerido pelo 1º efeito pela fração mássica de MgSO_4 .



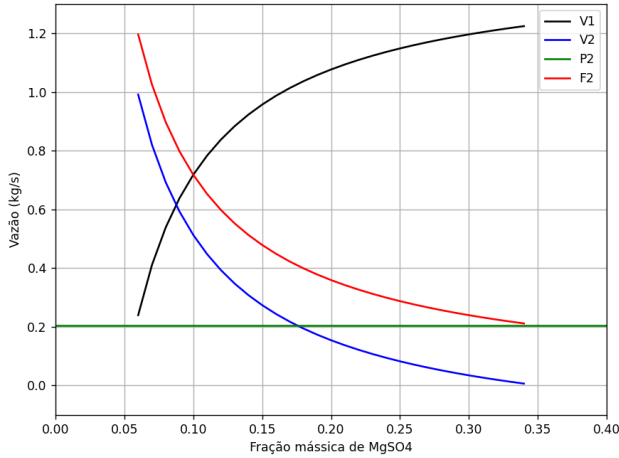
Fonte: (Autorial, 2025).

Podemos observar uma forte não linearidade no gráfico acima, no qual, em especial para valores de $0,09 \leq x_{p1} \leq 0,2$, é possível observar uma variação muito grande da vazão requerida de vapor de aquecimento no 1º efeito em relação à fração mássica de sulfato de magnésio.

Tal fato, juntamente com a análise realizada no gráfico anterior, sugerem que, tendo em mente a economia de vapor, seria melhor operar com valores de x_{p1} ligeiramente superiores ao valor mínimo requerido na simulação entre efeitos, que é de $0,09$, mantendo ao menos um limite de concentração de 10% superior ao mínimo exigido, mas também sem aumentar substancialmente a vazão de vapor externo.

Como confirmação que as correntes envolvidas neste processo estavam se comportando da maneira esperada, ainda foi produzido (Figura 16) um gráfico avaliando como as correntes $\dot{m}_{V1}$, $\dot{m}_{V2}$, $\dot{m}_{P2}$ e $\dot{m}_{F2}$ se comportam com a variação da concentração do sal no primeiro efeito da etapa de evaporação.

Figura 16. Plotagem das funções $\dot{m}_{V1}$, $\dot{m}_{V2}$, $\dot{m}_{P2}$ e $\dot{m}_{F2}$ pela fração mássica de MgSO_4 .



Fonte: (Autoral, 2025).

O comportamento das correntes plotadas no gráfico presente na Figura 16 demonstra exatamente o comportamento esperado para tais correntes, as quais:

- $\dot{m}_{V1}$ aumenta conforme x_{P1} aumenta, o que faz sentido se pensarmos que quanto mais desejarmos concentrar a solução no 1º efeito, maior será a vazão de vapor que deixará o 1º efeito;
- $\dot{m}_{V2}$ de forma contrária ao que ocorre em $\dot{m}_{V1}$, ou seja, quanto mais concentrada a solução sai do primeiro estágio, menos ela deverá se concentrar no segundo efeito, logo o decaimento da vazão com o aumento da composição era esperado;
- De forma similar ao observado em $\dot{m}_{V2}$, $\dot{m}_{F2}$ também decaiu bruscamente com o aumento de x_{P1} , fato mais uma vez intrinsecamente atrelado ao fato de que como a concentração do primeiro efeito foi grande, bastante vapor foi evaporado e a corrente de alimentação do segundo estágio diminuiu inversamente à $\dot{m}_{V2}$;
- $\dot{m}_{P2}$ apresentou comportamento constante durante todo o gráfico, o que se justifica devido à x_{P3} ter sido definido como constante devido à linha de saturação da solução (Figura 8);

Feita tal análise, para que seja possível realizar-se as próximas etapas de projeto, como o dimensionamento do equipamento quanto às suas dimensões físicas, faz-se necessário definir um valor exato para x_{P1} . Com isso, fora definido o valor de $x_{P1} = 0,104$, devido à sua proximidade com a cota inferior de 0,09, porém com um acréscimo que viabiliza o bom funcionamento do equipamento apesar de variações suaves na vazão de alimentação.

