

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

BRUNO JOSÉ CHIARAMONTE DE CASTRO

**AVALIAÇÃO DA PRODUÇÃO DE AÇÚCAR UTILIZANDO RECONCILIAÇÃO DE
DADOS, ESTATÍSTICA MULTIVARIADA E MODELAGEM FENOMENOLÓGICA
DA CRISTALIZAÇÃO**

São Carlos – SP

2019

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

BRUNO JOSÉ CHIARAMONTE DE CASTRO

**AVALIAÇÃO DA PRODUÇÃO DE AÇÚCAR UTILIZANDO RECONCILIAÇÃO DE
DADOS, ESTATÍSTICA MULTIVARIADA E MODELAGEM FENOMENOLÓGICA
DA CRISTALIZAÇÃO**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. André Bernardo

São Carlos – SP

2019

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE BRUNO JOSÉ CHIARAMONTE DE CASTRO APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, EM 25 DE FEVEREIRO DE 2019.

BANCA EXAMINADORA:


André Bernardo
Orientador, UFSCar


João Paulo Silva Queiroz
UFSCar


Charles Dayan Farias de Jesus
CTBE/CNPEM

AGRADECIMENTOS

A Deus, por guiar meus passos até aqui.

Ao meu orientador, Prof. Dr. André Bernardo, por se fazer presente e solícito durante todo o desenvolvimento deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Felipe Fernando Furlan, por dividir comigo um pouco dos seus conhecimentos sobre o *software* de simulação EMSO.

Aos meus pais, Carmen e Sebastião, por todas as oportunidades que me deram, por confiarem em mim, e por apoiarem todas as minhas decisões. Ao meu irmão Matheus, pela amizade e parceria de sempre.

A minha noiva Carolina, pelo companheirismo, paciência e dedicação.

Ao Departamento de Engenharia Química da UFSCar, por proporcionar o ambiente de aprendizagem no qual este trabalho foi desenvolvido.

Ao CNPq e à CAPES, pelo suporte financeiro.

RESUMO

A cana-de-açúcar, cultivada em mais de cem países, é uma das principais culturas do mundo. O Brasil figura como maior produtor mundial. As indústrias do setor buscam constantemente a redução de perdas do processo industrial, a redução da variabilidade do processo, e o maior entendimento e controle dos fenômenos envolvidos na cristalização da sacarose. Dessa forma, a primeira abordagem deste trabalho teve como objetivo determinar a participação do setor de fabricação de açúcar no total das perdas indeterminadas de uma unidade produtora de açúcar e etanol. Para isso, foi utilizado um método de reconciliação de dados de vazões e concentrações do processo. Tal método poderia ser aplicado a qualquer equipamento ou setor da usina para rápida identificação das perdas que, atualmente, não são quantificadas. A segunda abordagem do trabalho objetivou identificar as maiores fontes de variação da quantidade e da qualidade do açúcar produzido, por meio de duas técnicas de estatística multivariada (PCA – *Principal Component Analysis*, e PLS – *Partial Least Squares*) aplicadas aos dados da mesma usina. Por fim, o terceiro objetivo do trabalho foi implementar um modelo para o processo de cristalização da sacarose em duas massas, baseado nos princípios fundamentais de conservação de massa e energia, e no balanço populacional de cristais, incluindo os fenômenos de nucleação e dispersão da velocidade de crescimento. Foram utilizados o Microsoft Excel para a reconciliação dos dados de processo, o *software* Minitab para as análises estatísticas multivariadas, e o simulador EMSO para a implementação do modelo fenomenológico do processo de cristalização. Por meio da reconciliação de dados, identificou-se que 37,3% das perdas indeterminadas contabilizadas na indústria ocorreram no setor de fabricação de açúcar, entre as etapas de pré-evaporação do caldo e ensaque. A análise PCA destacou a alta correlação entre a presença de flocos alcoólicos no açúcar e sua concentração de amido e dextrana. Tanto o PCA quanto o PLS mostraram que a cor do açúcar esteve altamente correlacionada a sua umidade, indicando que os fenômenos de inclusão e oclusão do mel contribuíram de maneira significativa para o aumento de cor do cristal. Na simulação do processo de cristalização em duas massas, o tamanho médio dos cristais alcançou 0,64 mm, com coeficiente de variação igual a 30,58%. Tais resultados aproximaram-se dos valores reais da usina em estudo, na qual o tamanho médio dos cristais foi de 0,65 mm, com coeficiente de variação igual a 25,36%.

PALAVRAS-CHAVE: perdas indeterminadas, reconciliação de dados, indústria de açúcar, análise multivariada, *Principal Component Analysis*, *Partial Least Squares*, cristalização da sacarose, modelagem fenomenológica, simulação, EMSO

ABSTRACT

Sugarcane, grown in more than a hundred countries, is one of the major crops of the world. Brazil is the world's largest producer. Sugarcane industries are constantly seeking to reduce the industrial process losses, to reduce the process variability, and to greater understand and control the phenomena involved in the sucrose crystallization. Thus, the first approach of this work aimed at quantifying the contribution of the sugar manufacturing sector to the total undetermined losses of a sugar and ethanol plant. To this end, a method based on data reconciliation for the process flow rates and concentrations was used. This method could be applied to any equipment or sector of the industry in order to rapidly identify sugar losses that are not currently quantified. The second approach of the work aimed at identifying the major sources of variation in the quantity and quality of the produced sugar, by applying two multivariate statistical techniques (PCA – Principal Component Analysis, and PLS – Partial Least Squares) to the data from the same industry. Lastly, the third objective of the work was to implement a model to the two-massecuite system for sucrose crystallization, based on the first principles of mass and energy conservations, and on the crystal population balance, including the phenomena of nucleation and growth rate dispersion. Microsoft Excel was used for the process data reconciliation, software Minitab for the multivariate statistical analyses, and EMSO simulator for the implementation of the phenomenological model of the crystallization process. From data reconciliation, 37.3% of undetermined losses were found to occur in the sugar manufacturing sector, between juice concentration and sugar bagging. The PCA highlighted the high correlation between the presence of alcoholic flocs in sugar and the concentrations of starch and dextran in it. Both PCA and PLS showed that the color of the sugar was highly correlated to its moisture content, indicating that the phenomena of inclusion and occlusion of molasses in the crystals contributed significantly to increased crystal color. In the simulation of the two-massecuite crystallization process, the crystal mean size reached 0.64 mm, with coefficient of variation equal to 30.58%. These results approximated the real data of the studied plant, in which the crystal mean size was 0.65 mm, with coefficient of variation equal to 25.36%.

KEYWORDS: undetermined losses, data reconciliation, sugar industry, multivariate analysis, Principal Component Analysis, Partial Least Squares, sucrose crystallization, phenomenological modelling, simulation, EMSO

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Produção, consumo e estoque de açúcar no mundo, em milhões de toneladas, das safras 2009/10 a 2018/19	19
Figura 2.1 – Diagrama de blocos do setor de concentração do caldo, com destaque para as variáveis medidas no processo, das correntes de caldo clarificado (1) e xarope flotado (2), para o desenvolvimento deste trabalho.....	29
Figura 2.2 – Diagrama de blocos dos setores de cozimento, centrifugação e secagem, com destaque para as variáveis medidas no processo, das correntes xarope flotado (2), mel final (3) e açúcar (4), para o desenvolvimento deste trabalho.....	32
Figura 2.3 – Vazão volumétrica de caldo clarificado, $Q1$ (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)	35
Figura 2.4 – Brix do caldo clarificado, $brix1$ (Linha tracejada: média móvel de 5 dias).....	35
Figura 2.5 – Brix do xarope flotado, $brix2$ (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)	36
Figura 2.6 – Pol do caldo clarificado, $pol1$ (Linha tracejada: média móvel de 5 dias).....	36
Figura 2.7 – Pol do xarope flotado, $pol2$ (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)	36
Figura 2.8 – Médias diárias de moagem de cana, em toneladas por hora (Linha tracejada: média móvel de 5 dias).....	37
Figura 2.9 – Pressão do vapor vegetal (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)	37
Figura 2.10 – Vazão mássica de xarope flotado ($F2$) obtida por meio do método de reconciliação de dados aplicado ao volume de controle do setor de concentração do caldo (Linha tracejada: média móvel de 5 dias).....	39
Figura 2.11 – Vazão volumétrica de mel final, $Q3$ (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)	39
Figura 2.12 – Porcentagem mássica de sacarose do xarope flotado, $s2$ (Linha tracejada: média móvel de 5 dias).....	40
Figura 2.13 – Porcentagem mássica de sacarose do mel final, $s3$ (Linha tracejada: média móvel de 5 dias).....	40
Figura 2.14 – Porcentagem mássica de sacarose do açúcar, $s4$ (Linha tracejada: média móvel de 5 dias).....	40
Figura 2.15 – Perda de ART nos multijatos (Linha tracejada: média móvel de 5 dias).....	42
Figura 2.16 – Perda de ART nas águas residuais (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)...	42
Figura 2.17 – Produção de açúcar calculada ($F4$) e real	42
Figura 2.18 – Produção de açúcar calculada em função da produção real de açúcar, em sacos de 50 kg por hora	43

Figura 2.19 – Módulo do desvio entre a produção real de açúcar e o resultado do balanço de massa para cada dia do período.....	44
Figura 2.20 – Perdas indeterminadas (Linha tracejada: média móvel de 5 dias).....	45
Figura 3.1 – Diagrama de blocos do cozimento de açúcar	58
Figura 3.2 – Gráfico de coeficientes da regressão PLS para quantidade de açúcar produzido	63
Figura 3.3 – Gráfico de seleção do modelo de PLS para quantidade de açúcar produzido, pelo método de validação cruzada	64
Figura 3.4 – Gráfico de coeficientes da regressão PLS para cor do açúcar	65
Figura 3.5 – Gráfico de seleção do modelo de PLS para cor do açúcar, pelo método de validação cruzada.....	66
Figura 3.6 – Autovalores de cada componente no PCA	69
Figura 4.1 – Diagrama de blocos do processo de cristalização industrial do açúcar em duas massas	78
Figura 4.2 – Receita dos cozimentos A e B	80
Figura 4.3 – Variação da pressão absoluta do vapor vegetal segundo função senoidal imposta à simulação.....	84
Figura 4.4 – Volume da massa B em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa B)	89
Figura 4.5 – Temperatura da massa B em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa B).....	89
Figura 4.6 – Massa de cristais na massa B em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa B).....	90
Figura 4.7 – Porcentagem mássica de cristais na massa B em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa B)	90
Figura 4.8 – Supersaturação e supersaturação crítica da massa B em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa B)	90
Figura 4.9 – Brix e pureza da massa B em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa B).....	90
Figura 4.10 – Tamanho médio dos cristais da massa B em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa B).....	91
Figura 4.11 – Distribuição de tamanhos dos cristais da massa B, considerando uma distribuição normal de probabilidade (linha vertical tracejada representa a eliminação de cristais finos na etapa de centrifugação)	91

Figura 4.12 – Volume da massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A)	93
Figura 4.13 – Temperatura da massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A)	93
Figura 4.14 – Massa de cristais na massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A)	93
Figura 4.15 – Porcentagem mássica de cristais na massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A).....	93
Figura 4.16 – Supersaturação e supersaturação crítica da massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A).....	94
Figura 4.17 – Brix e pureza da massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A)	94
Figura 4.18 – Tamanho médio dos cristais da massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A)	94
Figura 4.19 – Distribuição de tamanhos dos cristais da massa A, considerando uma distribuição normal de probabilidade (linha vertical tracejada representa a eliminação de cristais finos na etapa de centrifugação).....	95
Figura 4.20 – Taxa de nucleação secundária da massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A)	96
Figura 4.21 – Variação da vazão máxima de vapor vegetal no cozimento de massa A.....	102
Figura 4.22 – Variação da vazão máxima de vapor vegetal no cozimento de massa B.....	102

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Valores médios e desvios padrão das medidas de brix e pol do caldo clarificado (1) e xarope flotado (2).....	36
Tabela 2.2 – Exemplificação do método de reconciliação de dados, utilizando os dados do 28º dia do período estudado.....	38
Tabela 2.3 – Valores médios e desvios padrão das porcentagens mássicas de sacarose do xarope flotado (2), do mel final (3) e do açúcar (4)	40
Tabela 3.1 – Variáveis consideradas nas análises estatísticas PCA e PLS	56
Tabela 3.2 – Dez maiores correlações entre variáveis i e j da matriz Φ	59
Tabela 3.3 – Correlações entre as concentrações de dextrana e amido no açúcar e as características da cana-de-açúcar processada	62
Tabela 3.4 – Variáveis altamente correlacionadas à quantidade total de açúcar produzido, de acordo com a matriz de correlações do PCA e com a regressão PLS	63
Tabela 3.5 – Variáveis altamente correlacionadas à cor do açúcar produzido, de acordo com a matriz de correlações do PCA e com a regressão PLS.....	65
Tabela 3.6 – Autovetores, autovalores, porcentagens individual e cumulativa da variância dos dados explicada pelos três componentes principais	68
Tabela 4.1 – Entradas da simulação base dos cozimentos	81
Tabela 4.2 – Simulações realizadas e alterações nas entradas em relação à simulação base ...	84
Tabela 4.3 – Comparação dos resultados da simulação base com as especificações de cada variável e com sua média real no período estudado	96
Tabela 4.4 – Comparação entre os resultados da simulação base e das simulações nas quais a pureza do xarope flotado foi alterada	97
Tabela 4.5 – Comparação entre os resultados da simulação base e das simulações com pureza do xarope flotado menor.....	98
Tabela 4.6 – Comparação entre os resultados da simulação base e as simulações nas quais o brix do xarope flotado foi alterado	100
Tabela 4.7 – Comparação entre os resultados da simulação base e a simulação 5, na qual a pressão do vapor vegetal foi modificada	101
Tabela 4.8 – Comparação entre os resultados da simulação base e as simulações nas quais foi imposta variação senoidal à vazão de vapor vegetal	103

SUMÁRIO

Capítulo 1 – INTRODUÇÃO E OBJETIVOS	19
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	22
Capítulo 2 – RECONCILIAÇÃO DE DADOS APLICADA À IDENTIFICAÇÃO DE PERDAS DA INDÚSTRIA AÇUCAREIRA	25
RESUMO.....	25
2.1 Introdução	25
2.2 Materiais e métodos	28
2.2.1 Balanço de massa e reconciliação de dados no setor de concentração do caldo	28
2.2.2 Balanço de massa nos setores de cozimento, centrifugação e secagem	31
2.3 Resultados e discussão.....	35
2.3.1 Balanço de massa e reconciliação de dados no setor de concentração do caldo	35
2.3.2 Balanço de massa nos setores de cozimento, centrifugação e secagem	39
2.4 Conclusões	47
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	49
Capítulo 3 – AVALIAÇÃO DA PRODUÇÃO DE AÇÚCAR DE CANA UTILIZANDO ANÁLISE ESTATÍSTICA MULTIVARIADA	51
RESUMO.....	51
3.1 Introdução	51
3.2 Materiais e métodos	55
3.3 Resultados e discussão.....	59
3.3.1 Análise da matriz de correlações	59
3.3.2 PCA e PLS para as variáveis quantidade e cor do açúcar produzido	63
3.3.3 Componentes principais da variabilidade do processo.....	67
3.4 Conclusões	70
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	72
Capítulo 4 – CRISTALIZAÇÃO DA SACAROSE: MODELAGEM E AVALIAÇÃO DAS RESPOSTAS DA PRODUÇÃO FRENTE A VARIAÇÕES TÍPICAS DO PROCESSO	75
RESUMO.....	75
4.1 Introdução	75
4.2 Materiais e métodos	78
4.2.1 Simulações do processo de cristalização em duas massas	78

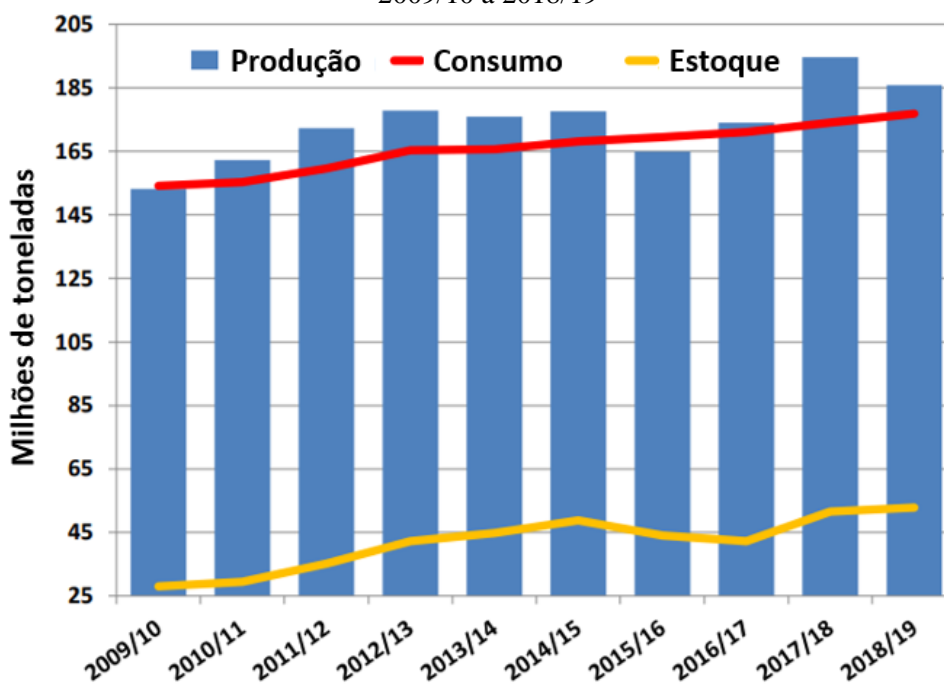
4.2.2	Equacionamento.....	85
4.3	Resultados e discussão	89
4.4	Conclusões.....	104
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	106
Capítulo 5	– CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	111
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	112
APÊNDICE A	– DEMONSTRAÇÃO MATEMÁTICA DO BALANÇO DE ENERGIA DO PROCESSO DE CRISTALIZAÇÃO DA SACAROSE	115
APÊNDICE B	– EQUAÇÕES DO MODELO E CORRELAÇÕES PARA PROPRIEDADES FÍSICAS	117
APÊNDICE C	– CÓDIGO DO MODELO PARA SIMULAÇÃO BASE NO SOFTWARE EMSO.....	121

Capítulo 1 – INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

Com uma produção superior a 640 milhões de toneladas de cana-de-açúcar, 38 milhões de toneladas de açúcar e 27 milhões de metros cúbicos de etanol na safra 2017/2018, o Brasil permanece na posição de liderança mundial na produção de cana, e na produção e exportação de açúcar, e é o segundo maior produtor de etanol. As usinas brasileiras estão localizadas, em sua grande maioria, em duas regiões distintas: Nordeste e Centro-Sul, sendo esta responsável por mais de 90% das produções de cana, açúcar e etanol do país. O Estado de São Paulo figura como maior produtor nacional, com 357 milhões de toneladas de cana, 24 milhões de toneladas de açúcar e 13 milhões de metros cúbicos de etanol na safra 2017/2018 (UNICA, 2018). A cadeia produtiva da cana-de-açúcar gerou, em 2017, 156 bilhões de reais, segundo dados do Centro de Estudos Avançados em Economia Aplicada (CEPEA, 2018), representando uma das maiores rendas do agronegócio brasileiro.

A Figura 1.1 apresenta os dados de produção e consumo de açúcar no mundo. Como toda *commodity*, o preço do açúcar é regulado pela oferta e procura globais. Desde 2010, o aumento dos estoques mundiais de açúcar levou à depreciação do seu preço no mercado internacional, colaborando para uma das maiores crises da história do setor sucroenergético brasileiro (USDA, 2018).

Figura 1.1 – Produção, consumo e estoque de açúcar no mundo, em milhões de toneladas, das safras 2009/10 a 2018/19



Fonte: USDA, 2018

As usinas também foram prejudicadas pela medida do governo em manter os preços da gasolina baixos, como forma de controlar a inflação. Como a gasolina e o etanol são concorrentes no abastecimento dos veículos, os preços do etanol também tiveram de ser reduzidos. Devido a este cenário, cerca de 20% das usinas já deixaram de operar no país, e muitas das que continuam em operação enfrentam uma diminuição das margens de lucro dos seus dois principais produtos e, conseqüentemente, endividamentos cada vez maiores e dificuldades de obtenção de crédito junto a investidores para melhorias e aumento de capacidade (TEIXEIRA, 2017).

Dessa forma, é de extrema importância que as indústrias do setor que desejem se manter competitivas no mercado busquem:

1. maximizar sua eficiência, ou seja, reduzir as perdas de açúcar durante o processo industrial;
2. reduzir a variação de qualidade dos produtos, para que haja um maior atendimento aos compromissos de venda, de acordo com as exigências do mercado consumidor;
3. reduzir os custos de operação, o que pode ser alcançado com o aumento do grau de automatização das plantas, visto que os custos com mão-de-obra crescem cerca de 10% ao ano (TOLEDO, 2015).

Os capítulos subsequentes deste trabalho abordam, separadamente, cada uma dessas três vertentes. O objetivo geral é apresentar alternativas que proporcionem melhorias técnicas e resultem em maiores ganhos econômicos para a cadeia de produção de açúcar.

Com relação ao aumento da eficiência industrial, as usinas têm direcionado esforços para redução das chamadas perdas determinadas, que são as perdas conhecidas e mensuráveis do processo. Assim, buscam-se a correta quantificação, atuação rápida e desenvolvimento de novas tecnologias para correção das perdas na água de lavagem de cana, no bagaço, na torta de filtração, nos multijatos de evaporadores e cozedores, nas águas residuais, na fermentação, na vinhaça e na flegmaça (FERNANDES, 2011; LEMOS, 2015). Porém, para algumas perdas de sacarose que ocorrem principalmente nas etapas de evaporação e cozimento, não existem procedimentos de quantificação. São as chamadas perdas indeterminadas, relacionadas à destruição da sacarose para formação de melanoidinas, ácidos carboxílicos, compostos caramelados, e às deposições cristalinas de açúcar nos equipamentos (CHOU, 2000; DAVIS, 2001; MARTINS; JONGEN; VAN BOEKEL, 2001; SCHLUMBACH; PAUTOV;

FLÖTER, 2017). No capítulo 2 desta dissertação, é proposta a aplicação de um método baseado na reconciliação de dados de vazões e concentrações que permita a rápida identificação de perdas de açúcar, incluindo as perdas indeterminadas, em equipamentos ou setores da indústria. O método da reconciliação de dados, que já teve sua acurácia testada e comprovada (HUBBARD; LOVE, 1998), e já foi aplicado a vários processos industriais com objetivos diversos (JIANG; LIU; LI, 2014; MARTINS et al., 2010; SMAÏLI et al., 1999; SYED et al., 2016), foi exemplificado utilizando dados reais do setor de fabricação de açúcar da safra 2015/2016 de uma usina localizada no interior do Estado de São Paulo. O objetivo foi quantificar a contribuição do setor de fabricação de açúcar no total das perdas indeterminadas da unidade.

Na segunda abordagem deste trabalho, descrita no capítulo 3, foram aplicados aos dados da mesma usina dois métodos de análise estatística multivariada, amplamente utilizados no monitoramento de processos, no diagnóstico de falhas e na investigação científica: a Análise por Componentes Principais (PCA) e a Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS) (JOHNSON; WICHERN, 2007; QIN, 2012; YIN et al., 2014, 2015). As análises, que foram implementadas utilizando o *software* Minitab, tiveram como objetivo identificar as fontes de maior variabilidade da planta, bem como as variáveis do processo que apresentaram maior influência sobre a quantidade e a qualidade do açúcar produzido.

O capítulo 4 trata da modelagem do cozimento em duas massas com reciclo do mel, processo amplamente utilizado nas usinas brasileiras. O modelo foi implementado utilizando o *software* EMSO. O alto gasto energético da cristalização e a grande demanda por mão-de-obra, visto que é um dos processos de menor grau de automatização das usinas, faz com que o custo desse setor represente uma parcela significativa do custo total da produção do açúcar (SHAMIM et al., 2016). Além disso, a etapa de cristalização é determinante para a qualidade do açúcar produzido (MERHEB, 2014). Assim, tem-se buscado modelar esse processo de forma satisfatória, para permitir o desenvolvimento de estruturas adequadas de controle (CHORÃO, 1995; GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003; MAZAEDA et al., 2014; SHAMIM et al., 2016). Neste trabalho, a cristalização foi modelada com base nos balanços de massa, de energia e populacional, incluindo os fenômenos de nucleação e dispersão da velocidade de crescimento dos cristais. Para validar a simulação, os resultados foram comparados com os dados reais da mesma usina.

O capítulo 5 apresenta as conclusões referentes às três abordagens descritas, e as sugestões para trabalhos futuros.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CEPEA (CENTRO DE ESTUDOS AVANÇADOS EM ECONOMIA APLICADA). **PIB das cadeiras agropecuárias**, 2018. Disponível em: <<https://www.cepea.esalq.usp.br/br/pib-de-cadeiras-agropecuarias.aspx>>. Acesso em: 29 mai. 2018.

CHOU, C. C. **Handbook of sugar refining: a manual for design and operation of sugar refining facilities**. New York: John Wiley & Sons, 2000.

CHORÃO, J. M. M. N. **Operação assistida por computador de um cristalizador evaporativo industrial de açúcar**. 1995. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Porto.

DAVIS, S. B. The chemistry of colour removal: a processing perspective. **Proceedings of the South African Sugar Technologists' Association**, v. 75, p. 328–336, 2001.

FERNANDES, A. C. **Cálculos na agroindústria da cana-de-açúcar**. 3. ed. Piracicaba, SP: STAB, 2011.

GEORGIEVA, P.; MEIRELES, M. J.; FEYO DE AZEVEDO, S. Knowledge-based hybrid modelling of a batch crystallisation when accounting for nucleation, growth and agglomeration phenomena. **Chemical Engineering Science**, v. 58, n. 16, p. 3699–3713, 2003.

HUBBARD, G.; LOVE, D. Reconciliation of process flow rates for a steady state mass balance on a centrifugal. **Proceedings of the South African Sugar Technologists' Association**, v. 72, p. 290–299, 1998.

JIANG, X.; LIU, P.; LI, Z. Data reconciliation and gross error detection for operational data in power plants. **Energy**, v. 75, p. 14–23, 2014.

JOHNSON, R. A.; WICHERN, D. W. **Applied multivariate statistical analysis**. 6. ed. Upper Saddle River, NJ: Pearson Prentice Hall, 2007.

LEMOS, C. Perdas na indústria impactam resultados nas usinas. **UDOP (União dos produtores de bioenergia)**, Araçatuba, SP, 03/11/2015. Disponível em: <<http://udop.com.br/index.php?item=noticias&cod=1130855>>. Acesso em: 11 jul. 2016.

MARTINS, M. A. F.; AMARO, C. A.; SOUZA, L. S.; KALID, R. A.; KIPERSTOK, A. New objective function for data reconciliation in water balance from industrial processes. **Journal of Cleaner Production**, v. 18, n. 12, p. 1184–1189, 2010.

MARTINS, S. I. F.; JONGEN, W. M.; VAN BOEKEL, M. A. J. A review of Maillard reaction in food and implications to kinetic modelling. **Trends in Food Science & Technology**, v. 11, n. 9–10, p. 364–373, 2001.

MAZAEDA, R.; ACEBES, L. F.; RODRÍGUEZ, A.; ENGELL, S.; PRADA, C. Sugar crystallization benchmark. **Computer Aided Chemical Engineering**, v. 33, p. 613-618, 2014.

MERHEB, G. A. **Influência da contaminação combinada de dextrana e amido na cristalização do açúcar**. 2014. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos.

QIN, S. J. Survey on data-driven industrial process monitoring and diagnosis. **Annual Reviews in Control**, v. 36, n. 2, p. 220–234, 2012.

SCHLUMBACH, K.; PAUTOV, A.; FLÖTER, E. Crystallization and analysis of beet and cane sugar blends. **Journal of Food Engineering**, v. 196, p. 159–169, 2017.

SHAMIM, F.; HERNÁNDEZ, R.; PAULEN, R.; ENGELL, S. A hierarchical coordination approach to the optimal operation of a sugar crystallization process. **Computer Aided Chemical Engineering**, v. 38, p. 703-708, 2016.

SMAÏLI, F.; ANGADI, D. K.; HATCH, C. M.; HERBERT, O.; VASSILIADIS, V. S.; WILSON, D. I. Optimization of scheduling of cleaning in heat exchanger networks subject to fouling. **Food and Bioproducts Processing**, v. 77, n. 2, p. 159–164, 1999.

SYED, M. S.; DOOLEY, K. M.; MADRON, F.; KNOPF, F. C. Enhanced turbine monitoring using emissions measurements and data reconciliation. **Applied Energy**, v. 173, p. 355–365, 2016.

TEIXEIRA, M. **Análise: queda nos preços do açúcar e do petróleo mina recuperação de usinas endividadas**, 2017. Disponível em: <<https://www.novacana.com/n/etanol/mercado/precos/analise-queda-precos-acucar-petroleo-recuperacao-usinas-endividadas-120717>>.

Acesso em: 21 set. 2017.

TOLEDO, M. **Crise no setor canavieiro provoca fechamento de usinas e demissões**, 2015. Disponível em: <<http://www1.folha.uol.com.br/mercado/2015/07/1655141-crise-no-setor-canavieiro-provoca-fechamento-de-usinas-e-demissoes.shtml>>. Acesso em: 21 set. 2017.

UNICA (UNIÃO DA INDÚSTRIA DE CANA DE AÇÚCAR). **Histórico de produção e moagem por safra**, 2018. Disponível em: <<http://www.unicadata.com.br/historico-de-producao-e-moagem.php>>. Acesso em: 29 mai. 2018.

USDA (UNITED STATES DEPARTMENT OF AGRICULTURE). **Sugar: world markets and trade**, 2018. Disponível em: <<https://apps.fas.usda.gov/psdonline/circulars/Sugar.pdf>>. Acesso em: 11 dez. 2018.

YIN, S.; DING, S. X.; XIE, X.; LUO, H. A review on basic data-driven approaches for industrial process monitoring. **IEEE Transactions on Industrial Electronics**, v. 61, n. 11, p. 6418–6428, 2014.

YIN, S.; LI, X.; GAO, H.; KAYNAK, O. Data-based techniques focused on modern industry: an overview. **IEEE Transactions on Industrial Electronics**, v. 62, n. 1, p. 657–667, 2015.

Capítulo 2 – RECONCILIAÇÃO DE DADOS APLICADA À IDENTIFICAÇÃO DE PERDAS DA INDÚSTRIA AÇUCAREIRA¹

RESUMO

A busca pela correta quantificação e redução de perdas e, conseqüentemente, pelo aumento da eficiência industrial, é um desafio constante nas indústrias do setor sucroenergético. Entretanto, pouco enfoque é dado às perdas indeterminadas, para as quais não existem procedimentos e rotinas de medição e quantificação, apesar do alto impacto que elas podem exercer sobre a eficiência industrial acumulada ao final da safra. Dessa forma, este trabalho teve por objetivos quantificar a contribuição do setor de fabricação de açúcar no total das perdas indeterminadas de uma usina produtora de açúcar e etanol, e apresentar um método que possa ser aplicado individualmente a equipamentos do processo industrial, para auxiliar a rápida identificação e correção das perdas. O método descrito foi baseado na técnica de reconciliação de dados de vazões e concentrações das correntes do processo, e aplicado à etapa de concentração do caldo, utilizando o Microsoft Excel. Por meio dos resultados obtidos na reconciliação, foi possível a realização de balanço de massa nas etapas posteriores, de cozimento, centrifugação e secagem, e a comparação entre a produção de açúcar calculada e a produção real da usina. Levando em consideração a totalidade do período estudado, a produção calculada superou a produção real em 34.037 sacos de 50 quilos, e identificou-se que 37,3% das perdas indeterminadas da unidade ocorreram entre as etapas de pré-evaporação do caldo e ensaque do açúcar.

Palavras-chave: reconciliação de dados, eficiência industrial, perdas de açúcar, perdas indeterminadas, indústria de açúcar.

2.1 Introdução

A “eficiência industrial” em usinas do setor sucroenergético indica a porcentagem dos açúcares redutores totais (ART), dentre o total contido inicialmente na cana, que foi, ao final do processo industrial, recuperada na forma de açúcar, etanol, e outros produtos. Introduzido na década de 1980 pelo Centro de Tecnologia Copersucar, hoje chamado Centro de Tecnologia Canavieira (CTC), com o objetivo de avaliar o desempenho do processo industrial das usinas, este indicador é calculado dividindo-se a massa de ART contabilizada nos produtos pela massa de ART presente na cana processada na usina (FERNANDES, 2011).

¹Este trabalho foi publicado no periódico *Sugar Tech* (ISSN 0972-1525), com o título “*Data Reconciliation Applied to Loss Identification in the Sugar Industry*” (doi.org/10.1007/S12355-018-0649-4).

De acordo com levantamento de indicadores e custos de produção das usinas do setor sucroenergético na safra 2013/14, realizado pelo Programa de Educação Continuada em Economia e Gestão de Empresas (PECEGE), em parceria com a Confederação Nacional de Agricultura e Pecuária (CNA), as usinas das regiões denominadas “Centro-Sul Tradicional” (SP e PR), “Centro-Sul Expansão” (MG, GO, MS e MT) e “Nordeste” (AL, PE e PB) apresentaram perdas industriais, na referida safra, de 8,2%, 7,5% e 10,4%, respectivamente. Isto é, suas eficiências industriais foram de 91,8%, 92,5% e 89,6%, respectivamente (BIGATON et al., 2015).

Do total de açúcares redutores totais processados na usina que não são convertidos em produtos finais (açúcar, etanol, dentre outros), parte é identificada e quantificada nas perdas determinadas, e o restante compõe as perdas indeterminadas, para as quais não existe uma rotina de medição e quantificação. As perdas determinadas são conhecidas e mensuráveis, e é grande o direcionamento de esforços nas usinas para sua correta quantificação e para a discussão de alternativas que minimizem seus impactos sobre o resultado geral da planta industrial, aumentando, dessa forma, a competitividade do setor e potencializando suas margens de lucro (LEMOS, 2015). As perdas determinadas são, usualmente, divididas em: perda na água de lavagem de cana, no bagaço, na torta de filtração, nos multijatos de evaporadores e cozedores, nas águas residuais, na fermentação, na vinhaça e na flegmaça (FERNANDES, 2011).

Por outro lado, as perdas indeterminadas representam um grande desafio para as indústrias do setor sucroenergético, pois, diferentemente das determinadas, valores altos não direcionam esforços no sentido de aumento de eficiência da planta. São exemplos de perdas indeterminadas: perdas de cana no pátio durante o descarregamento e manuseio; fermentação de açúcares no armazenamento da cana por microrganismos como bactérias e leveduras, que entram no processo juntamente com a matéria-prima; destruição de sacarose nos decantadores de caldo e evaporadores, devido a descontroles de pH, temperatura e tempo de retenção; deposições cristalinas devido à má circulação da massa na etapa de cozimento; perdas durante o manuseio do açúcar produzido, além de erros de amostragem e de análises, dentre outros. Seu valor nas usinas produtoras de açúcar e etanol varia entre menos de 1% até 3%, podendo, assim, ter um alto impacto na eficiência industrial acumulada ao final da safra (FERNANDES, 2011).

Uma alternativa para identificação dessas perdas é a aplicação de balanço de massa em equipamentos ou setores da usina, desde que haja medidores de vazão e pontos de coleta de amostras para análises laboratoriais tanto na entrada como na saída das correntes

contendo açúcares. A comparação entre a vazão de saída de ART medida e a calculada pelo balanço levaria à quantidade de açúcares perdida no equipamento ou setor. Entretanto, visto que as medições de vazão e análises de concentração estão sujeitas a variações do processo e a erros analíticos, que diferem em magnitude, dependendo dos tipos de análise e instrumentos utilizados, tal abordagem poderia levar à aparente violação das leis de conservação. Por exemplo, a aplicação de balanço de massa para os sólidos solúveis, utilizando as análises de brix, ou o balanço de massa para a sacarose, utilizando as análises de pol, ou ainda o balanço de massa para os açúcares redutores totais, certamente levariam a conclusões diferentes (HUBBARD; LOVE, 1998).

Para solucionar este tipo de problema, no qual uma grande quantidade de informações gera uma incerteza ao invés de uma confirmação dos resultados esperados, pode-se fazer uso do método de reconciliação de dados (NARASIMHAN; JORDACHE, 2000; ROMAGNOLI; SÁNCHEZ, 2000). Trata-se de um procedimento de ajuste das variáveis medidas, levando em consideração as incertezas das medições, de forma a atender as leis de conservação e outras restrições. A reconciliação de vazões e composições de correntes de processo foi apresentada matematicamente como um problema de minimização por Beckman (1982), e Crowe (1996) resumiu os principais avanços teóricos e de aplicação prática do método.

Hubbard e Love (1998) apresentaram uma aplicação prática do método de reconciliação de dados com o objetivo de avaliar o desempenho de uma centrífuga contínua de açúcar. O trabalho concluiu que o método apresentou acurácia de 99,98% e comprovada robustez, comparando-o aos balanços de massa tradicionalmente utilizados. Outra aplicação prática da reconciliação de dados na indústria açucareira foi estudada por Smaïli et al. (1999), que utilizaram a técnica para o tratamento de dados coletados no setor de aquecimento do caldo de uma refinaria de açúcar, com o objetivo de obter o comportamento das incrustações nos trocadores de calor e otimizar o calendário de limpeza desses equipamentos, diminuindo a necessidade de paradas, e buscando o atendimento da demanda por produção.

Diversos trabalhos propuseram a aplicação da técnica de reconciliação de dados a outros processos industriais, como indústrias química e petroquímica, com o objetivo de identificação e gerenciamento do consumo de água (MARTINS et al., 2010); unidades de geração de energia a carvão, mostrando considerável redução dos erros nos cálculos de vazões e temperaturas (JIANG; LIU; LI, 2014); e sistemas de cogeração, com o objetivo de auxiliar a

rápida identificação e correção de problemas em turbinas, que não seriam imediatamente detectados pelas ferramentas clássicas de monitoramento e diagnóstico (SYED et al., 2016).

O presente estudo teve como objetivo aplicar o método de reconciliação de dados ao balanço de massa da etapa de fabricação de açúcar de uma usina, de forma a identificar a contribuição dessa etapa do processo industrial nas perdas indeterminadas da unidade. O método descrito, que pode ser aplicado a qualquer equipamento ou processo que contenha os medidores de vazão e pontos de coleta necessários, é uma alternativa para facilitar a identificação e correção de perdas, mesmo aquelas que, atualmente, compõem o rol das perdas indeterminadas, tão logo elas ocorram durante a safra, contribuindo, dessa forma, para o aumento da eficiência industrial.

2.2 Materiais e métodos

Nesta seção, estão explicitados os balanços de massa realizados em dois volumes de controle na etapa de produção de açúcar, utilizando resultados de análises laboratoriais e vazões de processo obtidas por meio de histórico em supervisório, no período da safra entre 03 de junho e 31 de outubro de 2015, de uma usina localizada no interior do Estado de São Paulo. O primeiro volume de controle foi estabelecido no setor de concentração do caldo, entre a corrente de caldo clarificado, na entrada dos pré- evaporadores, e a saída de xarope após a etapa de flotação. O medidor de vazão instalado na linha de xarope flotado não tinha comunicação com o supervisório, não sendo possível, portanto, obter um histórico de valores para esta variável. Dessa forma, foi utilizado, neste volume de controle, o método de reconciliação de dados para obtenção de valores confiáveis para essa vazão.

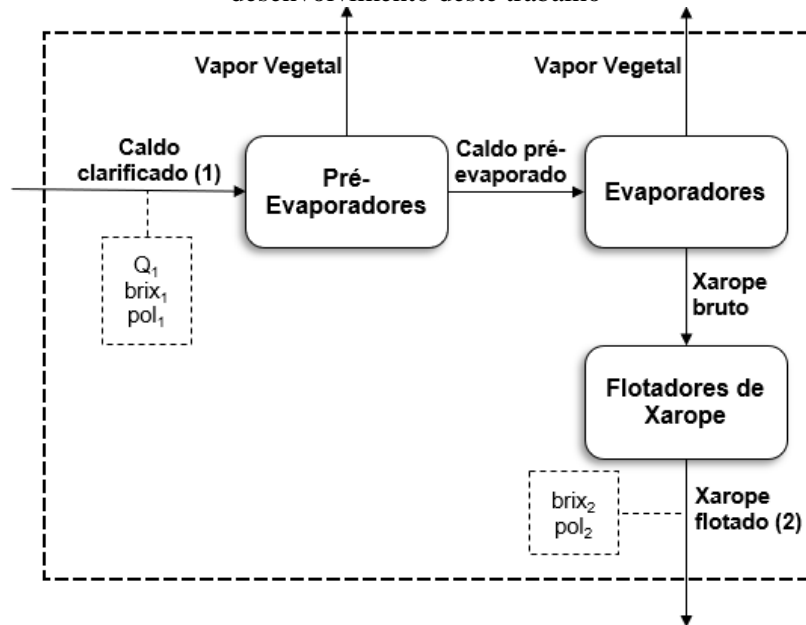
Com a vazão de xarope flotado determinada pela reconciliação de dados no volume de controle do setor de concentração do caldo, foi realizado balanço de massa no segundo volume de controle, que englobou as etapas de cozimento, centrifugação e secagem do açúcar. Este balanço objetivou a determinação da vazão teórica de açúcar produzido, que foi comparada com a produção real de açúcar da usina durante o período em questão.

2.2.1 Balanço de massa e reconciliação de dados no setor de concentração do caldo

Os possíveis balanços de massa para o setor de concentração do caldo, cujo diagrama de blocos está representado na Figura 2.1, estão descritos nas Equações 2.1 e 2.2, nas quais F representa vazão mássica, Q é a vazão volumétrica, ρ , a densidade da solução, $brix$, a porcentagem mássica de sólidos dissolvidos, e pol , o resultado da análise de polarização da

solução. Os subíndices 1 e 2 representam as correntes de caldo clarificado e xarope flotado, respectivamente. Ou seja, as Equações 2.1 e 2.2 representam os balanços mássicos de brix e pol do setor de concentração do caldo. As variáveis destacadas na Figura 2.1 representam as medições feitas no processo para o desenvolvimento deste trabalho.

Figura 2.1 – Diagrama de blocos do setor de concentração do caldo, com destaque para as variáveis medidas no processo, das correntes de caldo clarificado (1) e xarope flotado (2), para o desenvolvimento deste trabalho



Fonte: Acervo pessoal

$$F_2 = \frac{Q_1 \cdot \rho_1 \cdot brix_1}{brix_2} \quad (2.1)$$

$$F_2 = \frac{Q_1 \cdot \rho_1 \cdot pol_1}{pol_2} \quad (2.2)$$

Neste volume de controle, foram desconsideradas as perdas referentes ao arraste de gotículas de caldo pelo vapor vegetal nos evaporadores e aos derramamentos de caldo e xarope no setor de concentração do caldo, pois, na usina em questão, essas perdas eram contabilizadas juntamente com as perdas nos multijatos dos cozedores e com os derramamentos de soluções açucaradas no setor de cozimento. Dessa forma, essas perdas foram consideradas no balanço de massa do segundo volume de controle, que engloba as etapas de cozimento, centrifugação e secagem.

O brix refratométrico expressa a porcentagem em massa dos sólidos solúveis contidos na solução, e sua determinação baseia-se na correlação existente entre a medida do índice de refração de uma solução açucarada e seu teor de sólidos dissolvidos. As amostras de caldo clarificado e de xarope flotado foram obtidas em pontos de coleta instalados nas respectivas tubulações, filtradas e analisadas em refratômetro da marca Atago, modelo Smart-

1, uma vez por dia. No caso do xarope flotado, antes da filtração, era realizada diluição de 100 g de amostra, com água destilada, para 400 g de solução, sendo a leitura do refratômetro multiplicada, portanto, pelo fator de diluição (4) para obtenção do brix (COPERSUCAR, 1978; CHEN; CHOU, 1993).

A análise de pol baseia-se na propriedade que os açúcares possuem de rotacionar o plano da luz polarizada. A sacarose e a glicose são açúcares dextrógiros, por desviarem a luz polarizada para a direita. Já a frutose é levógira, por desviar a luz polarizada para a esquerda. Dessa forma, a leitura polarimétrica é, a rigor, representada pela soma ponderada dos desvios dos três açúcares. Para soluções com pureza superior a 80%, ou seja, com relação pol/brix acima de 80%, como é o caso do caldo clarificado e do xarope flotado, a análise de pol da solução representa diretamente sua porcentagem mássica de sacarose. (CHEN; CHOU, 1993; FERNANDES, 2011).

Para determinação do pol do caldo clarificado e do xarope flotado, 250 ml de solução eram clarificados, filtrados e analisados em sacarímetro, marca Schmidt+Haensch, modelo Polartronic M100, com frequência de uma vez ao dia. No caso do xarope flotado, 100 g de amostra eram diluídos com água destilada até 400 g de solução, sendo a leitura fornecida pelo sacarímetro multiplicada, portanto, pelo fator de diluição (4) (COPERSUCAR, 1978; CHEN; CHOU, 1993). Os resultados foram, então, multiplicados pelo fator de pol, variável tabelada em função do brix das soluções, e que leva em conta a calibração do sacarímetro e a massa específica da solução analisada (OLIVEIRA, 2012).

A vazão volumétrica de caldo clarificado, Q_1 , foi obtida por meio de medidor de vazão instalado na linha, cujo sinal era enviado a um sistema de supervisor, com histórico. Já a densidade do caldo clarificado, ρ_1 , foi calculada a partir da Equação 2.3, obtida por meio de regressão aplicada aos dados experimentais apresentados por Chen e Chou (1993). O ajuste dos dados apresentou R^2 igual a 1,000, e o desvio médio da equação em relação aos pontos experimentais foi de 0,02%.

$$\rho_i \text{ (g/ml)} = 1,830 \cdot 10^{-5} \cdot brix_i^2 + 3,706 \cdot 10^{-3} \cdot brix_i + 1,001 \quad (2.3)$$

Os diferentes resultados para as vazões de xarope flotado, obtidos por meio dos possíveis balanços de massa descritos, levaram à utilização do método de reconciliação de dados. Tal método consiste na minimização da função $S1$ (Equação 2.4), sujeita às restrições impostas pelas leis de conservação (Equações 2.5 e 2.6). As restrições foram inseridas na equação a ser otimizada, gerando a função $S2$ (Equação 2.7) (BECKMAN, 1982; HUBBARD;

LOVE, 1998). A minimização da Equação 2.7 foi feita utilizando o método *Generalized Reduced Gradient* (GRG) não-linear da ferramenta Solver do Microsoft Excel 2013.

$$S1 = \sum_{j=1}^M \frac{W_{F_j}}{G_j^2} (G_j - F_j)^2 + \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{W_{x_{ji}}}{y_{ji}^2} (y_{ji} - x_{ji})^2 \quad (2.4)$$

$$\sum_{j=1}^M F_j = 0 \quad (2.5)$$

$$\sum_{j=1}^M F_j x_{ji} = 0, \quad 1 \leq i \leq N \quad (2.6)$$

$$S2 = S1 + W_B \left(\left(\sum_{j=1}^M F_j \right)^2 + \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^M F_j x_{ji} \right)^2 \right) \quad (2.7)$$

Nas Equações 2.4 a 2.7, G_j representa a vazão medida da corrente j , F_j , a vazão ajustada da corrente j , W_{F_j} , o fator de ponderação para vazão da corrente j , y_{ji} , a composição medida do componente i na corrente j , x_{ji} , a composição ajustada do componente i na corrente j , $W_{x_{ji}}$, o fator de ponderação para composição da corrente j , M , o número total de correntes, N , o número total de componentes, e W_B , o fator de ponderação para as restrições. Os fatores de ponderação W_{F_j} e $W_{x_{ji}}$ foram calculados por meio das Equações 2.8 e 2.9, respectivamente, nas quais σ^2 é a variância da medida de vazão ou composição.

$$W_{F_j} = 1/\sigma_{F_j}^2 \quad (2.8)$$

$$W_{x_{ji}} = 1/\sigma_{x_{ji}}^2 \quad (2.9)$$

Assim, foram utilizados os valores medidos de vazão, brix e pol do caldo clarificado, e brix e pol do xarope flotado. Essas mesmas variáveis, juntamente com as variáveis vazão de xarope flotado e vazão de vapor vegetal, que não eram medidas, foram ajustadas pela minimização da Equação 2.7. A variância dos valores medidos foi estimada por meio da Equação 2.10, que leva em consideração o intervalo de confiança $\pm a$ de cada medida. Tal estimativa pode ser realizada assumindo-se que o intervalo de confiança $\pm a$ representa 95% de uma distribuição normal de probabilidade (KNEILE, 1995).

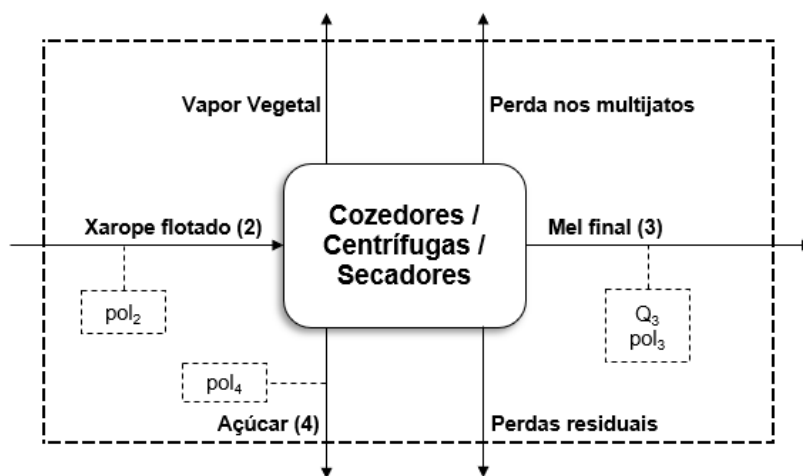
$$\sigma^2 = \left(\frac{a}{1,96} \right)^2 \quad (2.10)$$

2.2.2 Balanço de massa nos setores de cozimento, centrifugação e secagem

Utilizando a vazão mássica de xarope flotado, F_2 , e o pol do xarope flotado, pol_2 , obtidos por meio do método de reconciliação de dados, foi realizado balanço de massa

para o segundo volume de controle da fabricação de açúcar, cujo diagrama de blocos está representado na Figura 2.2. Neste balanço, foram introduzidas as perdas de ART por arraste de gotículas de caldo pelo vapor (perda nos multijatos) e as perdas por derramamento de soluções açucaradas (perdas residuais) do processo de produção de açúcar como um todo, que engloba os dois volumes de controle tratados neste trabalho. As variáveis em destaque na figura são as medições realizadas no processo para o cálculo do balanço.