Definidos esses parâmetros, torna-se possível o cálculo da área de troca térmica demandada por cada efeito do evaporador, utilizando-se das seguintes equações:

A quantidade de calor trocada em cada efeito do evaporador, descrita pela equação 14, aplicada ao primeiro efeito será calculada como se segue:

$$Q_1 = 0,5189 \cdot (2706,30 - 503,71) \quad (39)$$

$$\therefore Q_1 = 1142,92 \text{ kW} = 1142920,00 \text{ W}.$$

Por conseguinte, a área de troca térmica demandada para o primeiro estágio de evaporação será de:

$$A_1 = \left(\frac{Q_1}{\Delta T_1 \cdot U} \right) = \left(\frac{1142920,00}{(120 - 87,78) \cdot 3500} \right) \quad (40)$$

$$\therefore A_1 = 10,135 \text{ m}^2$$

O valor de $U = 3500$ foi retirado de McCabe *et al.* (2005), no qual são indicados valores de 2000 até 5000 $\text{W/m}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$ para o coeficiente de troca térmica nesse tipo de equipamento, logo, foi utilizado uma média desses valores como o valor escolhido para o dimensionamento do equipamento.

Realizando o mesmo procedimento para o segundo efeito de evaporação, teremos:

$$Q_2 = 0,7442 \cdot (2290,35 - 503,71) \quad (41)$$

$$\therefore Q_2 = 1329,62 \text{ kW} = 1329620,00 \text{ W}.$$

E, para a área de troca térmica do segundo efeito:

$$A_2 = \left(\frac{Q_2}{\Delta T_2 \cdot U} \right) \quad (42)$$

$$= \left(\frac{1711070,00}{(87,78 - 65,56) \cdot 3500} \right)$$

$$\therefore A_2 = 17,10 \text{ m}^2$$

O próximo passo é projetar as dimensões físicas de ambos os estágios de evaporação. Para tal, fora utilizado a equação fundamental 43, descrita em Perry *et al.* (2008):

$$V_i = Q_{Fi} \cdot \tau_i \quad (43)$$

Em que:

- V_i é o volume do evaporador no estágio i [m^3];
- Q_{Fi} é a vazão volumétrica de alimentação no estágio i [m^3/s];
- τ_i é o tempo de residência desejado no estágio i [s];

Como, em nosso projeto, já temos os valores de Q_{Fi} para ambos os estágios, faz-se necessário compreender quais são os valores de τ_i devem ser utilizados para este tipo de evaporador. Utilizando como base as sugestões de projetos de evaporadores descritos em Perry *et al.* (2008), no qual são sugeridos tempos de residência variando de 10 s à 120 s para soluções onde não há degradação por temperatura, sólidos suspensos ou riscos de incrustação.

Como nossa solução entra razoavelmente diluída em ambos os estágios, foi escolhido um tempo de residência médio de 65 s. Como na equação 43 são exigidos valores de vazão em termos da vazão volumétrica, utilizou-se o valor $1,38 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$ como vazão de alimentação do 1º efeito, obtido a partir da conversão da vazão volumétrica de [L/h] para [m³/s]. Ao substituir os valores obtidos na equação 43, teremos, para o primeiro efeito:

$$V_1 = 1,38 \cdot 10^{-3} \cdot 65 = 8,97 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3 \quad (44)$$

$$\therefore V_1 = 89,70 \text{ L} \sim 90 \text{ L.}$$

Tendo em mãos o volume útil do primeiro efeito de evaporação e utilizando-se da relação de $H = 2D$ presente em Perry *et al.* (2008), na qual H é a altura do equipamento e D seu diâmetro externo, torna-se possível o cálculo de suas dimensões de altura e diâmetro, da maneira que se segue:

Logo:

$$H_1 = 2D_1 \quad (45)$$

Aproximando a geometria do evaporador para um cilindro:

$$V_1 = A_{base(1)} \cdot H_1 = \frac{\pi D_1^2}{4} \cdot 2D_1 \quad (46)$$

$$\therefore D_1 = \sqrt[3]{\frac{2V_1}{\pi}} = \sqrt[3]{\frac{2 \cdot 8,97 \cdot 10^{-2}}{\pi}}$$

$$\therefore D_1 = 0,385 \text{ m} = 38,5 \text{ cm}$$

Ao substituírmos os valores na equação 45, teremos:

$$H_1 = 2 \cdot 38,5 \therefore H_1 = 77 \text{ cm.} \quad (47)$$

Para determinar com exatidão o volume do segundo efeito, faz-se necessário o conhecimento da vazão volumétrica de alimentação do segundo efeito. Para tal, foi lido no gráfico de comportamento das correntes em função de x_{P1} o valor de $\dot{m}_{F2}$ quando $x_{P1} = 0,104$. O valor encontrado foi de $\dot{m}_{F2} = 0,692 \text{ kg/s}$. Ao converter esse valor para m³/s, teremos:

Primeiro, faz-se necessário calcular a densidade da corrente de produtos do primeiro estágio, da seguinte forma:

$$\rho_{sol(i)} = \rho_{H_2O} \cdot x_{H_2O(i)} + \rho_{MgSO_4} \cdot x_{MgSO_4(i)} \quad (48)$$

Ao substituir os valores na equação acima, teremos:

$$\rho_{sol(2)} = 1000,00 \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right] \cdot 0,896$$

$$+ 1670,00 \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right] \cdot 0,104 \quad (49)$$

$$\therefore \rho_{sol} = 1069,68 \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right].$$

Portanto, nossa vazão de alimentação do segundo estágio, em termos de [m³/s] será de:

$$Q_{F2} = 0,692 \left[\frac{\text{kg}}{\text{s}} \right] \cdot \frac{1}{1069,68 \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]} \therefore \quad (50)$$

$$Q_{F2} = 6,47 \cdot 10^{-4} \left[\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right].$$

Logo, nosso volume do segundo efeito será de:

$$V_2 = 6,47 \cdot 10^{-4} \cdot 65 = 4,21 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3 \quad (51)$$

$$\therefore V_2 = 42,10 \text{ L.}$$

De maneira análoga ao realizado no primeiro efeito, o cálculo das dimensões do segundo efeito se dará da seguinte maneira:

$$V_2 = A_{base(2)} \cdot H_2 = \frac{\pi D_2^2}{4} \cdot 2D_2 \quad (52)$$

$$\therefore D_2 = \sqrt[3]{\frac{2V_2}{\pi}} = \sqrt[3]{\frac{2 \cdot 4,21 \cdot 10^{-2}}{\pi}}$$

$$\therefore D_2 = 0,299 \text{ m} = 29,90 \text{ cm}$$

Ao substituírmos os valores na equação 45, teremos:

$$H_2 = 2 \cdot 29,90 \therefore H_2 = 59,80 \text{ cm.} \quad (53)$$

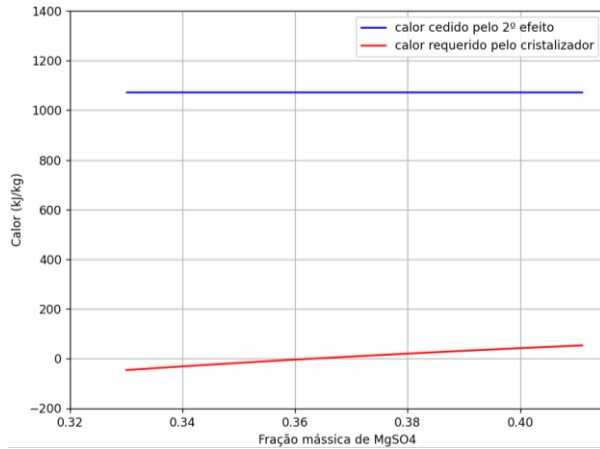
Contudo, para ser validado estas primeiras etapas, referentes ao trocador de calor e evaporador, ainda se faz necessário avaliar se o vapor advindo do segundo efeito é suficiente, em termos energéticos, para suprir a demanda do Cristalizador-Evaporador Oslo.