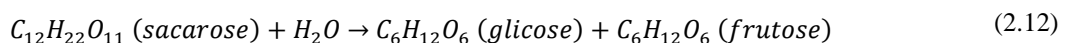
Figura 2.2 – Diagrama de blocos dos setores de cozimento, centrifugação e secagem, com destaque para as variáveis medidas no processo, das correntes xarope flotado (2), mel final (3) e açúcar (4), para o desenvolvimento deste trabalho



Fonte: Acervo pessoal

A Equação 2.11 apresenta o balanço de massa de sacarose, aplicado a este volume de controle, na qual s representa a porcentagem mássica de sacarose contida na corrente e os subíndices 2, 3 e 4 são as correntes de xarope flotado, mel final e açúcar, respectivamente. Os açúcares redutores totais, ou ART, são todos os açúcares presentes na corrente, na forma de açúcar invertido, ou seja, glicose e frutose. Para converter os valores das perdas, expressas em toneladas de ART por hora, em vazões mássicas de sacarose, os termos da Equação 2.11 referentes a elas foram multiplicados por 0,95, pois a hidrólise da sacarose consiste na reação química expressa na Equação 2.12. Sabendo-se que a massa molar da sacarose é 342,2992 g/mol e a massa molar da glicose e da frutose é 360,3144 g/mol, cada 0,95 g de sacarose gera, na reação de inversão, 1,00 g de açúcar invertido (FERNANDES, 2011).

$$F_2 \cdot \frac{s_2}{100} = Q_3 \cdot \rho_3 \cdot \frac{s_3}{100} + F_4 \cdot \frac{s_4}{100} + (Perda\ multijato + Perda\ residual) \cdot 0,95 \quad (2.11)$$



A vazão volumétrica de mel final, Q_3 , foi obtida por meio de medidor de vazão instalado na linha, com histórico em supervisor, a partir do qual foram calculadas as médias

diárias. A densidade, ρ_3 , foi calculada a partir do brix do mel final, por meio da Equação 2.3. Para determinação do brix do mel final, realizou-se procedimento experimental análogo ao descrito anteriormente para determinação do brix do caldo clarificado e do xarope flotado, sendo que, neste caso, era feita diluição de 100 g de amostra para 600 g de solução, com água destilada, com frequência de uma vez ao dia (COPERSUCAR, 1978; CHEN; CHOU, 1993).

A análise de pol do mel final foi feita uma vez ao dia, adotando procedimento experimental análogo ao descrito anteriormente para análise de pol do caldo clarificado e do xarope flotado, sendo que, neste caso, era feita diluição de 100 g de amostra para 600 g de solução, com água destilada (COPERSUCAR, 1978; CHEN; CHOU, 1993). Para materiais com pureza entre 37% e 80%, como é o caso do mel final, a porcentagem mássica de sacarose não pode ser tomada diretamente como o pol, mas pode ser estimada a partir deste, por meio da Equação 2.13 (FERNANDES, 2011).

$$s_i = 0,8857 \cdot pol_i + 7,6429 \quad (2.13)$$

A porcentagem mássica de sacarose no açúcar final, s_4 , é a própria polarização do açúcar. O procedimento experimental para sua determinação, realizado 3 vezes ao dia, consistiu em pesar, em becker de 150 ml, 26 g da amostra de açúcar previamente homogeneizado, e transferir quantitativamente para balão volumétrico de 100 ml. Em mesa agitadora, o açúcar era, então, dissolvido completamente com água destilada. O volume do balão era completado e a solução, filtrada em papel de filtro, desprezando os primeiros 10 ml de material filtrado. Durante a filtração, o funil era mantido coberto com vidro-relógio para evitar evaporação do material. O material era, então, passado pelo sacarímetro, marca Schmidt+Haensch, modelo Polartronic M100, cuja leitura representa diretamente a polarização do açúcar (LOPES; BORGES, 2004).

As perdas nos multijatos e residuais, medidas no processo e expressas em porcentagem de ART perdida em relação a todo ART processado na usina no dia, foram quantificadas por HPLC, utilizando coluna Shodex KS-801. Eram identificados os picos de sacarose, glicose e frutose, e o resultado era inteiramente convertido para massa de açúcar invertido (glicose e frutose).

A água utilizada para formação de vácuo nos evaporadores e cozedores, após passar pelos condensadores (multijatos) destes equipamentos, era destinada a um sistema de resfriamento por aspersão, e voltava aos mesmos equipamentos, permanecendo em circuito fechado. Foram realizadas coletas desta água, 6 vezes ao dia, em dois amostradores contínuos:

um, alocado na entrada, e o outro, na saída do sistema de vácuo. A diferença entre a quantidade de ART nos dois pontos representou a perda por arraste nos condensadores. Essa quantidade, dividida pela quantidade total de ART processada na usina no dia, foi chamada $\%ART_{mult}$.

O caldo e o xarope provenientes de derramamentos no setor de fabricação de açúcar eram destinados a uma calha Parshall, equipada com um medidor de vazão e um amostrador contínuo. Foram coletadas amostras desta água 6 vezes por dia para análise. A quantidade de ART resultante da análise, dividida pelo total de ART processado na usina no dia, foi chamada $\%ART_{res}$.

Portanto, as parcelas referentes às perdas na Equação 2.11 foram calculadas por meio das Equações 2.14 e 2.15, nas quais C representa a vazão de cana processada no dia, em t/h, e ART_{cana} é a quantidade de açúcares redutores totais presentes na cana, em kg/t. Dessa forma, a Equação 2.11 pode ser reescrita na forma da Equação 2.16, por meio da qual foram calculadas as vazões teóricas de açúcar final produzido entre os dias 03 de junho e 31 de outubro de 2015. Esta vazão foi comparada com a produção real de açúcar da usina, por meio da Equação 2.17, e os desvios diários foram analisados.

$$Perda\ multijato = \frac{\%ART_{mult}}{100} \cdot C \cdot ART_{cana} \quad (2.14)$$

$$Perda\ residual = \frac{\%ART_{res}}{100} \cdot C \cdot ART_{cana} \quad (2.15)$$

$$F_4 = \frac{F_2 \cdot \frac{S_2}{100} - Q_3 \cdot \rho_3 \cdot \frac{S_3}{100} - 0,95 \cdot C \cdot ART_{cana} \cdot \left(\frac{\%ART_{mult}}{100} + \frac{\%ART_{res}}{100} \right)}{\frac{S_4}{100}} \quad (2.16)$$

$$Desvio(\%) = \left| \frac{Produção\ real - F_4}{Produção\ real} \right| \cdot 100\% \quad (2.17)$$

Por meio das Equações 2.18 e 2.19, os resultados diários do balanço de massa para a produção de açúcar, F_4 , e a produção real de açúcar foram convertidos em vazões mássicas de ART. A Equação 2.20 foi utilizada para transformar a perda indeterminada do período, $\%ART_{indet}$, expressa como uma porcentagem de ART sobre o total de açúcares redutores processados na unidade diariamente, em toneladas de ART por hora. Os valores de $\%ART_{indet}$, fornecidos pela usina, foram estimados diariamente pela indústria como a diferença entre a massa total de ART processada no dia e todas as saídas de ART medidas no processo, sejam elas produtos finais ou perdas determinadas, dividida pela massa total de ART processada. A diferença entre as massas de ART calculadas pelas Equações 2.18 e 2.19 foi, então, comparada com a massa de ART contabilizada nas perdas indeterminadas, resultado da Equação 2.20.

$$F_4(t_{ART}/h) = F_4(t/h) \cdot \frac{S_4/100}{0,95} \quad (2.18)$$

$$Produção\ real(t_{ART}/h) = Produção\ real(t/h) \cdot \frac{S_4/100}{0,95} \quad (2.19)$$

$$Perda\ indeterminada = \frac{\%ART_{indet}}{100} \cdot C \cdot ART_{cana} \quad (2.20)$$

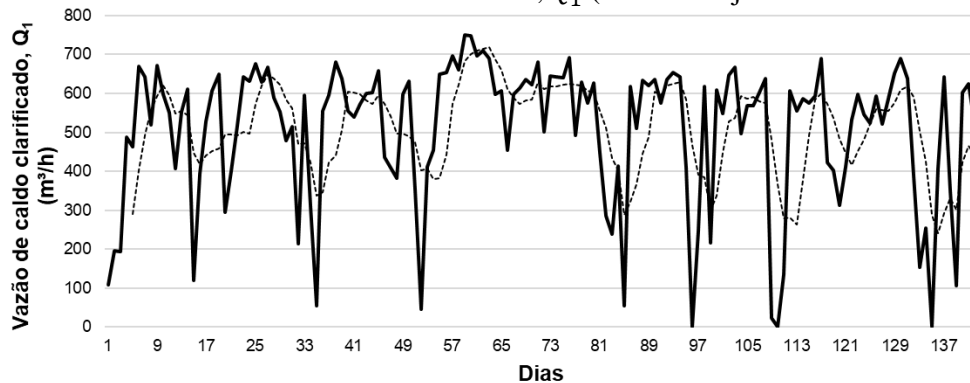
2.3 Resultados e discussão

Nesta seção, são apresentados e discutidos os resultados obtidos na reconciliação de dados e nos balanços de massa realizados nos dois volumes de controle da fabricação de açúcar.

2.3.1 Balanço de massa e reconciliação de dados no setor de concentração do caldo

Na Figura 2.3, pode-se verificar a vazão volumétrica de caldo clarificado, Q_1 , a qual apresentou média de 507,1 m³/h e desvio padrão igual a 181,7 m³/h no período considerado no estudo. A linha tracejada no gráfico representa a média móvel de cinco dias da variável.

Figura 2.3 – Vazão volumétrica de caldo clarificado, Q_1 (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)



Os resultados de brix do caldo clarificado e do xarope flotado, utilizados nos balanços de massa e na reconciliação de dados, podem ser visualizados nas Figuras 2.4 e 2.5, respectivamente.

Figura 2.4 – Brix do caldo clarificado, $brix_1$ (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)

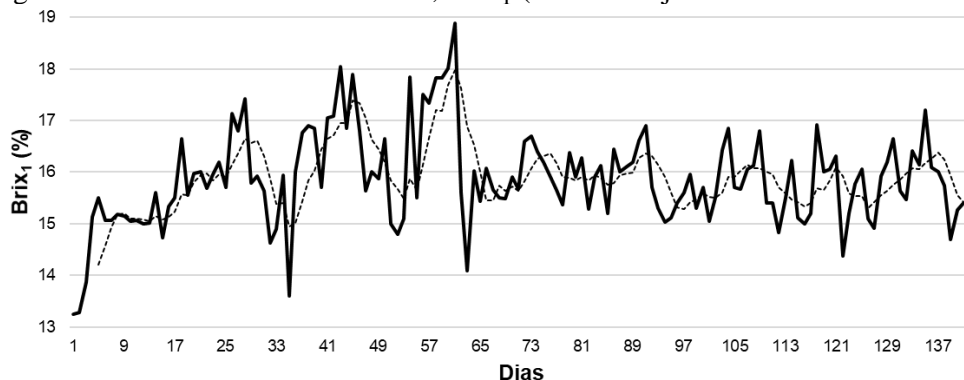
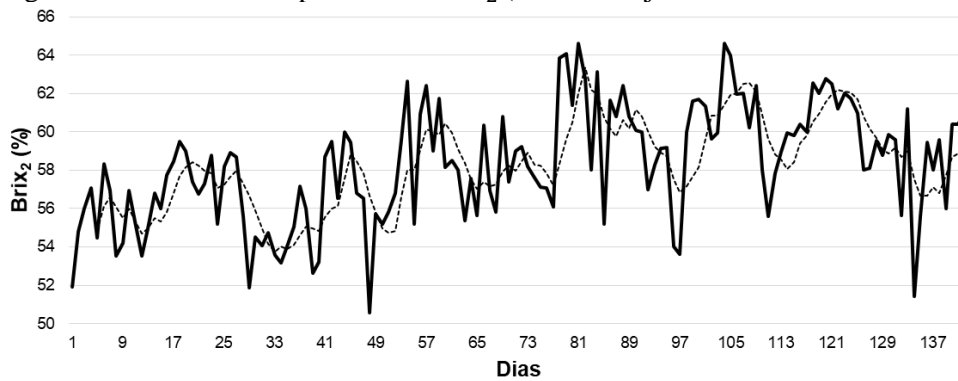


Figura 2.5 – Brix do xarope flotado, $brix_2$ (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)



Nas Figuras 2.6 e 2.7, estão os resultados de pol do caldo clarificado e do xarope flotado, respectivamente. Os valores médios e desvios padrão destas variáveis estão apresentados na Tabela 2.1.

Figura 2.6 – Pol do caldo clarificado, pol_1 (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)

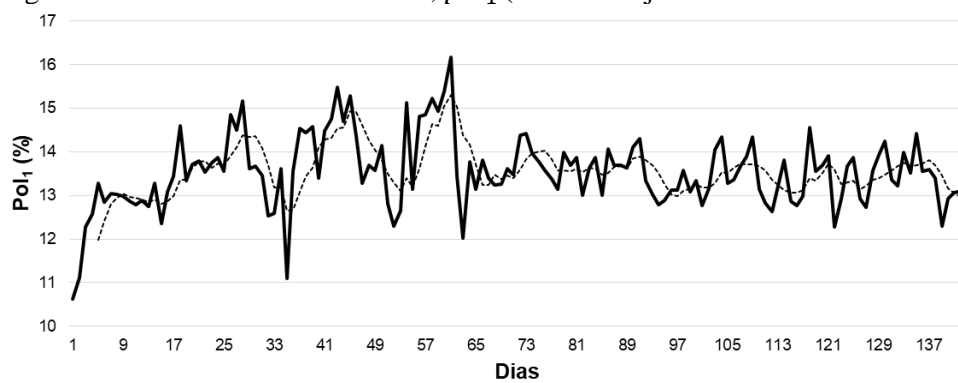


Figura 2.7 – Pol do xarope flotado, pol_2 (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)

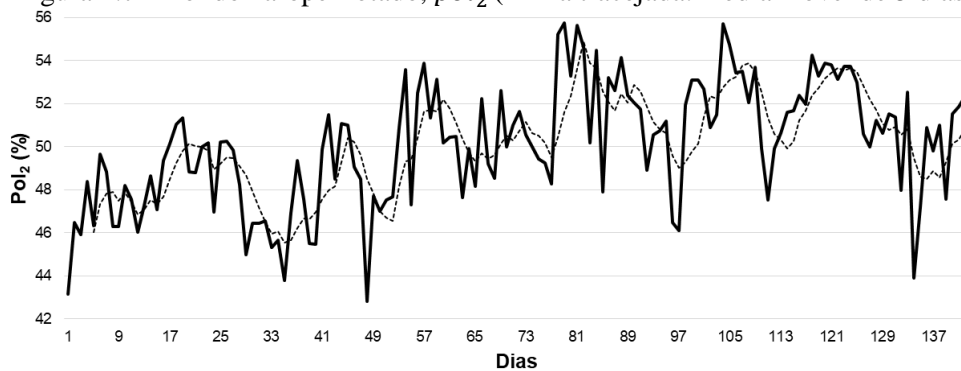


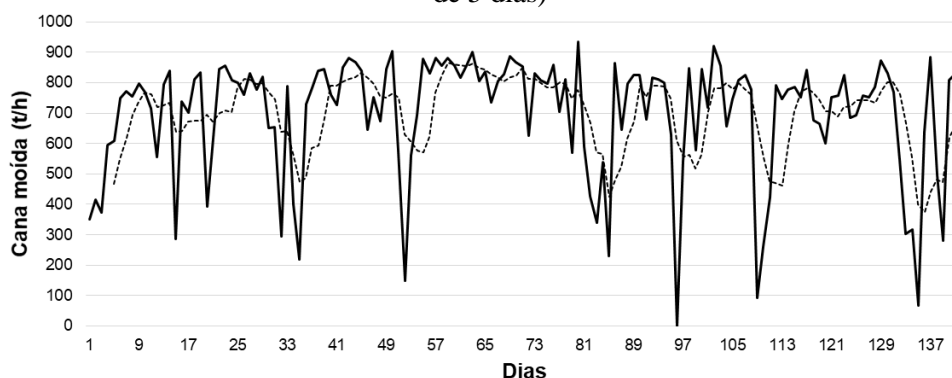
Tabela 2.1 – Valores médios e desvios padrão das medidas de brix e pol do caldo clarificado (1) e xarope flotado (2)

	$brix_1$	$brix_2$	pol_1	pol_2
Média (%)	15,9	58,3	13,5	50,1
Desvio padrão (%)	0,9	3,0	0,8	2,8

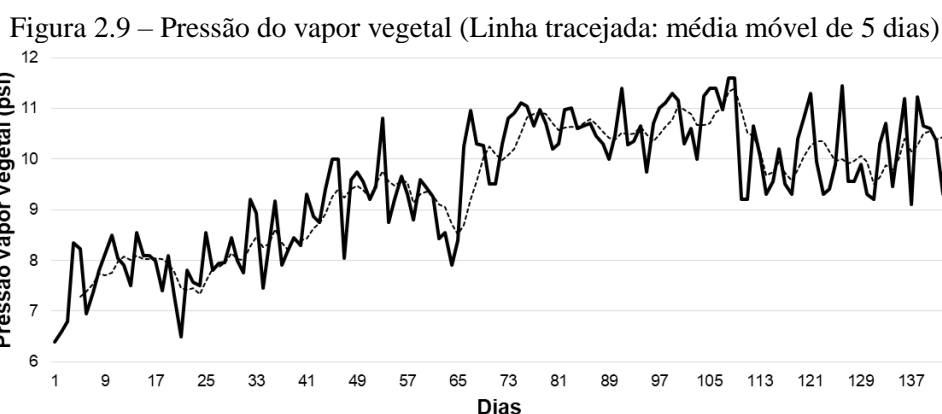
A vazão volumétrica de caldo clarificado, Q_1 , apresentou alta variação, decorrente, principalmente, da alta instabilidade do processo de extração do caldo ocorrida no

referido ano. Essa instabilidade pode ser verificada na análise dos dados de moagem de cana por hora, mostrados na Figura 2.8, que apresentaram média de 696,6 t/h e desvio padrão de 196,9 t/h.

Figura 2.8 – Médias diárias de moagem de cana, em toneladas por hora (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)



As duas principais causas da instabilidade foram os problemas mecânicos apresentados pelas moendas e os desarmes do gerador de energia elétrica, que ocorreram com frequência, sendo que estes últimos causavam parada total da planta industrial. Tais problemas também influenciaram a oferta de vapor de escape e, conseqüentemente, de vapor vegetal para as operações da fábrica de açúcar. Na Figura 2.9, constam os dados de pressão relativa na linha de vapor vegetal, obtidos por meio de histórico em supervisorio, que apresentaram média de 9,5 psi e desvio padrão de 1,3 psi no período.



Com o objetivo de concentrar o caldo até brix maiores que 60,0%, as etapas do processo contempladas neste volume de controle foram prejudicadas, durante o período estudado, pelas grandes instabilidades de moagem e pressão de vapor, descritas acima. Dado que a pureza do xarope flotado deve ser de, no mínimo, 85,0%, o mínimo valor de pol aceitável seria de 51,0%. O aumento da oferta de vapor vegetal após o dia 65 do período estudado,

verificado pelas médias diárias das pressões apresentadas na Figura 2.9, levou a uma melhora nas concentrações do xarope flotado (Figuras 2.5 e 2.7), apesar de a instabilidade se manter.

Os resultados dos balanços de massa aplicados para determinação da vazão mássica de xarope flotado, F_2 , apresentaram divergência de até 8% entre si, o que motivou a aplicação do método de reconciliação de dados, de modo que tanto o balanço de massa global, como o de brix e o de pol fossem atendidos. A metodologia foi aplicada para todos os dias do período, sendo que um dos dias está exemplificado na Tabela 2.2. As variáveis não medidas foram a vazão de xarope flotado, F_2 , e a vazão de vapor, F_{vapor} . Três equações foram utilizadas – balanços de massa global, de brix e de pol. Portanto, o grau de redundância, ou seja, o número de equações menos o número de variáveis não medidas, foi igual a um.

Tabela 2.2 – Exemplificação do método de reconciliação de dados, utilizando os dados do 28º dia do período estudado

	Valor medido (G_j, y_{ij})	Valor ajustado (F_j, x_{ij})	Intervalo de confiança ($\pm a$)	Desvio padrão (σ)	Fator de ponderação (WF_j, Wx_{ij})	Ajuste ponderado ao quadrado
F_1 (t/h)	630,22	629,55	4,03	2,055	0,24	$2,73 \cdot 10^{-7}$
$brix_1$ (%)	17,42	17,42	0,03	0,013	6049,38	$7,20 \cdot 10^{-5}$
pol_1 (%)	15,16	15,16	0,02	0,011	8879,44	$4,89 \cdot 10^{-5}$
F_2 (t/h)		197,62				
$brix_2$ (%)	55,60	55,50	0,10	0,051	378,09	$1,15 \cdot 10^{-3}$
pol_2 (%)	48,23	48,29	0,08	0,042	554,96	$7,81 \cdot 10^{-4}$
F_{vapor} (t/h)		431,93				

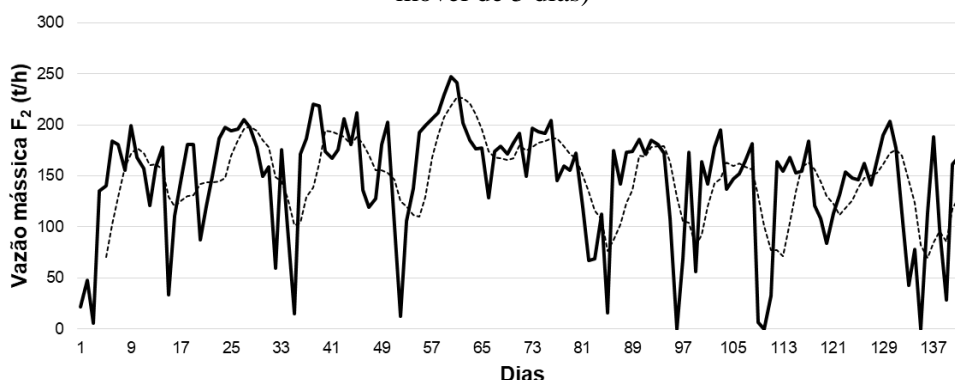
	Restrição	Restrição ao quadrado
BM global	$-1,89 \cdot 10^{-5}$	$3,56 \cdot 10^{-10}$
BM brix	$-5,97 \cdot 10^{-3}$	$3,57 \cdot 10^{-5}$
BM pol	$6,86 \cdot 10^{-3}$	$4,71 \cdot 10^{-5}$
S2		$2,14 \cdot 10^{-3}$

Utilizando o método GRG não-linear da ferramenta “Solver” do Microsoft Excel 2013, o valor S2, que corresponde à soma da coluna “ajuste ponderado ao quadrado” e “restrição ao quadrado”, foi minimizado, variando-se os valores da coluna “valor ajustado”. Os fatores de ponderação, WF_j e Wx_{ij} , foram calculados a partir das variâncias, σ^2 (Equações 2.8 e 2.9), sendo estas estimadas a partir dos intervalos de confiança $\pm a$ de cada medida (Equação 2.10). Estes, por sua vez, foram considerados iguais às incertezas expandidas, obtidas a partir dos certificados de calibração dos equipamentos utilizados na medição de cada variável, de

forma que o intervalo de confiança representasse 95% da distribuição normal de probabilidade. No caso das variáveis referentes à corrente de xarope flotado, as incertezas do refratômetro e do sacarímetro foram multiplicadas pelo fator de diluição utilizado no procedimento experimental. Dessa forma, os fatores de ponderação refletiram os intervalos de confiança de cada medida, sendo que fatores maiores corresponderam a medidas mais confiáveis. Para garantir o atendimento aos três balanços de massa, foi utilizado fator de ponderação para as restrições (WB) igual a 1 (HUBBARD; LOVE, 1998).

Os resultados do método de reconciliação de dados para a vazão de xarope flotado, em todos os dias do período, estão mostrados na Figura 2.10, na qual a linha tracejada é a média móvel de cinco dias. Essa variável apresentou média de 146,3 t/h e desvio padrão de 56,0 t/h.

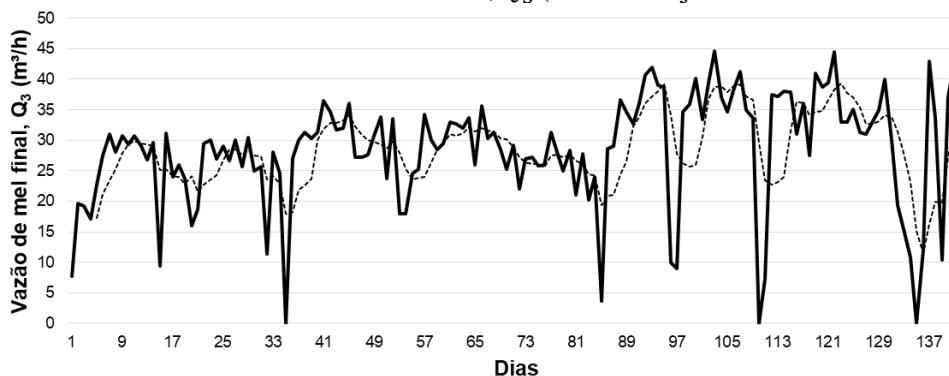
Figura 2.10 – Vazão mássica de xarope flotado (F_2) obtida por meio do método de reconciliação de dados aplicado ao volume de controle do setor de concentração do caldo (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)



2.3.2 Balanço de massa nos setores de cozimento, centrifugação e secagem

Os dados obtidos para vazão de mel final, Q_3 , podem ser vistos na Figura 2.11. Esta variável apresentou média de 28,5 m³/h, e desvio padrão igual a 9,2 m³/h.

Figura 2.11 – Vazão volumétrica de mel final, Q_3 (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)



A vazão de mel final apresentou alta variação, aliada às instabilidades de moagem e vapor, já discutidas anteriormente. Os teores mássicos de sacarose das correntes de xarope flotado (s_2), mel final (s_3) e açúcar (s_4) podem ser vistos nas Figuras 2.12, 2.13 e 2.14, respectivamente. Para a análise da porcentagem mássica de sacarose do xarope flotado, valem as mesmas observações feitas na análise da Figura 2.7, com a ressalva de que, aqui, já estão considerados os valores reconciliados.

Figura 2.12 – Porcentagem mássica de sacarose do xarope flotado, s_2 (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)

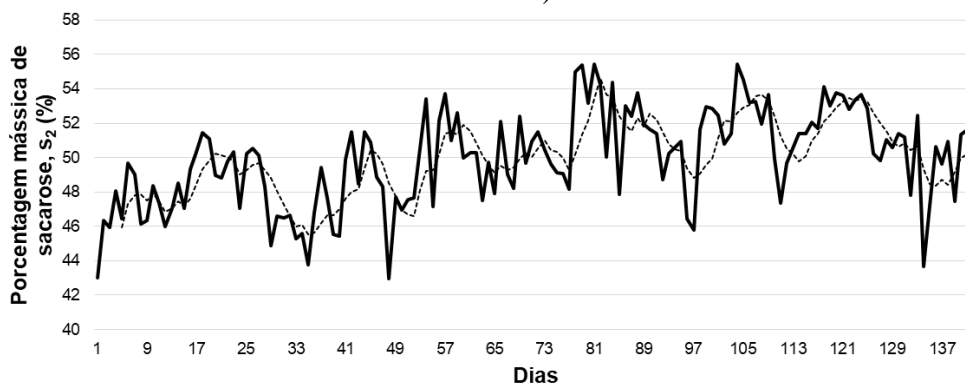


Figura 2.13 – Porcentagem mássica de sacarose do mel final, s_3 (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)

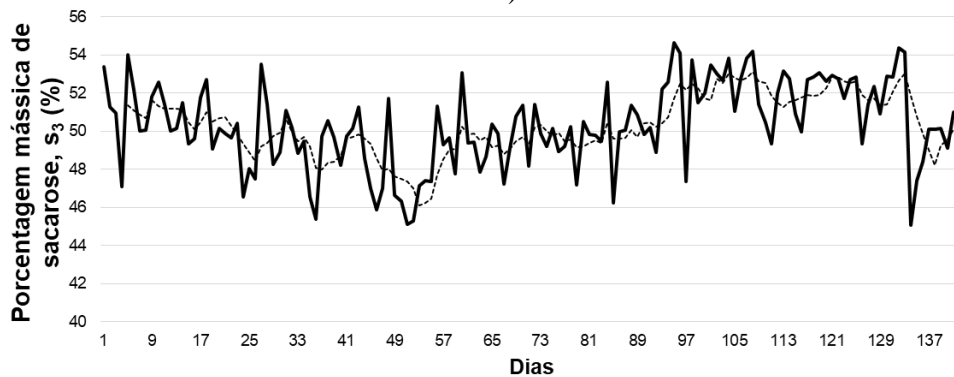


Figura 2.14 – Porcentagem mássica de sacarose do açúcar, s_4 (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)



Como o xarope flotado apresentou pureza média de 85,92%, com desvio padrão de 0,88% no período, a porcentagem mássica de sacarose foi considerada como o resultado da

análise de pol desta corrente. Já para o mel final, que apresentou pureza média de 59,79%, com desvio padrão de 2,67% no período, a porcentagem mássica de sacarose foi calculada pela Equação 2.13. Os valores médios e desvios padrão das porcentagens de sacarose, s_2 , s_3 e s_4 , estão na Tabela 2.3.

Tabela 2.3 – Valores médios e desvios padrão das porcentagens mássicas de sacarose do xarope flotado (2), do mel final (3) e do açúcar (4)

	s_2	s_3	s_4
Média (%)	49,9	50,3	99,8
Desvio padrão (%)	2,8	2,2	$2,5 \cdot 10^{-2}$

A porcentagem de sacarose no mel final apresentou baixa variação. Esta variável é altamente dependente do procedimento de cristalização, se este é conduzido em duas ou três massas. Na maior parte das usinas brasileiras, e também na usina em questão, é utilizado o sistema de duas massas de cozimento, que não visa à diminuição máxima possível da pureza da massa. Isso ocorre devido ao fato de estas plantas estarem atreladas a plantas de produção de etanol, que utilizam como matéria-prima o mel final (FERNANDES, 2011).

Destaque especial deve ser dado à porcentagem de sacarose no açúcar final, s_4 . Apesar das variações das vazões do processo, da instabilidade observada na pressão do vapor vegetal e na discussão anterior sobre as constantes paradas gerais da planta industrial por motivos de desarme do gerador de energia elétrica, e considerando ainda que a etapa de cristalização da sacarose é a etapa com menor grau de automatização da planta, a concentração mássica de sacarose no produto final foi extremamente elevada, e a variação muito pequena. Isso se deve ao fato de ser a cristalização um dos melhores métodos conhecidos para a obtenção de sólidos puros, tendo ainda a vantagem de fornecer um produto final com muitas propriedades desejáveis, tais como uniformidade, alta escoabilidade, fácil manuseio e armazenamento (MULLIN, 2001).

As perdas nos multijatos e nas águas residuais, em toneladas de ART por hora, que foram consideradas no balanço de massa para este volume de controle, são apresentadas nas Figuras 2.15 e 2.16, respectivamente. A perda nos multijatos apresentou média de 0,5 t/h e desvio padrão de 0,1 t/h, enquanto a perda nas águas residuais apresentou média de 0,7 t/h e desvio padrão de 0,4 t/h. Em relação ao ART processado na unidade industrial, essas perdas foram de 0,50% e 0,95%, em média, respectivamente.

Figura 2.15 – Perda de ART nos multijatos (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)

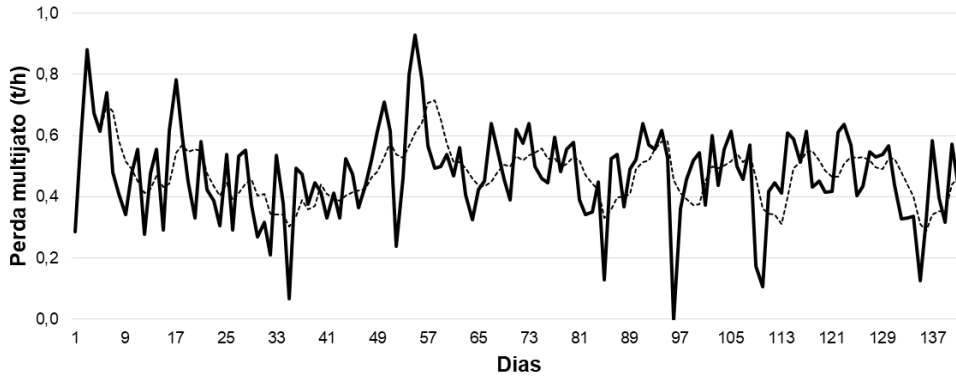
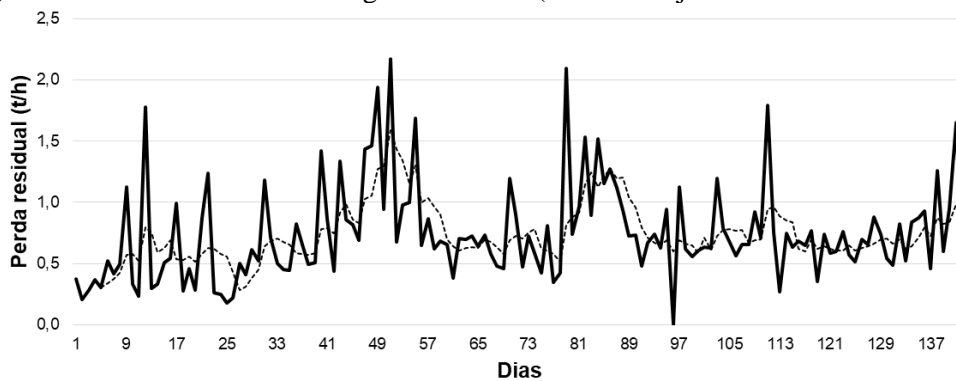
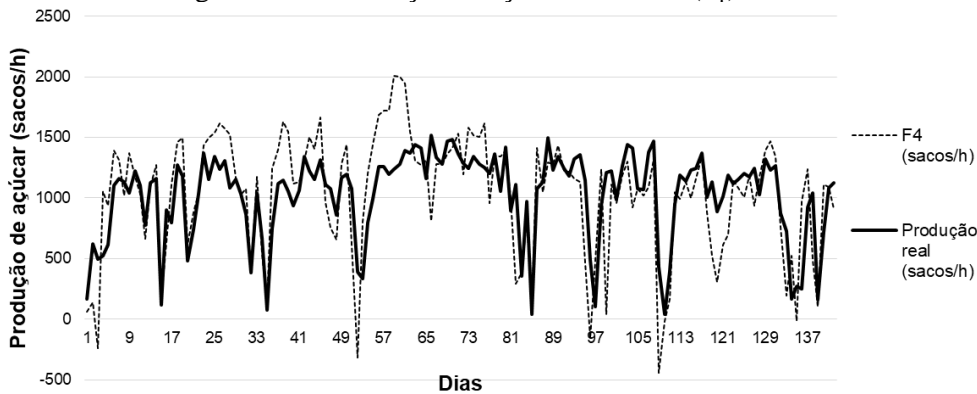


Figura 2.16 – Perda de ART nas águas residuais (Linha tracejada: média móvel de 5 dias)



A Figura 2.17 apresenta a vazão de açúcar, F_4 , resultado do balanço de massa, e a vazão real de açúcar produzida em cada dia do período avaliado, ambas expressas em sacos de 50 quilos por hora.

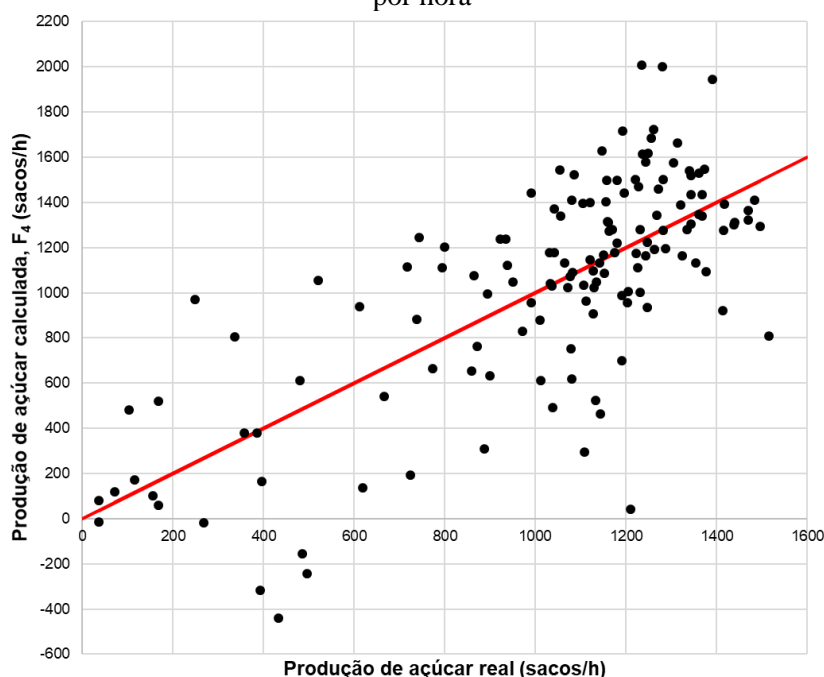
Figura 2.17 – Produção de açúcar calculada (F_4) e real

A média diária de produção calculada pelo balanço foi de 1036,1 sacos/h, com desvio padrão de 493,6 sacos/h, enquanto a produção real apresentou média de 1026,1 sacos/h, com desvio padrão de 357,8 sacos/h. A produção total calculada de açúcar no período foi de 3.530.900 sacos, superior à produção real em 34.037 sacos. Convertendo os resultados para toneladas de ART, a produção real foi menor que a produção teórica em 1784,2 tART. O desvio padrão da produção real foi menor, o que pode ser explicado pela capacidade do processo de

absorver parte das variações de vazão citadas no decorrer deste tópico, devido ao material acumulado em processo. O balanço de massa, por sua vez, foi realizado em regime permanente e não considerou tais acúmulos.

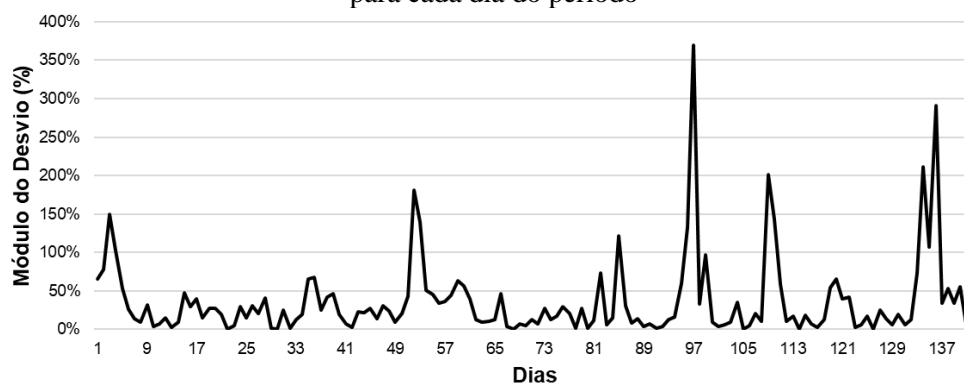
A Figura 2.18 mostra os valores calculados da produção de açúcar em função da produção real, ambos em expressos em sacos de 50 quilos por hora. Nota-se que os pontos estão aleatoriamente distribuídos acima e abaixo da reta $y = x$, destacada na cor vermelha, e, portanto, nenhuma tendência sistemática foi observada.

Figura 2.18 – Produção de açúcar calculada em função da produção real de açúcar, em sacos de 50 kg por hora



Avaliando cada dia separadamente, o módulo do desvio percentual entre a produção de açúcar real e o resultado do balanço de massa, calculado de acordo com a Equação 2.17, teve média de 36,5%. Os valores diários são apresentados na Figura 2.19. Os dias 3, 4, 52, 53, 85, 96, 97, 109, 110, 134, 135 e 136 apresentaram desvios elevados, maiores que 100%. Excluindo estes dias da análise, o desvio médio entre a produção real e o resultado do balanço foi reduzido para 23,3%. Excluindo, ainda, os dias 1, 2, 5, 35, 36, 54, 59, 60, 82, 95, 99, 111, 119, 120, 133, 138, e 140, nos quais os desvios estiveram entre 50% e 100%, o valor médio dos desvios dos dias restantes, que representam 80% do total, diminuiu para 17,2%.

Figura 2.19 – Módulo do desvio entre a produção real de açúcar e o resultado do balanço de massa para cada dia do período

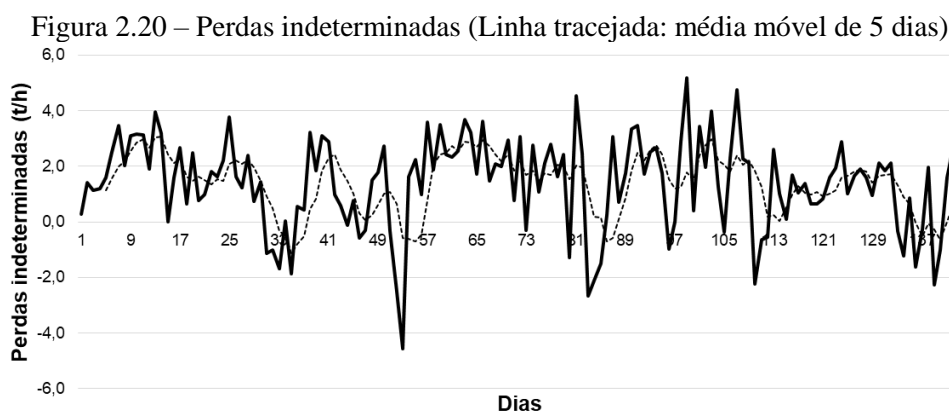


Os 29 dias citados, em que os desvios foram maiores que 50%, podem ser divididos em três grupos:

- a) Dias de baixa moagem e alta produção real de açúcar. Neste grupo estão os dias 1, 2, 3, 52, 82, 95, 96, 99, 109, 110, 111, 119, 120, 133, 135, 138. O alto valor dos desvios, nestes casos, ocorreu, pois, devido à baixa vazão de caldo clarificado, o resultado da produção de açúcar pelo balanço de massa foi baixo, ao passo que a produção real de açúcar permaneceu em valores elevados. No processo real, a produção de açúcar não cai imediatamente quando a vazão de caldo diminui, pois entre essas duas correntes há uma diferença de tempo e de material em processo. Dentre os dias que se enquadraram neste grupo, os dias 3, 52, 96, 109, 110 e 135 apresentaram vazões teóricas de açúcar negativas, devido a uma vazão de caldo clarificado muito baixa ou nula. Devido à continuidade do processo de fabricação de açúcar por mais um tempo até a parada geral ou até a retomada da moagem, as perdas nos multijatos e residuais e a vazão de mel final continuaram sendo contabilizadas, bem como a produção real de açúcar;
- b) Dias de retomada de moagem após paradas, ou retomada do ritmo normal de moagem, e produção real de açúcar baixa. Enquadram-se neste grupo os dias 4, 5, 35, 36, 53, 54, 97, 134, 136 e 140. Da mesma forma que a queda da vazão de caldo clarificado não implica imediatamente a queda na produção de açúcar, o aumento dessa vazão após dias de parada, ou de vazões baixas, requer um certo tempo para ser traduzida em produção de açúcar. Foi o que ocorreu nos dias citados, nos quais a produção de açúcar calculada pelo balanço de massa foi muito superior à produção real de açúcar;

- c) Dias em que a produção de açúcar foi limitada pela etapa de centrifugação. São os dias 59, 60 e 85. Nestes dias, a produção de açúcar calculada foi muito superior à produção real, apesar de eles estarem entre períodos de moagem normal. Isso ocorreu devido a limitações de capacidade e problemas mecânicos das centrífugas, fazendo com que o material se acumulasse nos cristalizadores e não fosse convertido em produção de açúcar.

A Figura 2.20 mostra as perdas indeterminadas contabilizadas no período estudado, que apresentaram média de 1,4 t/h, desvio padrão de 1,7 t/h, e valor total igual a 4788,0 t_{ART}. Portanto, o desvio observado nas produções calculada e real de açúcar, de 1784,2 t_{ART}, foi equivalente a 37,3% do total das perdas indeterminadas. Ou seja, 37,3% das perdas indeterminadas da unidade ocorreram entre a pré-evaporação do caldo e o ensaque do açúcar.



Como as perdas indeterminadas não são medidas, e sim calculadas pela diferença entre o ART de entrada (contabilizado na cana processada no dia) e o ART de saída (produtos e perdas determinadas), seu valor pode ser negativo. Perdas indeterminadas negativas ocorreram em dias de alta instabilidade de processamento, geralmente com baixa moagem, nos quais a produção de açúcar se manteve alta devido ao material acumulado no processo. Caso as perdas indeterminadas apresentem valores negativos constantemente, deve-se inferir que há erros analíticos na contabilização do ART na cana, nos produtos, nas perdas determinadas, ou no material acumulado no processo (FERNANDES, 2011).

As perdas indeterminadas podem ocorrer devido à reação entre os açúcares redutores e compostos contendo grupos aminas, como aminoácidos e proteínas presentes no caldo. Essa reação inicia um conjunto de reações conhecidas como reações de Maillard, que acabam gerando melanoidinas, polímeros nitrogenados de cor marrom. Apesar de ocorrerem à temperatura ambiente, essas reações são intensificadas em altas temperaturas, pois estas levam a um aumento da reatividade entre o açúcar e o grupo amina (MARTINS; JONGEN; VAN

BOEKEL, 2001; SCHLUMBACH; PAUTOV; FLÖTER, 2017). Outra reação que pode se intensificar em altas temperaturas é a decomposição da glicose e da frutose, sob condições alcalinas, em ácidos carboxílicos com menos de seis carbonos, como os ácidos láctico, acético e oxálico. Os compostos formados também apresentam a cor marrom e são ácidos, levando à inversão da sacarose (DAVIS, 2001; SCHLUMBACH; PAUTOV; FLÖTER, 2017).

As temperaturas alcançadas na etapa de pré-evaporação, em torno de 120 a 130°C, são as mais altas em todo o processo de produção de açúcar, e contribuem para a ocorrência das reações citadas, que não somente representam uma fonte de perda, como também podem levar a um escurecimento do açúcar produzido (MARTINS; JONGEN; VAN BOEKEL, 2001; SCHLUMBACH; PAUTOV; FLÖTER, 2017). Em temperaturas acima de 160°C, a degradação da sacarose poderia gerar, ainda, compostos caramelados, que são misturas complexas de mono-, oligo-, e polissacarídeos, cuja massa molecular aumenta com o tempo e com a temperatura, devido à crescente polimerização (CHOU, 2000; DAVIS, 2001). Provavelmente, este tipo de reação não ocorreu no processo descrito, pois as temperaturas alcançadas no processo foram menores que 160°C.

O controle da temperatura do vapor utilizado como fonte de aquecimento dos pré- evaporadores, em geral exercido por dessuperaquecedores, é essencial para que não haja aquecimento excessivo do caldo. Além disso, é fundamental que se trabalhe com tempos de retenção adequados nestes equipamentos, de modo a evitar tempos excessivos de exposição do caldo às altas temperaturas. Após a pré- evaporação, a temperatura de operação diminui gradativamente durante a evaporação do caldo, até valores próximos a 60°C, devido ao vácuo aplicado ao último efeito da evaporação e aos cozedores, da ordem de 0,20 bar de pressão absoluta (HUGOT, 1986). Dessa forma, as reações de Maillard e de decomposição dos açúcares são favorecidas principalmente nos pré- evaporadores e nos primeiros efeitos da evaporação.

A instalação de medidores de vazão e pontos de coleta nas entradas e saídas de cada pré- evaporador e evaporador permitiria que o método de reconciliação de dados fosse aplicado a cada equipamento, diariamente. Dessa forma, altos desvios entre as vazões mássicas de ART calculada e real nas correntes de saída levariam à identificação rápida de perdas no equipamento, mesmo aquelas que ocorrem pelas reações descritas acima, para as quais não existe método prático de identificação e quantificação.

Na etapa de cozimento do açúcar, que ocorre em equipamentos a vácuo em regime de batelada alimentada, as perdas indeterminadas podem ocorrer, principalmente, se não

há uma boa circulação da massa durante o processo de cozimento. A alta viscosidade da massa pode levar ao surgimento de zonas de alta supersaturação na superfície metálica dos tubos da calandra, que favorecem o desenvolvimento de depósitos cristalinos. Além da perda de açúcar, as incrustações reduzem a taxa de transferência de calor e provocam aumento do tempo de batelada. Parte dessas incrustações é eliminada na limpeza dos cozedores, com água quente, entre uma batelada e outra. A sacarose dissolvida pela água quente deixa, então, de compor o rol das perdas indeterminadas, pois retorna ao processo, seja para produção de açúcar ou etanol. Porém, para reduzir a formação das incrustações, diminuindo a necessidade de limpeza e reduzindo os custos de reprocessamento desse açúcar, recomenda-se a instalação de agitadores nos cozedores, que auxiliam a circulação da massa (MULLIN, 2001).

Nas áreas de ensaque e armazenamento, perdas indeterminadas podem ocorrer durante o manuseio do produto final, principalmente em usinas que utilizam armazenamento em sacos e bags, como é o caso da usina em questão. Para evitá-las, nesse caso, é fundamental a manutenção do bom estado de conservação das embalagens, além da substituição constante das que já ultrapassaram sua vida útil.