Resultados da simulação do Cristalizador-Evaporador Oslo

Os modelos matemáticos obtidos foram inseridos em linguagem de programação Python e os resultados obtidos foram inseridos em um gráfico contendo a fração mássica de MgSO_4 no eixo das abscissas e o calor no eixo das ordenadas. Foram plotadas duas funções, uma representando o calor cedido pelo 2º efeito de evaporação (em azul) e o calor requerido pelo efeito de cristalização (em vermelho).

Os resultados da plotagem do gráfico de calor requerido pelo Cristalizador e vapor cedido pelo segundo efeito do Evaporador, admitindo-se um vapor de $x_{P1} = 0,104$, podem ser observados através da Figura 17:

Figura 17. Gráfico de calor cedido pelo 2º efeito do evaporador e calor requerido pelo cristalizador, pela fração mássica de MgSO_4 em x_{P3} .



Fonte: (Autorial, 2025).

Ao se analisar o gráfico acima fica evidente que, admitindo-se $x_{p1} = 0,104$, o calor requerido pela operação unitária de cristalização é consideravelmente menor que o calor fornecido pelo segundo efeito do evaporador, o que viabiliza em termos técnicos o projeto.

Contudo, para que se faça possível o dimensionamento físico do Cristalizador, faz-se necessário definir qual será a fração de cristais no magma com que o equipamento irá operar. Para tal, consultou-se a literatura presente em Foust *et al.* (1982), na qual recomenda-se uma faixa de operação ótima para Cristalizadores-Evaporadores entre 45 e 55% de cristais no magma. Com isso, escolheu-se um valor médio de 50% para operação o qual, a partir da regra da alavanca, resulta em uma fração de $MgSO_4$ de 40,55% (x_{p3}).

Após a definição desses parâmetros, a próxima etapa é realizar o projeto das dimensões físicas do cristalizador. Para o cálculo da área de troca térmica requerida pelo seu trocador de calor externo, foram realizados os cálculos da maneira que se seguem, de forma análoga ao realizado em ambos os estágios de evaporação:

O calor trocado entre os fluidos no trocador de calor acoplado ao cristalizador é dado por:

$$Q_3 = 0,4865 \cdot (2429,77 - 134,96) \quad (54)$$

$$\therefore Q_3 = 1116,43 \text{ kW} = 1116430,00 \text{ W}.$$

A área de troca térmica, portanto, se dará da seguinte forma:

$$A_3 = \left(\frac{Q_3}{\Delta T_3 \cdot U} \right) \quad (55)$$

$$= \left(\frac{628780,00}{(65,56 - 32,22) \cdot 3500} \right)$$

$$\therefore A_3 = 9,57 \text{ m}^2.$$

O volume do cristalizador-evaporador pode ser calculado de maneira análoga ao do evaporador, contudo, utilizando-se de um tempo de residência maior, da ordem

de 1050 s, segundo Perry *et al.* (2008). O tempo de residência deve ser maior para que efeitos indesejáveis tais como incrustação não ocorram, e para que haja tempo o suficiente para que o processo de precipitação e nucleação ocorram de maneira adequada. Portanto, o cálculo do volume do cristalizador se dará da seguinte maneira:

$$\rho_{sol(3)} = 1000,00 \left[\frac{kg}{m^3} \right] \cdot 0,65$$

$$+ 1670,00 \left[\frac{kg}{m^3} \right] \cdot 0,35 \quad (56)$$

$$\therefore \rho_{sol(3)} = 1234,5 \left[\frac{kg}{m^3} \right]$$

$$Q_{F3} = 0,274 \left[\frac{kg}{s} \right] \cdot \frac{1}{1234,5} \left[\frac{m^3}{kg} \right] \therefore \quad (57)$$

$$Q_{F3} = 2,22 \cdot 10^{-4} \left[\frac{m^3}{s} \right].$$

Logo, o volume necessário para o nosso cristalizador Oslo será:

$$V_3 = 2,22 \cdot 10^{-4} \cdot 1050 = 2,33 \cdot 10^{-1} \text{ m}^3 \quad (58)$$

$$\therefore V_3 = 233,1 \text{ L}.$$

Por se tratar de um cristalizador-evaporador, pode-se assumir o cálculo de suas dimensões de diâmetro e altura de forma análoga à utilizada em cada um dos estágios de evaporação. Assumindo-se tal fato, teremos:

$$V_3 = A_{base(3)} \cdot H_3 = \frac{\pi D_3^2}{4} \cdot 2D_3 \quad (59)$$

$$\therefore D_3 = \sqrt[3]{\frac{2V_3}{\pi}} = \sqrt[3]{\frac{2 \cdot 2,33 \cdot 10^{-1}}{\pi}}$$

$$\therefore D_3 = 0,530 \text{ m} = 53,00 \text{ cm}$$

$$H_3 = 2 \cdot 53,00 \therefore H_3 = 106 \text{ cm}. \quad (60)$$

Conclusões

O software DWSIM mostrou-se simples e eficaz na simulação do trocador de calor, sendo possível obter resultados precisos e bem fundamentados. Ao considerar-se a perda de calor para o meio, com o intuito de trazer a simulação para o mais perto da realidade o quanto possível e comparando-a com o modelo padrão, obteve-se uma perda de cerca de 1% na eficiência térmica e houve uma demanda de 0,11 m² a mais para a área de troca térmica.

Para a simulação do evaporador contínuo em múltiplos efeitos, a linguagem Python se mostrou bastante adequada, pois possibilitou a inserção de todas as equações obtidas do modelo matemático de forma completa, além de ter possibilitado a construção de gráficos de forma simplificada e efetiva. Os gráficos obtidos foram de cunho essencial para a visualização do comportamento das

correntes de processo com a variação da variável manipulada e se mostraram úteis para os critérios de decisão do processo.

Não obstante, o Python também mostrou ser bastante útil e efetivo para a realização da simulação dos parâmetros de projeto do Cristalizador-Oslo. Os gráficos gerados através dos códigos facilitaram muito as escolhas dos parâmetros de projeto, oferecendo análises visuais que possibilitaram a visualização dos efeitos termodinâmicos simulados, trazendo assim mais praticidade e assertividade na definição das variáveis de processo.

Referências

1. ATKINS, P.; PAULA, J. de. *Físico-química*. 10. ed. Porto Alegre: Bookman, 2012.
2. FOUST, A. S.; WENZEL, L. A.; CLUMP, C. W.; MAUSS, L. L.; ANDERSEN, L. B. *Princípios das operações unitárias*. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC – Livros Técnicos e Científicos, 1982.
3. INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P.; BERGMAN, T. L.; LAVINE, A. S. *Fundamentos de transferência de calor e de massa*. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC – Livros Técnicos e Científicos, 2011.
4. McCABE, W. L.; SMITH, J. C.; HARRIOTT, P. *Unit Operations of Chemical Engineering*. 7th ed. New York: McGraw-Hill, 2005.
5. MORAN, M. J.; SHAPIRO, H. N.; BOETTNER, D. D.; BAILEY, M. B. *Princípios de termodinâmica para engenharia*. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC – Livros Técnicos e Científicos, 2014.
6. PERRY, R. H.; DON-WOLF, GREEN; eds. *Rules of Thumb for Chemical Engineers*. 5. ed. New York: John Wiley & Sons, 1999. ISBN 978-0-471-32149-1.
7. PERRY, R. H.; GREEN, D. W. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 8. ed. New York: McGraw-Hill, 2008. ISBN 978-0-07-142294-9.
8. RAO, Madduri V.; KAWAMURA, Yoko. Magnesium sulfate – Chemical and Technical Assessment. 68th JECFA, Food and Agriculture Organization of the United Nations (FAO), Rome, 2007. 5 p.
9. TADINI, Carmen Cecilia et al. (org.). *Operações unitárias na indústria de alimentos*. 1. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2018. 978-85-216-3033-3.