Considerando, hipoteticamente, que metade das perdas que foram contabilizadas neste trabalho pudessem ser evitadas no decorrer da safra, por meio da rápida identificação e correção, a produção de açúcar seria aumentada em 17.018 sacos de 50 quilos. Levando em conta que, no período considerado neste estudo, entre 03 de junho e 31 de outubro de 2015, o valor médio do saco de açúcar cristal foi de R\$ 51,92 (UDOP, 2018), a usina teria uma receita adicional de R\$ 883,5 mil com a venda desse produto.

2.4 Conclusões

O método da reconciliação, aplicado aos dados de brix, pol e vazões do setor de concentração do caldo, permitiu a obtenção das vazões diárias da corrente de xarope flotado, para a qual não havia histórico de dados. Foi possível, então, aplicar balanço de massa aos setores de cozimento, centrifugação e secagem, e obter valores calculados para a produção de açúcar, que foram comparados com a produção real da usina. Quando analisado o período em sua totalidade, o desvio entre a produção calculada e a real foi de 34.037 sacos, ou 1.784,2 toneladas de ART, que correspondem a 37,3% do total das perdas indeterminadas contabilizadas no mesmo período. Dessa forma, estima-se que essa parcela das perdas indeterminadas da unidade esteve relacionada: à formação de melanoidinas, pelas reações de Maillard; à degradação de açúcares para formação de ácidos, principalmente na etapa de pré-

evaporação e nos primeiros efeitos da evaporação; e às perdas por manuseio do açúcar produzido nos setores de ensaque e armazenamento.

Em usinas que possuem medidores de vazão e pontos de coleta de amostras nas entradas e saídas de soluções açucaradas de equipamentos como pré-evaporadores e evaporadores, o método de reconciliação de vazões e concentrações descrito neste trabalho pode ser aplicado individualmente, em curtos intervalos de tempo. Dessa forma, a identificação de perdas de ART seria feita de forma mais rápida, possibilitando sua correção, e diminuindo, assim, seu impacto sobre a eficiência industrial da unidade.

Notação

$\pm a$	intervalo de confiança
$\%ART_{indet}$	perda indeterminada de açúcares redutores totais, %
$\%ART_{mult}$	perda de açúcares redutores totais nos multijatos, %
$\%ART_{res}$	perda de açúcares redutores totais nas águas residuais, %
ART_{cana}	açúcares redutores totais por tonelada de cana processada, kg/t
$brix$	porcentagem mássica de sólidos dissolvidos, %
C	vazão mássica de cana processada, t/h
F	vazão mássica, kg/h
pol	resultado da análise de polarização, %
Q	vazão volumétrica, m ³ /h
s	porcentagem mássica de sacarose, %
W	fator de ponderação

Letras Gregas

ρ	densidade, kg/m ³
σ^2	variância

Subíndices

1	caldo clarificado
2	xarope flotado
3	mel final
4	açúcar

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BECKMAN, J. R. Data adjustment for non-reactive batch or steady-state processes. **Chem. Eng. Commun**, v. 15, p: 357-365, 1982.
- BIGATON, A.; DANELON, A. F.; TORRES, H. J. S.; XAVIER, C. E. O.; MARQUES, P. V. Indicadores técnicos e custos de produção de cana-de-açúcar, açúcar e etanol no Brasil: Fechamento de safra 2013/14. **Revista iPecege**, v. 1, n. 1, p. 103–107, 2015.
- CHEN, J. C. P.; CHOU, C. C. **Cane sugar handbook: a manual for cane sugar manufacturers and their chemists**. 12. ed. New York: John Wiley & Sons, 1993.
- CHOU, C. C. **Handbook of sugar refining: a manual for design and operation of sugar refining facilities**. New York: John Wiley & Sons, 2000.
- COPERSUCAR. **Controle químico da fabricação do açúcar**. São Paulo, 1978.
- CROWE, C. M. Data reconciliation — progress and challenges. **Journal of Process Control**, v. 6, n. 2–3, p. 89–98, 1996.
- DAVIS, S. B. The chemistry of colour removal: a processing perspective. **Proceedings of the South African Sugar Technologists' Association**, v. 75, p. 328–336, 2001.
- FERNANDES, A. C. **Cálculos na agroindústria da cana-de-açúcar**. 3. ed. Piracicaba, SP: STAB, 2011.
- HUBBARD, G.; LOVE, D. Reconciliation of process flow rates for a steady state mass balance on a centrifugal. **Proceedings of the South African Sugar Technologists' Association**, v. 72, p. 290–299, 1998.
- HUGOT, É. **Handbook of cane sugar engineering**. 3. ed. Amsterdam: Elsevier, 1986.
- JIANG, X.; LIU, P.; LI, Z. Data reconciliation and gross error detection for operational data in power plants. **Energy**, v. 75, p. 14–23, 2014.
- KNEILE, R. Wring more information out of plant data. **Chemical Engineering (New York)**, v. 102, n. 3, p. 110–116, 1995.
- LE MOS, C. Perdas na indústria impactam resultados nas usinas. **UDOP (União dos Produtores de Bioenergia)**, Araçatuba, SP, 03/11/2015. Disponível em: <<http://udop.com.br/index.php?item=noticias&cod=1130855>>. Acesso em: 11 jul. 2016.

- LOPES, C. H.; BORGES, M. T. M. R. **Manual de análise de açúcar: açúcar VHP, VVHP, demerara, cristal, refinado e açúcar líquido**. Araras, SP: Sucral, 2004.
- MARTINS, M. A. F.; AMARO, C. A.; SOUZA, L. S.; KALID, R. A.; KIPERSTOK, A. New objective function for data reconciliation in water balance from industrial processes. **Journal of Cleaner Production**, v. 18, n. 12, p. 1184–1189, 2010.
- MARTINS, S. I. F.; JONGEN, W. M. F.; VAN BOEKEL, M. A. J. S. A review of Maillard reaction in food and implications to kinetic modelling. **Trends in Food Science & Technology**, v. 11, n. 9–10, p. 364–373, 2001.
- MULLIN, J. W. **Crystallization**. 4. ed. Woburn, MA: Butterworth Heinemann, 2001.
- NARASIMHAN, S.; JORDACHE, C. **Data reconciliation & gross errors detection: an intelligent use of process data**. Houston: Gulf Publishing Company, 2000.
- OLIVEIRA, E. R. **Procedimentos e normas para o acompanhamento de análise da qualidade da cana-de-açúcar**. [s.l.] ORPLANA – Organização de Plantadores de Cana da Região Centro-Sul do Brasil, 2012.
- ROMAGNOLI, J. A.; SÁNCHEZ, M. C. **Data processing and reconciliation for chemical process operations**. London: Academic Press, 2000.
- SCHLUMBACH, K.; PAUTOV, A.; FLÖTER, E. Crystallization and analysis of beet and cane sugar blends. **Journal of Food Engineering**, v. 196, p. 159–169, 2017.
- SMAÏLI, F.; ANGADI, D. K.; HATCH, C. M.; HERBERT, O.; VASSILIADIS, V. S.; WILSON, D. I. Optimization of scheduling of cleaning in heat exchanger networks subject to fouling. **Food and Bioproducts Processing**, v. 77, n. 2, p. 159–164, 1999.
- SYED, M. S.; DOOLEY, K. M.; MADRON, F.; KNOPF, F. C. Enhanced turbine monitoring using emissions measurements and data reconciliation. **Applied Energy**, v. 173, p. 355–365, 2016.
- UDOP (UNIÃO DOS PRODUTORES DE BIOENERGIA). **Histórico do Açúcar Cristal CEPEA/ESALQ – São Paulo**, 2018. Disponível em: <http://www.udop.com.br/index.php?item=acucar_historico&op=1>. Acesso em: 26 dez. 2018.

Capítulo 3 – AVALIAÇÃO DA PRODUÇÃO DE AÇÚCAR DE CANA UTILIZANDO ANÁLISE ESTATÍSTICA MULTIVARIADA¹

RESUMO

Os métodos estatísticos multivariados, dentre eles a análise por componentes principais (PCA) e a regressão por mínimos quadrados parciais (PLS), popularizaram-se como ferramentas de monitoramento de processos em diversos setores industriais. Nas usinas do setor sucroenergético, o monitoramento de processos tem como principal objetivo a maximização das produções de açúcar e etanol dentro dos parâmetros de qualidade exigidos pelos clientes. Assim, este trabalho teve por objetivo identificar as variáveis do processo industrial que apresentaram os maiores impactos na quantidade e na qualidade do açúcar produzido. Para isso, os métodos estatísticos PCA e PLS foram aplicados a dados de processo de uma usina produtora de açúcar e etanol, referentes ao período de junho a outubro de 2015. Por meio da análise da matriz de correlações do PCA, foram identificadas as variáveis que apresentaram as maiores correlações entre si, com destaque para a presença de flocos alcoólicos no açúcar e sua concentração de amido e dextrana. Ambas análises mostraram que a cor do açúcar esteve altamente correlacionada a sua umidade, indicando que os fenômenos de inclusão e oclusão líquida foram os principais responsáveis pelo aumento de cor do cristal. Além disso, o PCA mostrou que altos índices de moagem e estabilidade de processamento, além de aumentarem a produção de açúcar, contribuíram também para a produção com melhor qualidade. Os três primeiros componentes principais da análise responderam, juntos, por 40,92% da variabilidade dos dados. As variáveis com maiores carregamentos sobre eles foram cor, concentração de cinzas e de pontos pretos no açúcar, brix e pol do xarope flotado, pol do mel final, concentração de impurezas vegetais na cana, aproveitamento de tempo e quantidade total de cana processada.

Palavras-chave: indústria de açúcar, monitoramento de processos, qualidade de açúcar, análise estatística multivariada, *Principal Component Analysis*, *Partial Least Squares*.

3.1 Introdução

O monitoramento de processos faz-se cada vez mais necessário nas indústrias modernas para o atendimento da maior demanda por produção, ligada à redução de custos e à

¹Este trabalho foi premiado com menção honrosa no VIII Congresso Farmacêutico da UNESP e IV Jornada de Engenharia de Bioprocessos e Biotecnologia, e seu resumo está publicado no periódico Revista de Ciências Farmacêuticas Básica e Aplicada (ISSN 1808-4532, 2179-443X), com o título “Parâmetros de qualidade de açúcar avaliados por métodos estatísticos multivariados”.

qualidade do produto final, de acordo com as exigências do mercado consumidor e com as normas de sustentabilidade do negócio. O método mais tradicional de monitoramento de processos, ou de detecção e análise de falhas, é o baseado em modelos, tais como leis de conservação e relações físico-químicas entre as variáveis de processo. Contudo que o modelo seja confiável, este método tende a fornecer resultados mais precisos e assertivos em comparação com outros métodos. Porém, muitas vezes, é extremamente difícil e custoso, e até mesmo impossível, em alguns casos, obter um modelo que caracterize de forma aceitável os processos industriais, que têm se tornado cada vez mais complexos (SUN; CHEN; MARQUEZ, 2001; KANO; NAKAGAWA, 2008; GE; SONG; GAO, 2013; YIN et al., 2015).

Para processos produtivos complexos, ou processos para os quais não se conhece um modelo fenomenológico, o monitoramento de processo pode ser feito por meio de métodos baseados no conhecimento. Estes utilizam o conhecimento de operadores experientes da planta industrial, e, portanto, tendem a ser mais intuitivos. Porém, o processo de criação de uma base de conhecimento do processo demanda vários anos de esforço e experiência (GE; SONG; GAO, 2013; SUN; CHEN; MARQUEZ, 2001).

Os métodos de monitoramento baseados em dados, por sua vez, não requerem nenhuma modelagem do processo ou conhecimento acumulado de operadores, e têm se desenvolvido rapidamente nas duas últimas décadas. Tendo como principal objetivo extrair o máximo possível de informações com base na grande quantidade de dados disponíveis, e utilizar essas informações para modelar, monitorar e controlar os processos, essas técnicas vêm sendo aplicadas em diversos setores industriais nos últimos anos (GE; SONG; GAO, 2013; QIN, 2012; YIN et al., 2015).

Dentre os métodos baseados em dados, os métodos estatísticos multivariados se popularizaram no monitoramento de processos e diagnóstico de falhas, particularmente a Análise por Componentes Principais (PCA) e a Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS), principalmente devido a sua simplicidade, ao baixo esforço computacional, e à habilidade em lidar com um grande número de variáveis altamente correlacionadas (SUN; CHEN; MARQUEZ, 2001; YIN et al., 2014). Os métodos estatísticos multivariados encontraram, também, ampla aplicação na investigação científica, com o objetivo de: reduzir ou simplificar estruturalmente os dados, de forma a facilitar a interpretação sem sacrificar informações importantes; ordenar e agrupar variáveis; investigar a dependência entre variáveis; prever valores de uma ou mais variáveis, baseado em observações de outras; construir e testar hipóteses (JOHNSON; WICHERN, 2007).

PCA é um método estatístico multivariado que propõe a redução da dimensionalidade de uma grande quantidade de dados correlacionados, de modo a preservar as informações de variabilidade significativa extraídas das medições de processo. Essa técnica tem sido aplicada com sucesso em diversas áreas, tais como: análise de imagens, reconhecimento de padrões, compressão de dados, predição de séries temporais e monitoramento de processos industriais (CHEN et al., 2015; JIANG; YAN; ZHAO, 2013; KANO; NAKAGAWA, 2008; KU; STORER; GEORGAKIS, 1995; YIN et al., 2014).

Algebricamente, os componentes principais são novas variáveis geradas a partir de combinações lineares de todas as variáveis originais. Cada componente principal representa uma parte da variabilidade total do sistema, e, nestas combinações lineares, cada variável original tem uma importância diferente (NETO, 2004). Geometricamente, as combinações lineares representam a seleção de um novo sistema de coordenadas, obtido por meio da rotação do sistema original, com as variáveis originais como os eixos de coordenadas. Os novos eixos representam as direções de máxima variabilidade e fornecem uma descrição mais simples da estrutura de covariância (JOHNSON; WICHERN, 2007).

Considerando N medições do processo industrial, cada uma com m variáveis, após pré-processamento dos dados para terem média zero e variância unitária, pode-se definir a matriz de dados normalizados, X , pela Equação 3.1. O pré-processamento das variáveis se faz necessário sempre que as variáveis medidas forem muito diferentes entre si, de modo a evitar a influência indevida de uma ou outra variável na análise (YIN et al., 2014).

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & \dots & x_{Nm} \end{pmatrix} \in \mathcal{R}^{N \times m} \quad (3.1)$$

A matriz de correlações, Φ , é, então, dada pela Equação 3.2, e tem a forma mostrada na Equação 3.3.

$$\Phi = \frac{1}{N-1} X^t X \quad (3.2)$$

$$\Phi = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1m} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{m1} & c_{m2} & \dots & c_{mm} \end{pmatrix} \in \mathcal{R}^{m \times m} \quad (3.3)$$

As informações de variabilidade significativa são extraídas por meio da decomposição da matriz de correlações, Φ , em valores singulares, conforme mostra a Equação 3.4, na qual $Z \in \mathcal{R}^{m \times m}$ é uma matriz ortogonal e $\Lambda \in \mathcal{R}^{m \times m}$ é uma matriz diagonal. As colunas de Z são os autovetores, e os elementos da diagonal principal de Λ são os autovalores

$\lambda_1, \dots, \lambda_m$ da matriz Φ . De acordo com a magnitude dos autovalores, Z e Λ podem ser divididos, como mostrado nas Equações 3.5 e 3.6.

$$\frac{1}{N-1} X^t X = Z \Lambda Z^t \quad (3.4)$$

$$Z = [Z_{pc} \quad Z_{res}] \quad (3.5)$$

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \Lambda_{pc} & 0 \\ 0 & \Lambda_{res} \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

Seja β o número de componentes principais. Então, $Z_{pc} \in \mathcal{R}^{m \times \beta}$, chamado subespaço principal, contém os autovetores correspondentes aos β maiores autovalores em Λ , enquanto $Z_{res} \in \mathcal{R}^{m \times (m-\beta)}$, chamado subespaço residual, contém os autovetores correspondentes aos $(m - \beta)$ menores autovalores em Λ (YIN et al., 2014).

A regressão por PLS é outro método estatístico multivariado muito utilizado para construção de modelos, monitoramento, controle de processos e identificação de falhas. Esse método tem por objetivo a predição de variáveis de resposta, ou indicadores de performance do processo, a partir da aplicação da regressão de mínimos quadrados sobre variáveis descorrelacionadas obtidas a partir das variáveis originais (KANO; NAKAGAWA, 2008; QIN, 2012; ROY; ROY, 2008; YIN et al., 2014).

Seja U a matriz de dados normalizados, contendo N medições, cada uma com l variáveis, e Y a matriz de variáveis resposta, ou indicadores de performance do processo, contendo N medições, cada uma com m variáveis, conforme as Equações 3.7 e 3.8.

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1l} \\ u_{21} & u_{22} & \dots & u_{2l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N1} & u_{N2} & \dots & u_{Nl} \end{pmatrix} \in \mathcal{R}^{N \times l} \quad (3.7)$$

$$Y = \begin{pmatrix} y_{11} & y_{12} & \dots & y_{1m} \\ y_{21} & y_{22} & \dots & y_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{N1} & y_{N2} & \dots & y_{Nm} \end{pmatrix} \in \mathcal{R}^{N \times m} \quad (3.8)$$

Definem-se variáveis latentes, t , conforme a Equação 3.9, na qual γ é o número de variáveis latentes.

$$T = (t_1 \quad t_2 \quad \dots \quad t_\gamma) \in \mathcal{R}^{N \times \gamma} \quad (3.9)$$

Baseada na projeção de U e Y nas variáveis latentes, a correlação entre U e Y pode ser determinada pelas Equações 3.10 e 3.11, onde $P \in \mathcal{R}^{l \times \gamma}$ e $Q \in \mathcal{R}^{m \times \gamma}$ são as matrizes de carregamento de U e Y , respectivamente. \hat{U} é altamente correlacionada a Y . \tilde{U} e E_y são subespaços residuais e assume-se que são descorrelacionados a U e Y , respectivamente.

$$U = TP^t + \tilde{U} = \hat{U} + \tilde{U} \quad (3.10)$$

$$Y = TQ^t + E_y = UM + E_y \quad (3.11)$$

De acordo com a correlação entre U e Y , dada pelas Equações 3.10 e 3.11, a matriz T e a matriz de coeficientes $M \in \mathcal{R}^{l \times m}$ podem ser determinadas pelas Equações 3.12 e 3.13, respectivamente, onde $P^tR = R^tP = I_{\gamma \times \gamma}$ e $R \in \mathcal{R}^{l \times \gamma}$. R é chamada matriz de carga. Como resultado, a matriz de coeficientes M , determinada pelo método, pode ser usada para predição das variáveis de resposta a partir de medições no processo (YIN et al., 2014).

$$T = UR \quad (3.12)$$

$$M = RQ^t \quad (3.13)$$

Rodushkin et al. (2011) aplicaram o PCA a resultados de análises laboratoriais de concentração de elementos, tais como alumínio, cálcio, cobre, ferro, potássio, sódio, dentre outros, presentes em amostras de açúcar de cana e de beterraba provenientes de diferentes regiões do mundo. O objetivo foi revelar padrões nas amostras que permitissem identificar sua origem. Ramburan; Zhou; Labuschagne (2011) investigaram a influência de fatores ambientais nas características da cana-de-açúcar cultivada na África do Sul, por meio do uso do PCA e suas variações. Santchurn et al. (2012) utilizaram o PCA para estudar diferentes genótipos de cana-de-açúcar, com o objetivo de selecionar as melhores variedades, com relação à quantidade de biomassa para produção de energia renovável. Até onde vai o conhecimento dos autores, não há na literatura exemplos do uso de PLS na análise de dados da indústria açucareira.

Nas usinas do setor sucroenergético, o monitoramento de processos agrícolas e industriais está constantemente voltado para o aumento do “rendimento agroindustrial”, ou seja, para maior quantidade de açúcar e etanol produzidos por hectare de cana-de-açúcar cultivada, e para o maior atendimento aos parâmetros de qualidade exigidos pelo mercado consumidor (FERNANDES, 2011). Dessa forma, este trabalho teve como objetivo analisar, por meio das técnicas de estatística multivariada PCA e PLS, dados do processo industrial de uma usina do interior do Estado de São Paulo, de modo a auxiliar a compreensão das relações existentes entre as variáveis do processo, bem como identificar as de maior impacto sobre a quantidade e a qualidade do açúcar produzido.

3.2 Materiais e métodos

Foram considerados na análise de componentes principais e na regressão por mínimos quadrados parciais 101 dias de produção da usina, entre o período de 01 de junho a 31 de outubro de 2015. Para cada dia, foram levantadas 50 variáveis do processo, as quais estão

apresentadas na Tabela 3.1. Foram excluídos das análises os dias em que havia falta de informação de ao menos uma das 50 variáveis.

Tabela 3.1 – Variáveis consideradas nas análises estatísticas PCA e PLS

	Variável	Unidade	Referência para análise química
1	Quantidade total de cana processada	t/dia	-
2	Concentração de ART (açúcares redutores totais) na cana	kg/t	Method GS 4/7/8/5-2 (ICUMSA, 2015)
3	Tempo médio de corte da cana (tempo transcorrido do corte ao processamento)	h	-
4	Concentração de impurezas minerais na cana	kg/t	UDOP, 2014a
5	Concentração de impurezas vegetais na cana	kg/t	UDOP, 2014b
6	Concentração de dextrana na cana	mg/brix	CHEN; CHOU, 1993
7	Aproveitamento de tempo (% do tempo em que houve processamento da cana)	%	-
8	Pressão do vapor vegetal	lbf/in ²	-
9	Pressão da linha de água dos condensadores dos cozedores	lbf/in ²	-
10	Brix ^a do xarope flotado	%	Method GS 4/3/8-13 (ICUMSA, 2015)
11	Pol ^b do xarope flotado	%	Method GS 4/7-1 (ICUMSA, 2015)
12	Pureza ^c do xarope flotado	%	-
13	pH do xarope flotado	-	Method GS 1/2/3/4/7/8/9-23 (ICUMSA, 2015)
14	Cor ICUMSA ^d do xarope flotado	UI	Method GS 9/1/2/3-8 (ICUMSA, 2015)
15	Turbidez do xarope flotado	UI	Method GS 7-21 (ICUMSA, 2015)
16	Brix ^a do mel pobre	%	Method GS 4/3/8-13 (ICUMSA, 2015)
17	Pol ^b do mel pobre	%	Method GS 4/7-1 (ICUMSA, 2015)
18	Pureza ^c do mel pobre	%	-
19	Brix ^a do mel rico	%	Method GS 4/3/8-13 (ICUMSA, 2015)
20	Pol ^b do mel rico	%	Method GS 4/7-1 (ICUMSA, 2015)
21	Pureza ^c do mel rico	%	-
22	Brix ^a da massa A	%	Method GS 4/3/8-13 (ICUMSA, 2015)
23	Pol ^b da massa A	%	Method GS 4/7-1 (ICUMSA, 2015)
24	Pureza ^c da massa A	%	-
25	Brix ^a da massa B	%	Method GS 4/3/8-13 (ICUMSA, 2015)

26	Pol ^b da massa B	%	Method GS 4/7-1 (ICUMSA, 2015)
27	Pureza ^c da massa B	%	-
28	Brix ^a do magma	%	Method GS 4/3/8-13 (ICUMSA, 2015)
29	Pol ^b do magma	%	Method GS 4/7-1 (ICUMSA, 2015)
30	Pureza ^c do magma	%	-
31	Brix ^a do mel final	%	Method GS 4/3/8-13 (ICUMSA, 2015)
32	Pol ^b do mel final	%	Method GS 4/7-1 (ICUMSA, 2015)
33	Pureza ^c do mel final	%	-
34	Quantidade total de açúcar produzido	sacos (50 kg)/dia	-
35	Polarização do açúcar	°Z	Method GS 2/3-1 (ICUMSA, 2015)
36	Cor ICUMSA ^d do açúcar	UI	Method GS 9/1/2/3-8 (ICUMSA, 2015)
37	Umidade do açúcar	%	Method GS 2/1/3/9-15 (ICUMSA, 2015)
38	Concentração de cinzas no açúcar	%	Method GS 2/3/9-17 (ICUMSA, 2015)
39	Concentração de sulfito no açúcar	mg/kg	Method GS 2/1/7/9-33 (ICUMSA, 2015)
40	Resíduos insolúveis no açúcar	n° (1 a 10)	Method GS 2/3/9-19 (ICUMSA, 2015)
41	Concentração de pontos pretos no açúcar	#/100 g	LOPES; BORGES, 2004
42	Concentração de partículas magnetizáveis no açúcar	mg/kg	LOPES; BORGES, 2004
43	pH do açúcar	-	Method GS 1/2/3/4/7/8/9-23 (ICUMSA, 2015)
44	Turbidez do açúcar	NTU	Method 2/3-18 (ICUMSA, 2015)
45	Concentração de dextrana no açúcar	mg/kg	Method GS 1/2/9-15 (ICUMSA, 2015)
46	Concentração de amido no açúcar	mg/kg	LOPES; BORGES, 2004
47	Presença de flocos alcoólicos no açúcar	-	LOPES; BORGES, 2004
48	Filtrabilidade do açúcar	min	LOPES; BORGES, 2004
49	Tamanho médio (AM) do açúcar	mm	Method GS 2/9-37 (ICUMSA, 2015)
50	Coeficiente de variação (CV) do açúcar	%	Method GS 2/9-37 (ICUMSA, 2015)

^aBrix: porcentagem mássica de sólidos dissolvidos na solução

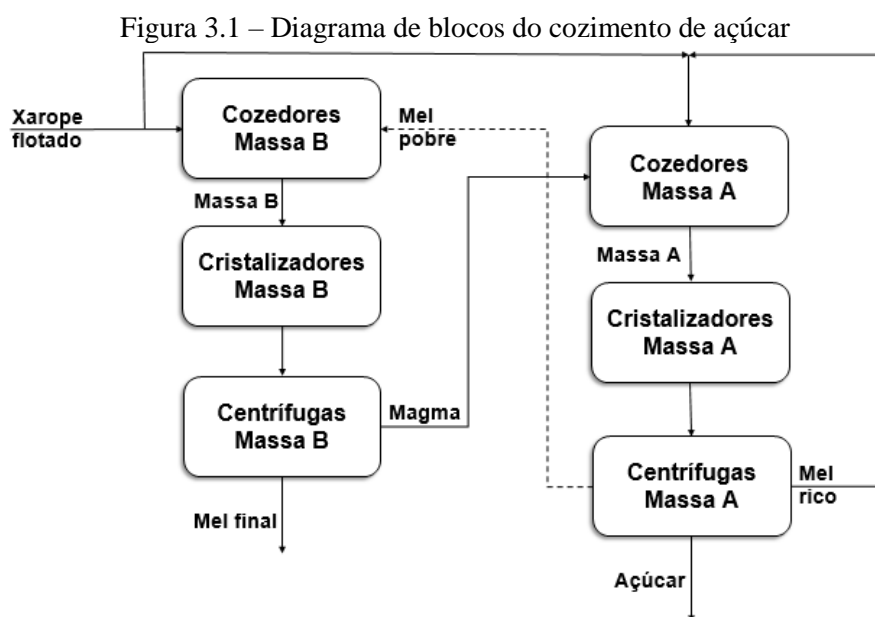
^bPol: porcentagem mássica de sacarose dissolvida na solução

^cPureza: porcentagem mássica de sacarose dentre os sólidos dissolvidos (Pureza = pol/brix)

^dICUMSA: International Commission for Uniform Methods of Sugar Analysis

A Figura 3.1 apresenta o diagrama de blocos do cozimento do açúcar em duas massas, conforme operação da usina em estudo, para que possam ser identificadas as correntes

citadas na Tabela 3.1. O reciclo do mel rico também podia ser feito para o cozimento de massa B, dependendo dos objetivos desejados em cada momento da safra.



Fonte: Acervo pessoal

Os dados foram normalizados de forma a terem média zero e variância unitária, e, então, foi construída a matriz de dados normalizados, utilizada para as análises PCA e PLS. Ambas análises foram realizadas no *software* Minitab® 14. Na análise PLS, foi utilizado o método da validação cruzada para determinar o número apropriado de componentes a serem mantidos no modelo. Este método calcula a capacidade preditiva dos modelos potenciais, ignorando uma observação de cada vez (método “excluir um”).

Por meio da identificação dos maiores valores, em módulo, dos coeficientes c_{ij} da matriz Φ , obtida na análise PCA, foram avaliadas, dentre as 50 variáveis originais, aquelas que estiveram mais correlacionadas no período estudado. Além disso, foram avaliados os maiores valores, em módulo, dentre os coeficientes $c_{i,34}$ e $c_{i,36}$, de modo a identificar as variáveis altamente correlacionadas com a quantidade total e com a cor do açúcar produzido, respectivamente.

Aplicando a regressão por PLS com a variável “quantidade total de açúcar produzido” como resposta, e todas as demais compondo a matriz de dados U , conforme a Equação 3.7, obteve-se a matriz de coeficientes M (Equação 3.13). As variáveis que apresentaram os maiores coeficientes, em módulo, foram comparadas com as variáveis altamente correlacionadas à quantidade de açúcar produzido, obtidas na análise PCA. O mesmo procedimento de comparação foi adotado entre os maiores coeficientes obtidos na regressão

por PLS tendo a variável “cor ICUMSA do açúcar” como resposta e as variáveis altamente correlacionadas à cor do açúcar, resultado do PCA.

Por meio dos autovalores resultantes da decomposição da matriz de correlações Φ , foram calculadas as porcentagens da variância total dos dados contidas em cada combinação linear das variáveis originais. Os componentes principais foram analisados de acordo com as variáveis originais que tiveram maiores carregamentos sobre eles.

3.3 Resultados e discussão

Primeiramente, as correlações da matriz Φ são analisadas. Depois, os resultados das análises PCA e PLS são comparados. Por fim, são apresentados os componentes principais da variabilidade do processo.

3.3.1 Análise da matriz de correlações

Na Tabela 3.2, estão descritas as variáveis que apresentaram as maiores correlações na matriz Φ .

Tabela 3.2 – Dez maiores correlações entre variáveis i e j da matriz Φ

c_{ij}	Variável i	Variável j
0,9909	10 – Brix do xarope flotado	11 – Pol do xarope flotado
0,9591	1 – Quantidade total de cana processada	7 – Aproveitamento de tempo
0,8834	16 – Brix do mel pobre	17 – Pol do mel pobre
0,8752	19 – Brix do mel rico	20 – Pol do mel rico
0,8591	45 – Concentração de dextrana no açúcar	47 – Presença de flocos alcoólicos no açúcar
0,8513	26 – Pol da massa B	27 – Pureza da massa B
0,8101	36 – Cor ICUMSA do açúcar	37 – Umidade do açúcar
0,8100	28 – Brix do magma	29 – Pol do magma
0,8071	45 – Concentração de dextrana no açúcar	46 – Concentração de amido no açúcar
0,8070	32 – Pol do mel final	33 – Pureza do mel final

As altas correlações entre brix e pol, ou pol e pureza, do mesmo material ocorreram com xarope flotado ($c_{10,11} = 0,9909$), mel pobre ($c_{16,17} = 0,8834$), mel rico ($c_{19,20} = 0,8752$), massa B ($c_{26,27} = 0,8513$), magma ($c_{28,29} = 0,8100$) e mel final ($c_{32,33} = 0,8070$). Brix representa a porcentagem em massa de sólidos dissolvidos, enquanto pol é a leitura polarimétrica da solução, considerada como a porcentagem em massa de sacarose na solução. Pureza é a relação entre o pol e o brix da solução, ou seja, representa a porcentagem de sacarose dentre o total de sólidos dissolvidos na solução. Os altos valores c_{ij} nesses casos

indicaram que as purezas desses materiais, ou seja, a quantidade de sacarose dentre os sólidos dissolvidos, não apresentaram variação significativa. Dessa forma, o pol esteve sempre intimamente relacionado com o brix.

O aproveitamento de tempo é uma variável calculada levando-se em conta as horas de parada das moendas no dia, e indica a porcentagem das 24 horas em que, efetivamente, houve processamento de cana. Seu valor reflete, portanto, o grau de estabilidade da planta industrial durante o dia. A quantidade total de cana processada no dia apresentou elevada correlação com esta variável ($c_{1,7} = 0,9591$), e esta não é uma relação óbvia. Como as moendas possuem ajustes na velocidade de rotação dos ternos, altos aproveitamentos de tempo não são, necessariamente, indicativos de altas quantidades de cana processada. Por exemplo, num dia em que as moendas tivessem operado durante as 24 horas, porém com velocidade reduzida, a moagem diária seria baixa, e o aproveitamento de tempo continuaria igual a 100%. Porém, o alto valor dessa correlação demonstrou que, nesta unidade, as variações na quantidade de cana processada estiveram relacionadas às horas efetivas de funcionamento das moendas, independente das alterações nas velocidades dos ternos.

A concentração de dextrana no açúcar apresentou altas correlações com a presença de flocos alcoólicos no produto final ($c_{45,47} = 0,8591$) e com a concentração de amido no açúcar ($c_{45,46} = 0,8071$). A dextrana é um polissacarídeo resultado da ação de microrganismos do gênero *Leuconostoc* na sacarose presente na cana-de-açúcar. Sua presença no produto final causa um aumento na viscosidade das soluções açucaradas e, conseqüentemente, impacta negativamente na qualidade de produtos, como balas e barras de cereais, que utilizem este açúcar como ingrediente. Já o amido é um polissacarídeo produzido pela própria cana-de-açúcar, presente, principalmente, nas folhas, internódios e pontas. O amido é parcialmente removido no processo de tratamento do caldo e fabricação do açúcar, porém uma parcela dele permanece no processo, e se deposita nos cristais de açúcar. O maior impacto da alta concentração de amido está associado à maior dificuldade de filtração das soluções de açúcar, em indústrias alimentícias nas quais o açúcar é dissolvido e posteriormente filtrado (OLIVEIRA; ESQUIAVETO; SILVA JÚNIOR, 2007).

Os flocos alcoólicos, por sua vez, são precipitados de polissacarídeos que aparecem em soluções hidro alcoólicas nas quais foi utilizado, como ingrediente, açúcar com presença destes compostos. Apesar de não afetarem a qualidade do produto final e se redissolverem com facilidade mediante ligeira agitação, os flocos alcoólicos causam impressão

de produto deteriorado ou contaminado (OLIVEIRA; ESQUIAVETO; SILVA JÚNIOR, 2007). Após a concentração de dextrana no açúcar, a segunda maior correlação da presença de flocos alcoólicos foi com a concentração de amido no açúcar ($c_{46,47} = 0,7310$).

Dessa forma, pode-se concluir que o aparecimento de flocos nas soluções hidro alcoólicas está relacionado à concentração de dextrana e amido no açúcar. Conclusão semelhante é apresentada por Lemos et al. (2013), que avaliaram a influência de diferentes concentrações de dextrana e amido presentes no açúcar na formação de flocos ácidos e alcoólicos em soluções. Os testes, realizados em bebidas ácidas e em soluções hidro alcoólicas com concentrações volumétricas de etanol entre 55 e 89%, mostraram correlação positiva entre a presença de dextrana e amido no açúcar e a formação dos flocos (LEMOS et al., 2013). Merheb et al. (2016) estudaram o efeito da presença de amido e dextrana no aparecimento de flocos alcoólicos nos cristais de açúcar produzidos a partir de cristalização por resfriamento e por evaporação a vácuo. Nos ensaios realizados por cristalização a vácuo, a formação dos flocos alcoólicos foi influenciada significativamente pela presença de amido, dextrana, e pela ação conjunta dos dois contaminantes (MERHEB et al., 2016).

Com o aumento da colheita mecanizada de cana crua, os componentes da planta com alto teor de amido, que, com a queima, ficavam no campo, passaram a entrar no processo industrial. Além disso, a maior área de exposição da cana crua à contaminação de microrganismos levou, também, a um aumento da formação de dextrana desde o corte até o processamento (MERHEB et al., 2016). Oliveira et al. (2002) concluíram que maiores tempos transcorridos desde o corte até o processamento da cana, bem como temperaturas elevadas e altos teores de umidade, contribuem para o aumento da contaminação e, conseqüentemente, da produção de dextrana na cana.

Na Tabela 3.3, podem ser vistos os valores das correlações apresentadas entre as concentrações de amido e dextrana no açúcar com as variáveis referentes à qualidade da cana-de-açúcar processada. Ambas concentrações de contaminantes no açúcar apresentaram correlação negativa com a concentração de ART na cana, variável que indica a pureza da matéria-prima. As correlações positivas com o tempo médio de corte confirmaram a conclusão apresentada por Oliveira et al. (2002). As concentrações de impurezas minerais, vegetais e de dextrana na cana também se relacionaram positivamente com a presença de dextrana e amido no açúcar produzido.

Tabela 3.3 – Correlações entre as concentrações de dextrana e amido no açúcar e as características da cana-de-açúcar processada

	45 – Concentração de dextrana no açúcar	46 – Concentração de amido no açúcar
2 – Concentração de ART na cana	-0,2760	-0,4056
3 – Tempo médio de corte da cana	0,3677	0,3202
4 – Concentração de impurezas minerais na cana	0,4550	0,3641
5 – Concentração de impurezas vegetais na cana	0,2369	0,1701
6 – Concentração de dextrana na cana	0,2283	0,2641

A cor ICUMSA do açúcar apresentou alta correlação com a umidade do açúcar ($c_{36,37} = 0,8101$). A cor é o principal item de classificação do açúcar, e valores mais altos indicam um amarelecimento visual do cristal. Açúcares de maior cor impactam negativamente na qualidade de produtos cujo diferencial é a cor ou transparência, como bebidas, balas e sorvetes (OLIVEIRA; ESQUIAVETO; SILVA JÚNIOR, 2007). Na usina em estudo, o principal produto era o açúcar cristal branco tipo 2, com cor abaixo de 150 UI.

É recomendável que a umidade do açúcar, após passagem pelos secadores, seja menor que 0,1%, de modo a evitar problemas durante o acondicionamento do produto, tais como: aglomeração e empedramento dos cristais, perda de brilho, inversão da sacarose e amarelecimento (SARANTÓPOULOS; OLIVEIRA; CANAVESI, 2002).

A alta correlação entre essas duas variáveis, importantes indicadores da qualidade do açúcar produzido, indicou que altos valores de cor estiveram relacionados à oclusão e à inclusão líquida. A oclusão líquida refere-se à presença de películas de mel na superfície dos cristais de açúcar, o que também aumenta a umidade do produto final, e, geralmente, é consequência de falhas na etapa de centrifugação. Já a inclusão é a presença de mel no interior dos cristais, fenômeno que ocorre principalmente durante a fase de crescimento dos cristais. A inclusão do mel nos cristais está associada a alterações bruscas nas condições de supersaturação durante a etapa de cozimento, é favorecida em altas velocidades de crescimento e em cristais maiores (MULLIN, 2001), e na presença de compostos que alteram o hábito cristalino por meio de inibição de uma das faces, como o amido e a dextrana (SCHLUMBACH; PAUTOV; FLÖTER, 2017). O mel, rico em contaminantes e compostos coloridos, além de diminuir a pureza do açúcar produzido, contribui também para aumento de sua cor, como discutido em maiores detalhes no tópico seguinte, quando analisados os resultados da análise PCA e da regressão PLS para a cor do açúcar.

3.3.2 PCA e PLS para as variáveis quantidade e cor do açúcar produzido

Na Tabela 3.4, estão as variáveis que apresentaram os maiores valores de correlação com a quantidade total de açúcar produzido, de acordo com a matriz de correlações do PCA, bem como as variáveis que apresentaram os maiores coeficientes na regressão PLS, tendo a variável quantidade de açúcar produzido como resposta.

Tabela 3.4 – Variáveis altamente correlacionadas à quantidade total de açúcar produzido, de acordo com a matriz de correlações do PCA e com a regressão PLS

Matriz de correlações do PCA		Regressão PLS	
$c_{i,34}$	Variável i	$m_{i,1}$	Variável i
0,6944	7 – Aproveitamento de tempo	0,1954	1 – Quantidade total de cana processada
0,6771	1 – Quantidade total de cana processada	0,1909	7 – Aproveitamento de tempo
0,6129	2 – Concentração de ART na cana	0,1127	12 – Pureza do xarope flotado
-0,5607	36 – Cor do açúcar	-0,1083	5 – Concentração de impurezas vegetais na cana
0,5413	12 – Pureza do xarope flotado	0,1071	2 – Concentração de ART na cana

Na Figura 3.2, é apresentado o gráfico de coeficientes da matriz M , resultante da regressão PLS para a quantidade de açúcar produzido. O gráfico de seleção do modelo é mostrado na Figura 3.3.

Figura 3.2 – Gráfico de coeficientes da regressão PLS para quantidade de açúcar produzido

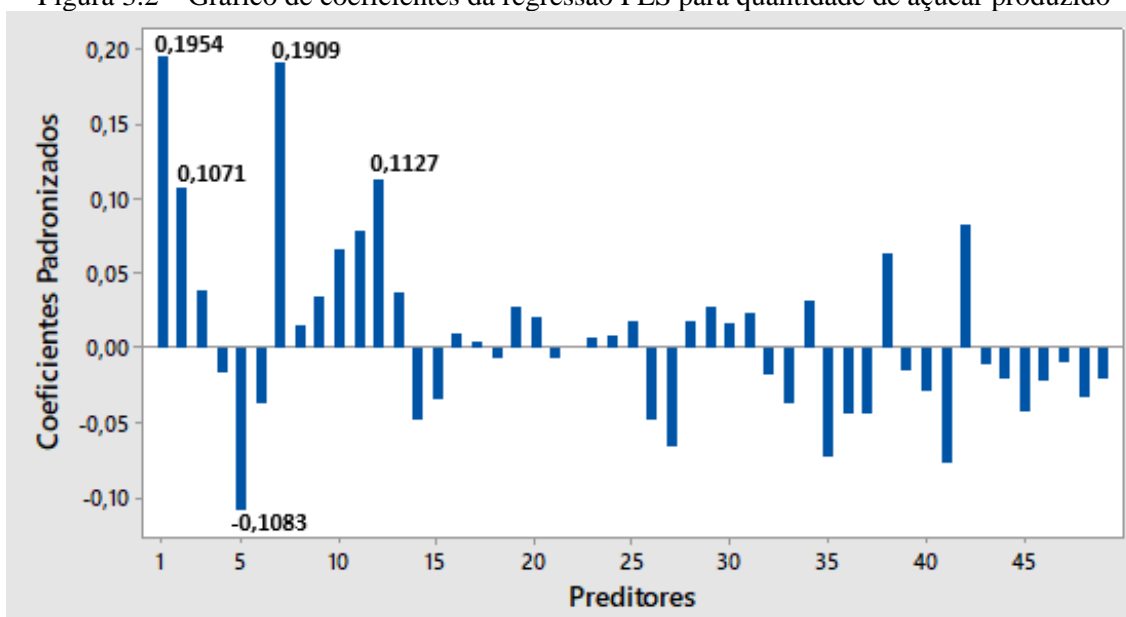
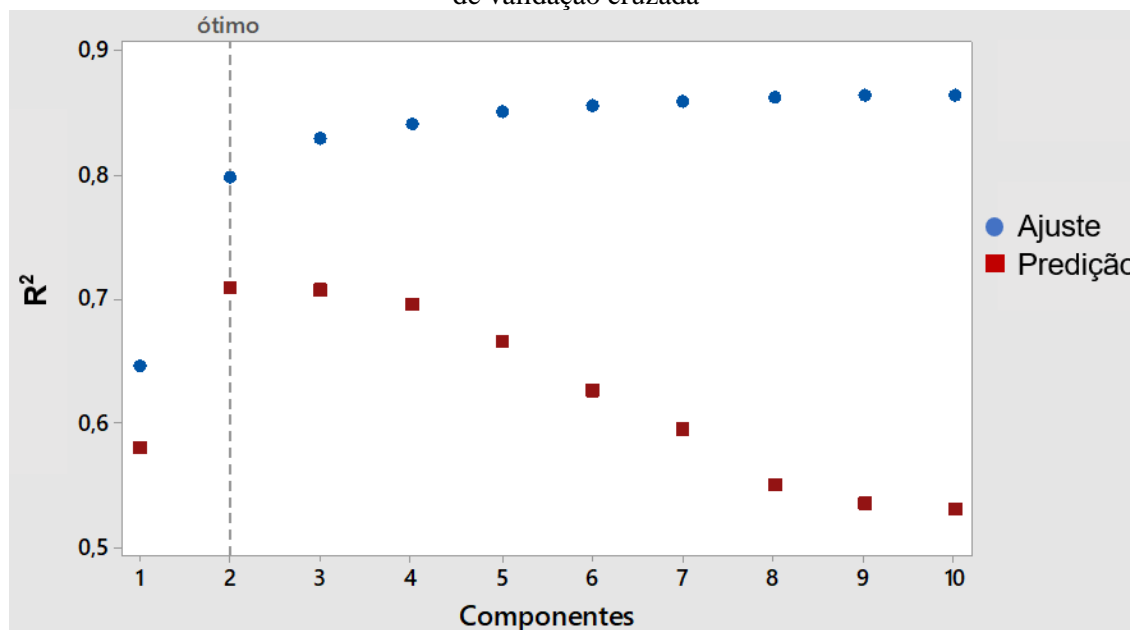


Figura 3.3 – Gráfico de seleção do modelo de PLS para quantidade de açúcar produzido, pelo método de validação cruzada



O R^2 de ajuste sempre aumenta quando são adicionados mais componentes ao modelo, porém a adição de componentes não implica aumento do R^2 de predição. Quando são adicionados componentes para ajustar efeitos que não são importantes na população, o R^2 de predição começa a diminuir, caracterizando modelo com excesso de ajuste. Tal modelo se adapta aos dados amostrais e perde a capacidade de predição em relação à população. Dessa forma, pelo método de validação cruzada, foi selecionado o modelo com dois componentes principais, com R^2 de ajuste igual a 0,7968 e R^2 de predição das respostas igual a 0,7090.

Nota-se que, tanto na matriz de correlações Φ do PCA, quanto na regressão PLS, a quantidade total de açúcar produzido diariamente esteve altamente ligada a variáveis relacionadas à quantidade de sacarose disponível para processamento na fábrica de açúcar: quantidade total de cana processada no dia, concentração de ART na cana e pureza do xarope flotado.

O aproveitamento de tempo também mostrou alta correlação com a quantidade de açúcar produzido nas duas análises realizadas. Conforme já citado, esta variável é um indicativo do grau de estabilidade da planta industrial. Os dias em que este valor foi elevado apresentaram alta produção de açúcar, indicando que, além de quantidade de material para processamento, altas produções de açúcar dependeram também de alta estabilidade do processo.

A correlação com a cor do açúcar apresentou valor negativo no PCA, o que significa que altas produções de açúcar estiveram altamente correlacionadas a cores baixas, ou

seja, à açúcar de melhor qualidade. Isto ocorreu, pois, os dias de alta produção de açúcar no período estudado foram dias de estabilidade da planta industrial, nos quais o controle da qualidade do açúcar se deu com maior facilidade. Em dias de alta instabilidade, além da quantidade de açúcar produzida ser baixa, não se conseguiu manter a qualidade do produto. Isto reforça a necessidade de uma boa qualidade de manutenção, para garantia de um bom aproveitamento de tempo e, conseqüentemente, da estabilidade do processo.

Na regressão PLS, destacou-se, também, a concentração de impurezas vegetais na cana, ou seja, folhas, ponteiros e raízes, partes da planta com alto teor de amido. Na etapa de tratamento do caldo, ocorre uma diminuição da concentração de amido, já que as altas temperaturas induzem sua floculação. Porém, a moagem da cana crua, advinda de colheita mecanizada, tem levado a um aumento significativo na concentração de impurezas vegetais, tornando mais difícil a remoção do amido durante o tratamento. A parcela dessa impureza que permanece no processo acaba por retardar o processo de cristalização, o que explica o valor elevado e negativo desse coeficiente na regressão (MERHEB, 2014).

A Tabela 3.5 apresenta as variáveis com maiores correlações com a cor do açúcar produzido, pela matriz de correlações do PCA, e também as que apresentaram maiores coeficientes na matriz M da regressão PLS para a cor do açúcar.

Tabela 3.5 – Variáveis altamente correlacionadas à cor do açúcar produzido, de acordo com a matriz de correlações do PCA e com a regressão PLS

Matriz de correlações do PCA		Regressão PLS	
$c_{i,36}$	Variável i	$m_{i,36}$	Variável i
0,8101	37 – Umidade do açúcar	0,2139	37 – Umidade do açúcar
0,7926	38 – Concentração de cinzas no açúcar	0,2029	38 – Concentração de cinzas no açúcar
0,7724	41 – Concentração de pontos pretos no açúcar	-0,1500	35 – Polarização do açúcar
-0,7702	35 – Polarização do açúcar	0,1277	44 – Turbidez do açúcar
0,7414	44 – Turbidez do açúcar	0,1272	41 – Concentração de pontos pretos no açúcar

A Figura 3.4 mostra o gráfico de coeficientes do PLS, e a Figura 3.5 apresenta o gráfico de seleção de modelo. Neste caso, foi selecionado o modelo com três componentes principais, com R^2 de ajuste igual a 0,8854 e R^2 de predição das respostas igual a 0,7816.

Figura 3.4 – Gráfico de coeficientes da regressão PLS para cor do açúcar

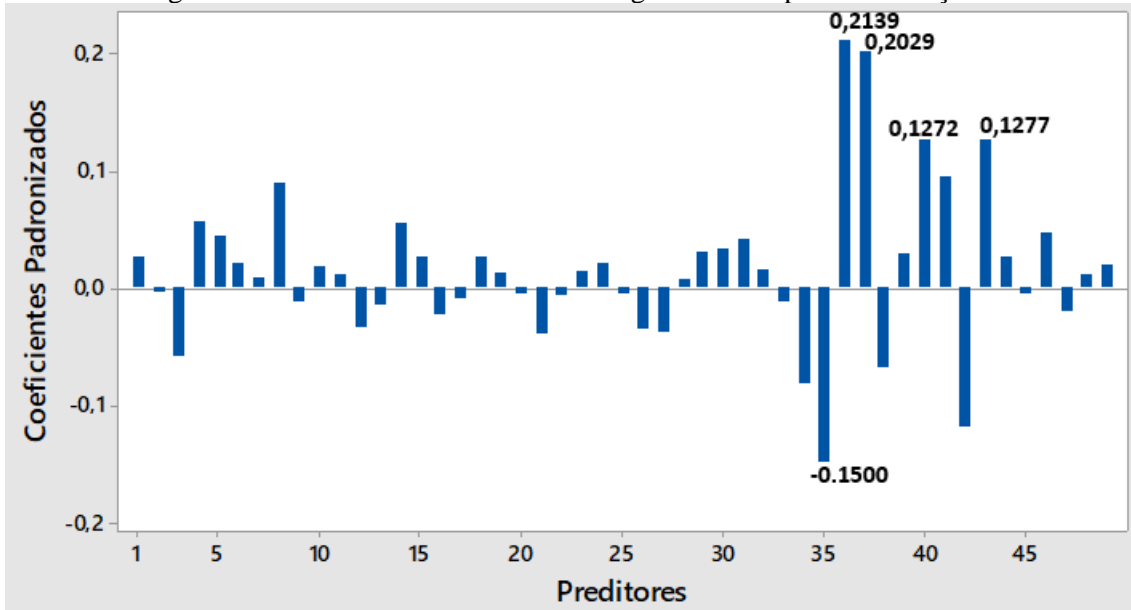
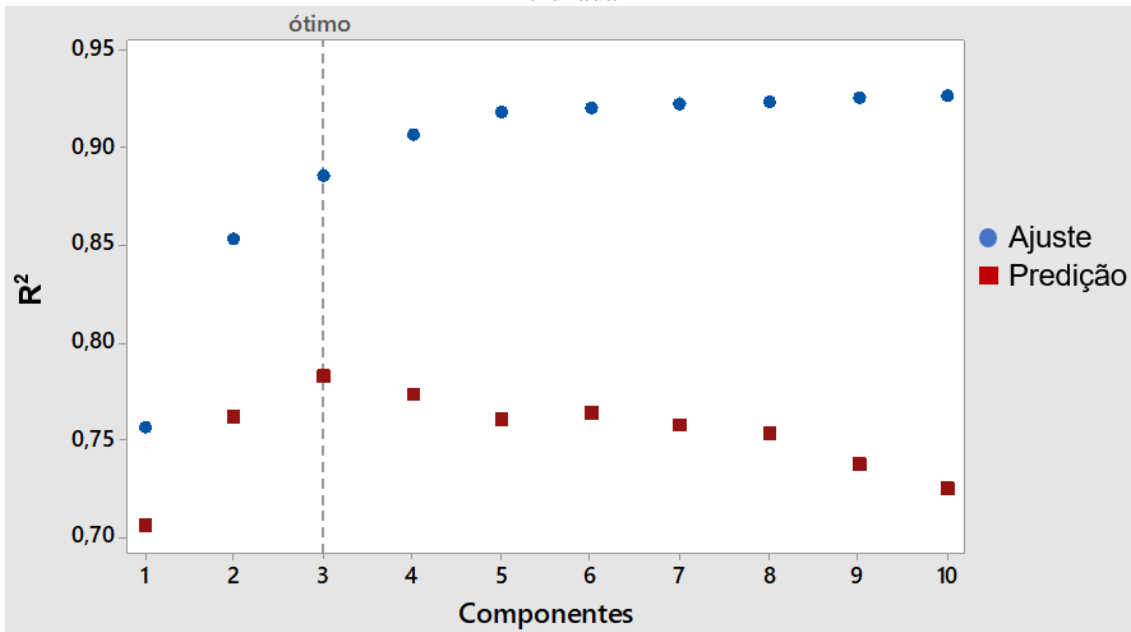


Figura 3.5 – Gráfico de seleção do modelo de PLS para cor do açúcar, pelo método de validação cruzada



A umidade foi a variável que apresentou maior correlação com a cor do açúcar, e, também, a que apresentou maior coeficiente na regressão PLS. A relação entre essas duas variáveis, já citada anteriormente, está ligada ao mel presente nos cristais de açúcar, pelos fenômenos de oclusão e inclusão líquidas. O mel é rico em contaminantes, e como se pode observar na Tabela 3.5, a presença destes contaminantes nos cristais é a responsável pelo aumento da cor do açúcar produzido.

A concentração de cinzas condutimétricas no açúcar representa o teor de compostos inorgânicos, como sais de potássio, sódio, cálcio, ferro, na forma de cloretos,

sulfatos e carbonatos, além de silicatos e sulfitos, e sua determinação baseia-se na grandeza de condutividade elétrica. Essas substâncias salinas têm sua origem no próprio caldo de cana e também são incorporados a ele pelo processo industrial, principalmente durante o processo de tratamento do caldo (MERHEB, 2014). Schlumbach; Pautov; Flöter (2017) estudaram a contribuição da inclusão líquida de mel para o aumento de cor do açúcar, por meio da determinação da transferência de cinzas do xarope para os cristais, partindo da premissa de que a presença de cinzas nos cristais é resultado da inclusão.

A determinação da concentração de pontos pretos no açúcar, outro parâmetro indicativo da qualidade do açúcar, é realizada por contagem das partículas de coloração contrastante com a cor dos cristais de açúcar, compostas de ferrugem, limalha de ferro, bagacilho, compostos caramelados e fuligem (LOPES; BORGES, 2004). Os pontos pretos podem ser percebidos visualmente em refrigerantes e líquidos transparentes, ou sentidos pela língua em balas e chocolates (OLIVEIRA; ESQUIAVETO; SILVA JÚNIOR, 2007).

A polarização representa a porcentagem de sacarose no açúcar, e apresentou correlação negativa com a cor do açúcar. Ou seja, quanto menor a polarização, maior foi a cor do açúcar. Isso ocorreu, pois, açúcares com polarização baixa são menos puros, ou seja, apresentam maiores concentrações de contaminantes, como dextrana, amido, cinzas, que estão relacionados a menor qualidade do produto (OLIVEIRA; ESQUIAVETO; SILVA JÚNIOR, 2007).

Por fim, a turbidez do açúcar representa a dificuldade da luz em atravessar a solução açucarada devido à presença de partículas em suspensão que provocam a dispersão da luz transmitida. A turbidez é uma característica indesejável em refrigerantes e bebidas alcoólicas, e está diretamente relacionada à presença de dextrana e amido no açúcar produzido, como demonstrado nos experimentos de cristalização por evaporação a vácuo realizados por Merheb et al., 2016. Na matriz de correlações, a cor do açúcar também apresentou correlação positiva expressiva com a concentração destes dois contaminantes nos cristais: 0,5557 para o amido e 0,5843 para a dextrana.

3.3.3 Componentes principais da variabilidade do processo

A Tabela 3.6 apresenta os autovetores correspondentes aos três componentes principais na decomposição da matriz de correlações, os autovalores referentes a cada um, e os carregamentos de cada variável original sobre eles. Os três maiores carregamentos de cada componente principal estão destacados em negrito e *italico*. A porcentagem da variância do

componente principal é calculada dividindo-se o autovalor correspondente a ele pela soma dos autovalores da matriz de correlações.

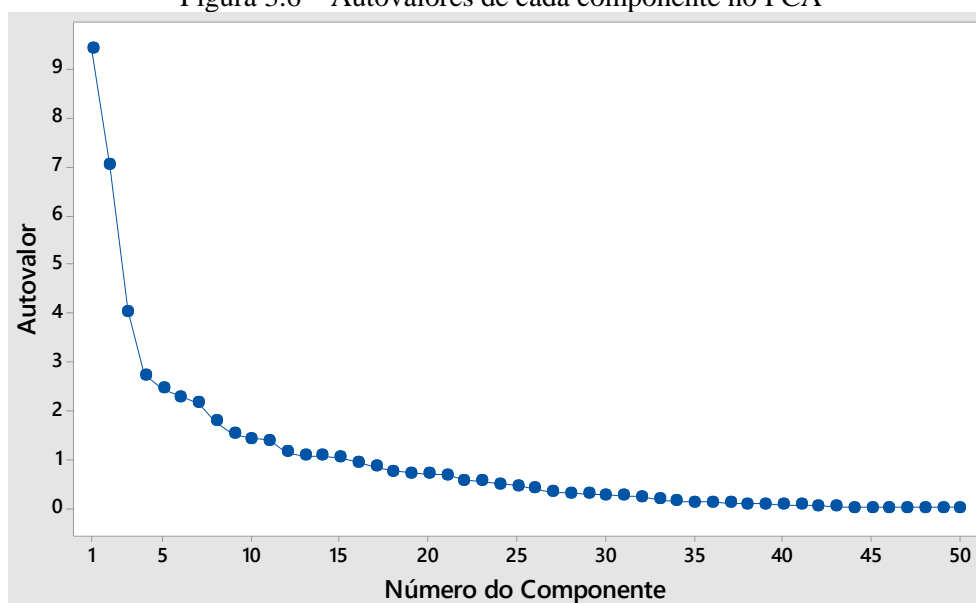
Tabela 3.6 – Autovetores, autovalores, porcentagens individual e cumulativa da variância dos dados explicada pelos três componentes principais

	Variável	PC₁	PC₂	PC₃
1	Quantidade total de cana processada	-0,0940	0,0476	-0,2936
2	Concentração de ART (açúcares redutores totais) na cana	-0,2055	0,1502	-0,1581
3	Tempo médio de corte da cana	0,0836	0,0976	-0,1594
4	Concentração de impurezas minerais na cana	0,1388	0,1293	0,0749
5	Concentração de impurezas vegetais na cana	0,0803	0,0570	0,3126
6	Concentração de dextrana na cana	0,1247	-0,0201	0,1394
7	Aproveitamento de tempo	-0,1143	0,0534	-0,2796
8	Pressão do vapor vegetal	-0,0505	0,1827	-0,0185
9	Pressão da linha de água dos condensadores	-0,0335	0,1204	-0,0096
10	Brix do xarope flotado	-0,0496	0,2825	-0,0354
11	Pol do xarope flotado	-0,0694	0,2830	-0,0466
12	Pureza do xarope flotado	-0,1574	0,0991	-0,0949
13	pH do xarope flotado	0,0391	-0,0672	-0,1402
14	Cor do xarope flotado	0,1760	-0,0562	0,0347
15	Turbidez do xarope flotado	0,1657	0,0386	0,0694
16	Brix do mel pobre	-0,0670	0,1442	-0,0345
17	Pol do mel pobre	-0,0696	0,2437	0,0228
18	Pureza do mel pobre	-0,0172	0,2357	0,1147
19	Brix do mel rico	0,0257	0,1211	-0,1091
20	Pol do mel rico	-0,0102	0,2046	-0,0185
21	Pureza do mel rico	-0,0679	0,2015	0,1659
22	Brix da massa A	-0,0494	0,0616	-0,0893
23	Pol da massa A	-0,1217	0,1707	0,1188
24	Pureza da massa A	-0,1081	0,1586	0,2160
25	Brix da massa B	-0,0558	0,0756	-0,1552
26	Pol da massa B	-0,0003	0,2113	0,1061
27	Pureza da massa B	0,0331	0,1955	0,2142
28	Brix do magma	0,0301	0,0610	-0,2593
29	Pol do magma	-0,0180	0,0774	-0,2282
30	Pureza do magma	-0,0781	0,0292	0,0550
31	Brix do mel final	-0,0603	0,0855	-0,1637
32	Pol do mel final	-0,1037	0,2448	0,0720
33	Pureza do mel final	-0,0835	0,2354	0,2028
34	Quantidade total de açúcar produzido	-0,2240	0,0476	-0,2441
35	Pol do açúcar	-0,2538	-0,1177	0,0615
36	Cor do açúcar	0,2757	0,0730	-0,0030
37	Umidade do açúcar	0,2394	0,0519	-0,0416
38	Concentração de cinzas no açúcar	0,2583	-0,0354	-0,0814
39	Concentração de sulfito no açúcar	0,0643	0,0116	-0,2544
40	Resíduos insolúveis no açúcar (comparativo)	0,2215	0,1176	-0,0895
41	Concentração de pontos pretos no açúcar	0,2557	0,1321	-0,1053
42	Concentração de partículas magnetizáveis no açúcar	0,1817	0,0403	-0,0238

43	pH do açúcar	-0,0280	0,1661	-0,1882
44	Turbidez do açúcar	0,2524	0,1162	-0,1271
45	Concentração de dextrana no açúcar	0,2228	0,1641	-0,0169
46	Concentração de amido no açúcar	0,2387	0,1081	-0,0289
47	Presença de flocos alcoólicos no açúcar	0,1874	0,1726	0,0396
48	Filtrabilidade do açúcar	0,1823	-0,0255	-0,0741
49	Tamanho médio (AM) do açúcar	0,0178	-0,1735	0,0536
50	Coefficiente de variação (CV) do açúcar	0,0955	-0,0648	-0,0712
	Autovalores	9,41	7,03	4,02
	Porcentagens individuais (%)	18,82	14,06	8,04
	Porcentagens cumulativas (%)	18,82	32,88	40,92

Na Figura 3.6, estão representados os autovalores de cada componente. Os três primeiros componentes responderam, juntos, por 40,92% da variância total dos dados analisados.

Figura 3.6 – Autovalores de cada componente no PCA



Na combinação linear das 50 variáveis originais para composição do componente principal PC₁, as variáveis com maiores carregamentos foram: cor do açúcar produzido, com peso 0,2757; concentração de cinzas no açúcar, com peso 0,2583 e concentração de pontos pretos no açúcar, com peso 0,2557. Nota-se que o componente principal PC₁, responsável por 18,82% de toda a variação dos dados analisados no período, apresentou como principais fatores três importantes variáveis relacionadas à qualidade do produto final. Isso evidencia alta variação da qualidade do açúcar no período estudado, resultado da grande instabilidade de processamento observada nos meses em questão.

Tal instabilidade esteve relacionada a problemas mecânicos apresentados pelas moendas e a desarmes do gerador de energia elétrica. Esses dois fatores, que ocorreram com

alta frequência durante todo o período, causavam, por consequência, grande instabilidade nas vazões de material para processamento e na pressão de vapor.

Já para o componente principal PC₂, responsável por 14,06% da variância total, as variáveis originais com maiores pesos foram: pol do xarope flotado, com peso 0,2830; brix do xarope flotado, com peso 0,2825 e pol do mel final, com peso 0,2448. Essas variáveis estão relacionadas à concentração de açúcar nos materiais do cozimento: xarope flotado, que é a corrente de entrada no processo de cozimento, e mel final, que é a corrente residual deste processo. O PC₂ indicou que um maior controle sobre as concentrações dos materiais do processo de fabricação de açúcar seria fundamental para diminuição da variabilidade da planta.

No caso do terceiro componente principal, PC₃, as variáveis que mais se destacaram na combinação linear foram: concentração de impurezas vegetais na cana, com peso 0,3126; quantidade total de cana processada, com peso -0,2936 e aproveitamento de tempo, com peso -0,2796. O PC₃, responsável por 8,04% da variância total dos dados, apresentou como variáveis de maior peso características da matéria-prima processada e o indicador de instabilidade da planta.

No ano de 2015, a usina cujos dados foram utilizados neste trabalho havia planejado produzir 1,68 sacos de açúcar (de 50 quilos) por tonelada de cana moída. Porém, foram produzidos 1,37 sacos por tonelada de cana. Supondo que houvesse maior controle sobre as variáveis altamente correlacionadas à quantidade de açúcar produzido, e, que esse controle fosse suficiente para alcançar a produção de açúcar planejada, teriam sido produzidos 942.567 sacos de açúcar adicionais. Considerando, ainda, que, no referido ano, o valor médio do saco de açúcar cristal foi igual a R\$ 55,73 (UDOP, 2018), a usina teria uma receita adicional de R\$ 52,5 milhões com a venda deste produto. Com relação à qualidade do açúcar produzido, o mercado oferece prêmios sobre o valor de venda do saco de açúcar, caso este tenha cor abaixo de 150 UI. A produção de açúcar que atendeu a este requisito, no mesmo ano, foi 1.303.208 sacos abaixo do planejado. Considerando que um maior controle sobre as variáveis que apresentaram altas correlações com a cor do açúcar levasse ao atendimento da qualidade planejada, os ganhos seriam ainda maiores.

3.4 Conclusões

Dentre as 50 variáveis analisadas nos 101 dias de produção, destacou-se, na matriz de correlações do PCA, a relação entre a presença de flocos alcoólicos e as concentrações dos polissacarídeos amido e dextrana no açúcar produzido. Apresentaram, também, altas

correlações entre si: brix e pol do xarope flotado; quantidade total de cana processada e aproveitamento de tempo; brix e pol do mel pobre; brix e pol do mel rico; pol e pureza da massa B; cor ICUMSA e umidade do açúcar; brix e pol do magma; brix e pol do mel final.

As variáveis que apresentaram as maiores correlações com a quantidade total de açúcar produzido, de acordo com a matriz de correlações do PCA, foram: aproveitamento de tempo, quantidade total de cana processada, concentração de ART na cana, cor do açúcar e pureza do xarope flotado. Pela regressão por PLS, as variáveis com maiores coeficientes, tendo como variável resposta a quantidade de açúcar produzido, foram: quantidade total de cana processada, aproveitamento de tempo, pureza do xarope flotado, concentração de impurezas vegetais na cana e concentração de ART na cana. Ambas análises mostraram que altas produções de açúcar ocorreram em dias de estabilidade do processo, com alta moagem, com matéria-prima mais concentrada em açúcares e com menor quantidade de impurezas, resultando também em um produto final de melhor qualidade.

Apresentaram alta correlação com a cor do açúcar produzido variáveis também relacionadas à qualidade do produto final, tanto no PCA quanto na regressão por PLS: umidade do açúcar, concentração de cinzas e pontos pretos, polarização e turbidez. As análises indicaram que açúcar de menor cor esteve relacionado a menores concentrações de outros compostos que não a sacarose, como água, sais inorgânicos, fuligem, bagacilho, ferrugem, caramelo, dextrana e amido.

Os três principais componentes resultantes da análise PCA responderam por 40,92% da variância total dos dados. O PC₁, com peso de 18,82%, foi composto principalmente por variáveis relacionadas à qualidade do açúcar produzido: cor, concentração de cinzas e pontos pretos. Já o PC₂, responsável por 14,06%, apresentou como variáveis principais as relacionadas à concentração de açúcar nas correntes da etapa de cozimento: brix e pol do xarope flotado, e pol do mel final. Por sua vez, o PC₃, com peso de 8,04%, foi composto primordialmente por variáveis relacionadas às características da cana-de-açúcar processada e à estabilidade de processamento industrial: concentração de impurezas vegetais na cana, quantidade total de cana processada e aproveitamento de tempo. Dessa forma, esforços no sentido de redução da variabilidade da planta industrial deveriam se concentrar, inicialmente, na redução da variabilidade das variáveis citadas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- CHEN, J. C. P.; CHOU, C. C. **Cane sugar handbook: a manual for cane sugar manufacturers and their chemists**. 12. ed. New York: John Wiley & Sons, 1993.
- CHEN, R.; KANG, S.; HAO, X.; LI, F.; DU, T.; QIU, R.; CHEN, J. Variations in tomato yield and quality in relation to soil properties and evapotranspiration under greenhouse condition. **Scientia Horticulturae**, v. 197, n. 3, p. 318–328, 2015.
- FERNANDES, A. C. **Cálculos na agroindústria da cana-de-açúcar**. 3. ed. Piracicaba, SP: STAB, 2011.
- GE, Z.; SONG, Z.; GAO, F. Review of recent research on data-based process monitoring. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 52, n. 10, p. 3543–3562, 2013.
- ICUMSA (INTERNATIONAL COMMISSION FOR UNIFORM METHODS OF SUGAR ANALYSIS). **ICUMSA Methods Book (2015)**. England: ICUMSA, 2015.
- JIANG, Q.; YAN, X.; ZHAO, W. Fault detection and diagnosis in chemical processes using sensitive principal component analysis. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 52, n. 4, p. 1635–1644, 2013.
- JOHNSON, R. A.; WICHERN, D. W. **Applied multivariate statistical analysis**. 6. ed. Upper Saddle River, NJ: Pearson Prentice Hall, 2007.
- KANO, M.; NAKAGAWA, Y. Data-based process monitoring, process control, and quality improvement: Recent developments and applications in steel industry. **Computers & Chemical Engineering**, v. 32, n. 1–2, p. 12–24, 2008.
- KU, W.; STORER, R. H.; GEORGAKIS, C. Disturbance detection and isolation by dynamic principal component analysis. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 30, n. 1, p. 179–196, 1995.
- LEMOS, L. R.; NOGUEIRA, A.; WOSIACKI, G.; LACERDA, L. G.; DEMIATE, I. M. The influence of different amounts of dextran and starch in crystallized sugar in the formation of floc in acidic carbonated solutions and alcoholic solutions. **Sugar Tech**, v. 15, n. 1, p. 65–70, 2013.
- LOPES, C. H.; BORGES, M. T. M. R. **Manual de análise de açúcar: açúcar VHP, VVHP, demerara, cristal, refinado e açúcar líquido**. Araras, SP: Sucral, 2004.

MERHEB, G. A. **Influência da contaminação combinada de dextrana e amido na cristalização do açúcar**. 2014. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos.

MERHEB, G. A.; OLIVEIRA, N. de; GIULIETTI, M.; BERNARDO, A. Combined effect of starch and dextran in sucrose crystallization. **Sugar Industry**, v. 141, p. 697–704, 2016.

MULLIN, J. W. **Crystallization**. 4. ed. Woburn, MA: Butterworth Heinemann, 2001.

NETO, J. M. M. Estatística multivariada: uma visão didática-metodológica. **Filosofia da ciência**, 2004.

OLIVEIRA, D. T.; ESQUIAVETO, M. M. M.; SILVA JÚNIOR, J. F. Impacto dos itens da especificação do açúcar na indústria alimentícia. **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, v. 27, p. 99–102, 2007.

OLIVEIRA, A. S. de; RINALDI, D. A.; TAMANINI, C.; VOLL, C. E.; HAULY, M. C. O. Fatores que interferem na produção de dextrana por microrganismos contaminantes da cana-de-açúcar. **Semina: Ciências Exatas e Tecnológicas**, v. 23, n. 1, p. 99–104, 2002.

QIN, S. J. Survey on data-driven industrial process monitoring and diagnosis. **Annual Reviews in Control**, v. 36, n. 2, p. 220–234, 2012.

RAMBURAN, S.; ZHOU, M.; LABUSCHAGNE, M. Interpretation of genotype×environment interactions of sugarcane: Identifying significant environmental factors. **Field Crops Research**, v. 124, n. 3, p. 392–399, 2011.

RODUSHKIN, I.; BAXTER, D. C.; ENGSTRÖM, E.; HOOGEWERFF, J.; HORN, P.; PAPESCH, W.; WATLING, J.; LATKOCZY, C.; VAN DER PEIJL, G.; BERENDS-MONTERO, S.; EHLERINGER, J.; ZDANOWICZ, V. Elemental and isotopic characterization of cane and beet sugars. **Journal of Food Composition and Analysis**, v. 24, n. 1, p. 70–78, 2011.

ROY, P. P.; ROY, K. On some aspects of variable selection for partial least squares regression models. **QSAR & Combinatorial Science**, v. 27, n. 3, p. 302–313, 2008.

SANTCHURN, D.; RAMDOYAL, K.; BADALOO, M. G. H.; LABUSCHAGNE, M. From sugar industry to cane industry: investigations on multivariate data analysis techniques in the identification of different high biomass sugarcane varieties. **Euphytica**, v. 185, n. 3, p. 543–558, 2012.

SARANTÓPOULOS, C. I. G. L.; OLIVEIRA, L. M.; CANAVESI, É. **Requisitos de conservação de alimentos em embalagens flexíveis**. 2. ed. Campinas: CETEA/ITAL, 2002.

SCHLUMBACH, K.; PAUTOV, A.; FLÖTER, E. Crystallization and analysis of beet and cane sugar blends. **Journal of Food Engineering**, v. 196, p. 159–169, 2017.

SUN, X.; CHEN, T.; MARQUEZ, H. J. Detecting leaks and sensor biases by recursive identification with forgetting factors. In: **Proceedings of the 40th IEEE Conference on Decision and Control**. Edmonton, Alberta: IEEE, 2001.

UDOP (UNIÃO DOS PRODUTORES DE BIOENERGIA). **Determinação das impurezas minerais em carregamentos de cana-de-açúcar pelo método da incineração em forno mufla**, Outubro/2014a. Disponível em: <http://www.udop.com.br/download/legislacao/bioenergia/institucional_site_juridico/impurezas_minerais_cana_objetivo Equipamentos_procedimentos.pdf>. Acesso em: 19 set. 2017.

UDOP (UNIÃO DOS PRODUTORES DE BIOENERGIA). **Determinação das impurezas vegetais e totais em carregamentos de cana-de-açúcar pelo método de limpeza manual e a seco**, Outubro/2014b. Disponível em: <http://www.udop.com.br/download/legislacao/bioenergia/institucional_site_juridico/impurezas_vegetais_totais_objetivo Equipamentos_procedimentos.pdf>. Acesso em: 19 set. 2017.

UDOP (UNIÃO DOS PRODUTORES DE BIOENERGIA). **Histórico do Açúcar Cristal CEPEA/ESALQ – São Paulo**, 2018. Disponível em: <http://www.udop.com.br/index.php?item=acucar_historico&op=1>. Acesso em: 26 dez. 2018.

YIN, S.; DING, S. X.; XIE, X.; LUO, H. A review on basic data-driven approaches for industrial process monitoring. **IEEE Transactions on Industrial Electronics**, v. 61, n. 11, p. 6418–6428, 2014.

YIN, S.; LI, X.; GAO, H.; KAYNAK, O. Data-based techniques focused on modern industry: an overview. **IEEE Transactions on Industrial Electronics**, v. 62, n. 1, p. 657–667, 2015.

Capítulo 4 – CRISTALIZAÇÃO DA SACAROSE: MODELAGEM E AVALIAÇÃO DAS RESPOSTAS DA PRODUÇÃO FRENTE A VARIAÇÕES TÍPICAS DO PROCESSO¹

RESUMO

Na maioria das usinas de açúcar e etanol brasileiras, o processo de cristalização da sacarose é realizado no sistema conhecido como cozimento em duas massas. Considerado uma etapa fundamental para obtenção de açúcar na qualidade desejada, esse processo representa grande parcela dos custos de produção das indústrias, dado seu alto gasto energético, baixo grau de automatização e alta demanda de mão-de-obra. Assim, este trabalho teve por objetivo implementar um modelo fenomenológico do cozimento em duas massas, utilizando o *software* EMSO. Os resultados da simulação foram validados por meio da comparação com os dados do processo real de uma usina localizada no interior do Estado de São Paulo. O tamanho médio dos cristais na simulação foi de 0,64 mm, com coeficiente de variação igual a 30,58%, enquanto a produção real apresentou tamanho médio de 0,65 mm e coeficiente de variação igual a 25,36% no período estudado. Para ilustrar o impacto das impurezas na produção de açúcar, foram impostas à simulação alterações na pureza do xarope. Também foram alterados o brix do xarope e as condições do vapor, de forma a simular a instabilidade observada no processo real. Os resultados mostraram que a concentração de impurezas no processo exerceu grande influência sobre a distribuição de tamanho dos cristais produzidos. Por outro lado, o brix do xarope e a vazão de vapor vegetal, apesar de não afetarem a distribuição de tamanho dos cristais, tiveram grande influência sobre a concentração mássica de cristais na massa. Espera-se que os resultados obtidos contribuam para o desenvolvimento de estratégias de controle para os cozedores de açúcar, reduzindo, assim, o impacto do custo dessa etapa do processo nas usinas.

Palavras-chave: cristalização da sacarose, indústria de açúcar, modelagem fenomenológica, simulação, EMSO

4.1 Introdução

A cristalização industrial do açúcar, juntamente com a etapa precedente de evaporação do caldo de cana, são processos de alto gasto energético e, portanto, representam uma parcela significativa dos custos de produção. Os dois processos estão intimamente

¹Este trabalho foi aceito para publicação no periódico *Brazilian Journal of Chemical Engineering* (ISSN 0104-6632, 1678-4383), com o título “*Sucrose Crystallization: Modeling and Evaluation of Production Responses to Typical Process Fluctuations*”.

relacionados, pois, além de fornecer o xarope, matéria-prima para a cristalização, a evaporação do caldo ainda é responsável pela geração do vapor utilizado durante a cristalização do açúcar (SHAMIM et al., 2016). Dados os altos custos envolvidos nas duas operações, a importância da etapa de cristalização para a qualidade do açúcar produzido, e o baixo nível de automatização encontrado nas usinas, esses processos têm sido estudados, com esforços no sentido de encontrar modelos que os representem de maneira satisfatória, e que permitam o desenvolvimento de estruturas de controle adequadas.

Vários autores estudaram a cinética de cristalização da sacarose, sob abordagens diversas. Enquanto alguns trabalhos visaram à determinação dos parâmetros cinéticos da cristalização a partir de soluções puras de sacarose, sob diferentes condições de supersaturação e agitação (HOWELL et al., 2002; KHADDOUR et al., 2010; VAN HOOK, 1944), outros estudaram a redução da taxa de crescimento dos cristais e a alteração do seu hábito na presença de contaminantes comumente presentes no processo industrial, como rafinose, glicose, frutose e sais (MARTINS; ROCHA; REIN, 2005; OUIAZZANE et al., 2008b; VAN HOOK, 1946, 1948).

Van Hook (1945) realizou experimentos que sugeriram que a taxa de crescimento dos cristais em determinadas condições de operação é controlada pela etapa de deposição das moléculas na rede cristalina, e não pelo transporte da sacarose na fronteira solução-cristal. Liang e Hartel (1991) propuseram uma modelagem para o crescimento dos cristais em um cristalizador contínuo, considerando a dispersão da velocidade de crescimento. Este fenômeno, observado experimentalmente pela primeira vez por White e Wright (1971) *apud* Mullin (2001), leva em conta que cristais com o mesmo tamanho inicial, e sujeitos às mesmas condições de temperatura, supersaturação e pureza, podem crescer a diferentes taxas. As principais causas para a dispersão da velocidade de crescimento são os diferentes graus de deformação na estrutura cristalina, que acontecem devido às tensões mecânicas transmitidas aos cristais por cisalhamento com o fluido, com outros cristais, com o agitador, ou outras partes do cristalizador (MULLIN, 2001). Ouiazzane et al. (2008a), por sua vez, utilizaram o processo de resfriamento em batelada para determinação dos parâmetros cinéticos de nucleação secundária e crescimento. Kumar; Martins; Rocha (2008) construíram e testaram uma rede neural para analisar o crescimento dos cristais sob diferentes condições de operação.

Outros trabalhos se propuseram a modelar e simular o processo industrial de cristalização da sacarose. Chorão (1995) desenvolveu um modelo matemático fenomenológico para a simulação da cristalização, incluindo os fenômenos de nucleação, crescimento e

aglomeração, implementou sensores para acompanhamento de variáveis do processo que não são facilmente medidas, e determinou experimentalmente parâmetros relacionados à transferência de calor e massa no cristalizador. Georgieva; Meireles; Feyo de Azevedo (2003) propuseram um modelo híbrido para um cristalizador de refino de açúcar, baseado em dois módulos: o primeiro, fenomenológico, contendo os balanços de massa, energia e populacional; o segundo, uma rede neural para estimar os parâmetros cinéticos de nucleação, crescimento e aglomeração.

Alguns trabalhos preocuparam-se, ainda, com a integração do processo de cozimento com as demais etapas industriais de produção de açúcar. Jesus (2004) modelou a evaporação em múltiplo efeito e o processo de um cozedor industrial de granagem, comparando os resultados da simulação com dados reais dos dois processos. Mazaeda et al. (2014) descreveram um modelo de otimização do cristalizador com relação ao consumo de vapor, frente a variações de vazão, concentração e pureza do xarope utilizado como matéria-prima. Shamim et al. (2016) também propuseram um modelo de otimização do consumo de vapor, considerando, inclusive, a etapa precedente de evaporação do caldo.

Além do interesse prático de modelagem da cristalização, a busca por modelos para descrever esse processo também encontra grande interesse na área científica, pois os mecanismos envolvidos na cristalização ainda não são bem conhecidos (GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003). Dificuldade adicional é encontrada na simulação da cristalização em duas massas, muito utilizada nas usinas brasileiras que produzem tanto açúcar como etanol, visto que ainda há pouca referência sobre ela na literatura (CHEN; CHOU, 1993; DIAS et al., 2015; HUGOT, 1986). Entretanto, o desenvolvimento de uma simulação dinâmica deste processo industrial de cristalização, com reciclo do mel, se faz necessário para que se possa testar a eficácia de possíveis estruturas de controle.

Assim, este trabalho teve como objetivo implementar um modelo no *software* de simulação EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*) do processo de cristalização em duas massas, com reciclo do mel. O modelo foi baseado nos princípios fundamentais de conservação de massa e energia, e no balanço populacional, incluindo os fenômenos de nucleação e dispersão da velocidade de crescimento dos cristais. Foram estudadas, também, as relações entre as condições operacionais e as respostas da produção de açúcar, por meio de alterações em variáveis do xarope e do vapor, consideradas como entradas da simulação.

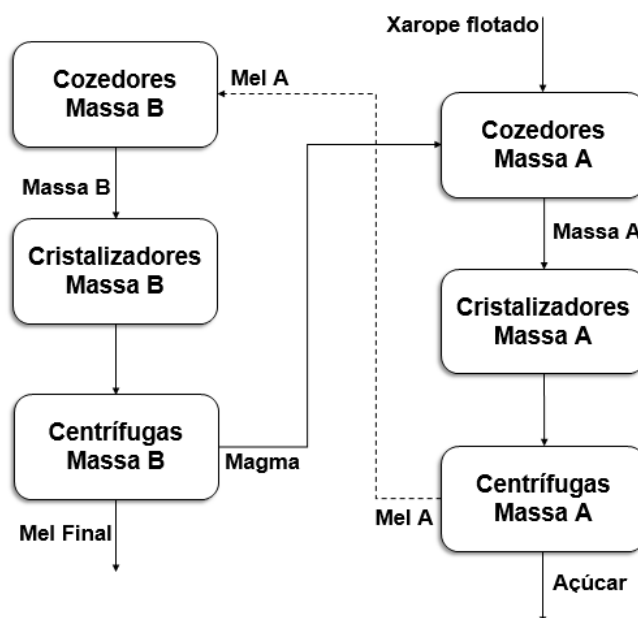
4.2 Materiais e métodos

A primeira parte deste tópico apresenta o processo de cristalização industrial de açúcar em duas massas, utilizado como base para as simulações realizadas. Na segunda parte, são apresentadas as principais equações do modelo.

4.2.1 Simulações do processo de cristalização em duas massas

O processo de cristalização industrial do açúcar em duas massas, representado na Figura 4.1, foi modelado e implementado no *software* EMSO, simulador cuja linguagem de programação é orientada a objetos, possibilitando, dessa forma, a construção de modelos complexos, em regime estacionário ou transiente, a partir de outros mais simples, por meio dos conceitos de herança e composição.

Figura 4.1 – Diagrama de blocos do processo de cristalização industrial do açúcar em duas massas



Fonte: Acervo pessoal

A ferramenta de modelagem, simulação e otimização de processos dinâmicos EMSO foi desenvolvida e apresentada por Soares e Secchi (2003) e, além da linguagem orientada a objetos, que facilita o uso e o entendimento do sistema como um todo e de cada operação individualmente, apresenta alta flexibilidade no uso de seus diversos recursos. Há três entidades principais entidades na linguagem: *models*, *devices* e *flowsheets* (RODRIGUES; SOARES; SECCHI, 2010; SOARES; SECCHI, 2003, 2004).

Model é a descrição matemática de algum equipamento real, parte de algum processo, ou até mesmo de um *software*. Cada *model* pode conter parâmetros, variáveis, equações, condições iniciais e condições de contorno. Um único *model* pode ser usado para

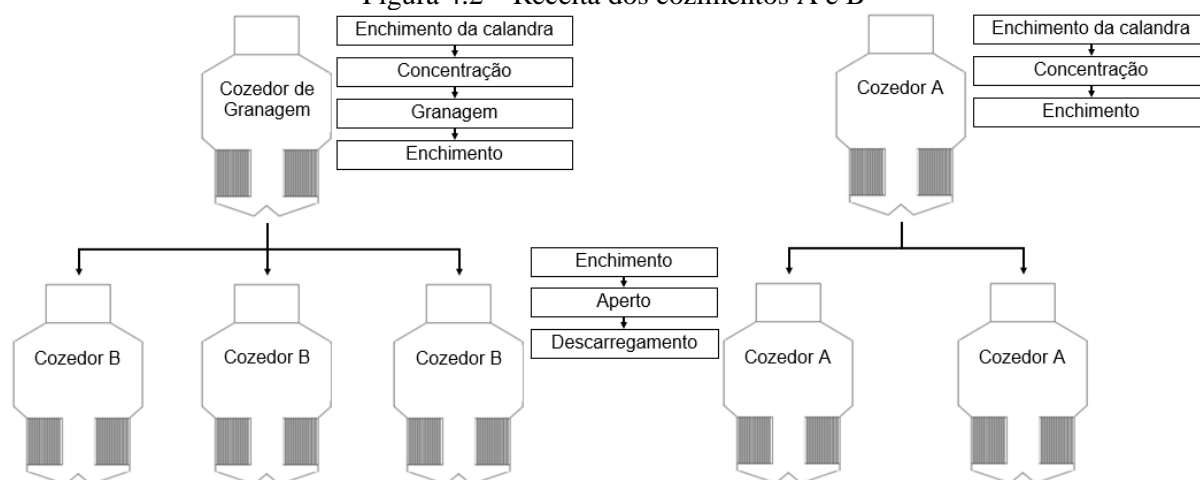
representar diversos *devices*, os quais têm a mesma estrutura, mas podem ter diferentes parâmetros ou especificações. No *flowsheet*, os *devices* são conectados um ao outro, representando um processo real. O *software* tem uma interface gráfica amigável, que possibilita a manipulação de vários *models*, juntamente com resultados e ilustrações gráficas (RODRIGUES; SOARES; SECCHI, 2010; SOARES; SECCHI, 2003, 2004).

O processo utilizado como base para a modelagem foi o de uma usina localizada no interior do Estado de São Paulo, no qual um cozedor de massa B era utilizado para o procedimento de “granagem” – ou crescimento de sementes. As sementes são uma suspensão em etanol anidro de uma população conhecida de cristais de sacarose. Nesse cozedor, eram realizadas as seguintes etapas: enchimento da calandra com mel A, concentração, granagem e enchimento total com mel A. A partir de então, a massa era dividida entre três cozedores de massa B, em procedimentos conhecidos como “cortes”. Os três cozedores eram alimentados, então, com mel A.

Durante todo o processo, as vazões de mel e vapor eram controladas manualmente de forma a evitar a dissolução de cristais ou a formação de falsos grãos por nucleação espontânea. Na simulação, as vazões de mel e vapor de cada etapa foram selecionadas de modo que o coeficiente de supersaturação durante todo o processo se mantivesse dentro dos limites da zona metaestável, entre 1,0 e o limite crítico, por volta de 1,2 (HUGOT, 1986; MULLIN, 2001). Os volumes a serem completados em cada etapa foram baseados nos cozedores de massa B da usina em estudo, com calandra de 26 m³ e volume total de trabalho igual a 65 m³. Após completar-se o volume dos três cozedores de massa B, ocorriam ainda as etapas de aperto, para alcançar a concentração desejada de cristais, e descarregamento da massa nos cristalizadores.

Já no cozimento de massa A, o enchimento da calandra dos cozedores era feito com magma, ou açúcar úmido proveniente da centrífuga de massa B. A partir de então, ocorriam as etapas de concentração, enchimento com xarope flotado, divisão da massa entre dois cozedores, enchimento dos dois cozedores com xarope flotado, aperto e descarregamento nos cristalizadores de massa A. As vazões de xarope e vapor durante as etapas de enchimento também foram tais que a supersaturação se mantivesse dentro dos limites da zona metaestável. Neste caso, foram utilizados como referência os cozedores de massa A da usina em estudo, com calandra de 14 m³ e volume total de trabalho igual a 40 m³. A Figura 4.2 apresenta, de forma esquemática, os procedimentos descritos para os cozimentos A e B.

Figura 4.2 – Receita dos cozimentos A e B



Fonte: Acervo pessoal

A simulação base foi feita utilizando vapor com pressão absoluta de 1,70 bar e temperatura igual a 115°C, características do vapor vegetal gerado na etapa de evaporação do caldo, precedente à cristalização. A pressão absoluta no interior dos cozedores foi mantida em 0,23 bar, ou vácuo de 22,7 inHg, que na prática industrial é garantida por meio de condensadores ou multijatos.

O brix e a pureza do xarope flotado, utilizado no cozimento de massa A, foram considerados iguais às médias dessas variáveis no período entre 01 de junho e 31 de outubro de 2015 na usina em estudo: 58,27% e 85,92%, respectivamente. A temperatura do xarope flotado foi mantida em 65°C, valor típico dessa corrente após a saída dos evaporadores.

A temperatura da água adicionada à massa para controlar a supersaturação e usada para diluir o magma foi considerada igual a 90°C. Em média, esta é a temperatura do condensado dos evaporadores, que, no processo industrial, é utilizado para essas finalidades. A Tabela 4.1 resume as principais entradas da simulação base dos cozimentos.

A modelagem do processo de cristalização nos cozedores A e B englobou os balanços de massa, energia e populacional. Foram considerados os mecanismos de nucleação e dispersão da velocidade de crescimento, que são apresentados na seção 4.2.2. As simplificações assumidas no modelo foram: (i) a massa é perfeitamente homogênea em todo o volume do cozedor; (ii) sua temperatura é uniforme; (iii) o coeficiente de forma do cristal não varia durante o processo; (iv) todo vapor fornecido é condensado (CHORÃO, 1995; GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003; JESUS, 2004; MARCINIUK JUNIOR, 2015).

Tabela 4.1 – Entradas da simulação base dos cozimentos

		Massa B	Massa A
Pressão absoluta do vapor de aquecimento	bar	1,70	1,70
Temperatura do vapor de aquecimento	°C	115,0	115,0
Temperatura da água	°C	90,0	90,0
Pressão absoluta no interior do cozedor	bar	0,23	0,23
Enchimento da calandra			
Vazão de vapor	t/h	0	0
Vazão de mel A / magma	m ³ /h	78,0	42,0
Vazão de água	m ³ /h	0	0
Volume máximo	m ³	26,0	14,0
Concentração			
Vazão de vapor			
- até supersaturação 1,06	t/h	17,4	1,9
- após supersaturação 1,06	t/h	11,4	0,6
Vazão de mel A / xarope			
- até supersaturação 1,06	m ³ /h	vazão necessária para compensar a vaporização	vazão necessária para compensar a vaporização
- após supersaturação 1,06	m ³ /h	0	0
Vazão de água	m ³ /h	0	0
Volume máximo	m ³	26,0	14,0
Granagem			
Vazão de vapor	t/h	1,9	-
Vazão de mel A	m ³ /h	0	-
Vazão de água	m ³ /h	0	-
Volume máximo	m ³	26,0	-
Enchimento			
Vazão de vapor	t/h	3,8	8,9
Vazão de mel A / xarope	m ³ /h	44,0	26
Vazão de água	m ³ /h	0,8	0,2
Volume máximo	m ³	65,0	40,0
Corte 1			
Vazão de vapor	t/h	3,8	12,7
Vazão de mel A / xarope	m ³ /h	44,0	28,0
Vazão de água	m ³ /h	0,2	0,2
Volume máximo	m ³	130,0	80,0
Corte 2			
Vazão de vapor	t/h	13,9	-
Vazão de mel A	m ³ /h	50,0	-
Vazão de água	m ³ /h	0,2	-
Volume máximo	m ³	195,0	-
Aperto			
Vazão de vapor	t/h	25,3	16,5
Vazão de mel A / xarope	m ³ /h	0	0
Vazão de água	m ³ /h	0	0
Volume máximo	m ³	195,0	80,0

Em usinas nas quais não há produção de etanol, existe o interesse em se esgotar as massas, ou seja, diminuir ao máximo sua pureza. Nessas usinas, além de adotar-se o sistema de cozimento em três massas, é desejável que o processo de cristalização continue ocorrendo nos cristalizadores, por resfriamento até aproximadamente 50°C, que pode se dar de forma natural ou forçada. No caso do resfriamento natural, são recomendados altos tempos de retenção da massa nos cristalizadores, em torno de dois ou três dias, enquanto nos cristalizadores com resfriamento forçado, esse tempo pode cair para cerca de 15 horas. Faz-se necessário, ainda, o reaquecimento da massa após esse período, para diminuir sua viscosidade e possibilitar a centrifugação (HUGOT, 1986; PAYNE, 1989).

Na maioria das usinas brasileiras, e também na usina em questão, não há interesse em se esgotar as massas, pois o mel final é destinado à produção de etanol (FERNANDES, 2011). Dessa forma, além de ser utilizado o sistema de cozimento em duas massas, os cristalizadores são utilizados apenas como tanques de passagem entre o cozimento e a centrifugação. Não há circulação de água para resfriamento forçado da massa, e os equipamentos recebem massa proveniente das bateladas de cozimento em intervalos curtos de tempo, de forma que não há resfriamento significativo que promova um crescimento adicional dos cristais. Portanto, os cristalizadores foram modelados simplesmente como tanques de massa, cuja função foi apenas garantir o abastecimento contínuo das centrífugas.

Nas centrífugas, ocorre a separação entre os cristais e o licor-mãe. No caso da centrífuga de massa B, a suspensão de cristais é chamada magma, açúcar de segunda, ou açúcar B, e o mel é chamado mel final, mel de segunda, ou melaço, e é destinado à produção de etanol. Na centrífuga de massa A, os cristais formam a corrente de açúcar úmido, que passa ainda pelas etapas de secagem, ensaque e armazenamento, e o mel é chamado de mel A, ou mel de primeira (HUGOT, 1986; CHEN; CHOU, 1993; DIAS et al., 2015).

O mel de primeira pode ser separado, nas centrífugas de massa A, em mel rico e mel pobre. O mel pobre, proveniente do início da centrifugação, pode ser destinado ao cozimento de massa B, enquanto o mel rico, proveniente da lavagem dos cristais durante as fases intermediária e final da centrifugação, pode ser misturado ao xarope flotado para alimentação dos cozedores de massa A. Nessa modelagem, não foi considerada a separação do mel de primeira, sendo sua vazão total destinada ao cozimento de massa B, procedimento adotado principalmente na produção de açúcar de cor baixa. Existem ainda outras variações do procedimento descrito para o cozimento em duas massas, tais como: enchimento da calandra do cozedor de granagem com xarope flotado; enchimento dos cozedores de massa B com

misturas de xarope flotado, mel rico e mel pobre em proporções variadas; divisão da massa B em dois ou quatro cozedores. Essas variações são adotadas de forma a atender objetivos diversos, ou contornar problemas de processo em diferentes períodos da safra (HUGOT, 1986; CHEN; CHOU, 1993; SOUSA et al., 1995).

As centrífugas foram modeladas como separadores sólido-líquido em operação contínua. No caso da centrífuga B, a eficiência de separação do mel da corrente sólida foi considerada 90%, enquanto na centrífuga de massa A, considerou-se eficiência de 95% nessa separação. Também foi considerada a perda de cristais finos para a corrente de mel nas centrífugas, sendo que as correntes sólidas mantiveram cristais com tamanho maior ou igual a 0,20 mm, no caso da massa B, e 0,30 mm, para a massa A. A massa de cristais menores foi incorporada às correntes líquidas. Tais tamanhos foram selecionados de forma a aproximar os valores simulados de pureza dos méis aos dados industriais.

Entre a centrífuga de massa B e o cozimento de massa A, foi modelado o tanque pulmão de magma, com adição de água na vazão correspondente a 1% da vazão de entrada de magma. Entre a centrífuga de massa A e o cozimento de massa B, foi inserido o tanque de mel. Nele, os cristais presentes no mel A eram dissolvidos, para que não houvesse cristais na alimentação dos cozedores de massa B.

Os resultados da simulação base foram comparados com as especificações das variáveis na usina em estudo, e também com as médias reais no período estudado, entre 01 de junho e 31 de outubro de 2015. Vale ressaltar que a validação do modelo foi feita levando-se em consideração apenas os resultados finais da simulação, por meio da comparação com resultados de análises laboratoriais das massas, do magma, dos méis e do açúcar. Os cozedores da usina eram equipados apenas com sensores analógicos de temperatura e pressão, não sendo possível obter perfis reais de nível, temperatura, pressão ou concentração durante o processo de cozimento para compará-los com as variáveis simuladas.

Com o objetivo de avaliar o impacto da qualidade da cana processada na produção do açúcar, a simulação do cozimento de massa A foi repetida, alterando a pureza do xarope flotado para os valores mínimo e máximo no período estudado, 81,06% e 87,26%, respectivamente. A pureza do xarope flotado está diretamente relacionada à pureza da cana processada, e pouco sofre influência dos processos anteriores ao cozimento. Portanto, seu valor não varia significativamente durante um dia de produção, mas pode variar de um dia a outro, ou de uma semana a outra.

4.2.2 Equacionamento

As Equações 4.1 a 4.4 apresentam, respectivamente, os balanços de massa para sacarose, impurezas, água e cristais nos cozedores. As impurezas são definidas como todo material dissolvido que não seja sacarose (CHORÃO, 1995; GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003; JESUS, 2004; MARCINIUK JUNIOR, 2015). A diferença das equações em relação às referências citadas está nos termos que representam a saída de massa, pois nessa modelagem foi incluída a etapa de descarregamento dos cozedores. M representa a massa, t , o tempo, F , a vazão volumétrica, ρ , a densidade, ω_c , a porcentagem mássica de cristais, bx , a porcentagem mássica de sólidos dissolvidos, pur , a pureza em porcentagem, J_{cris} , a taxa de cristalização, e J_{vap} , a taxa de vaporização. O subíndice sac significa sacarose, imp , impurezas, w , água, c , cristais, enquanto e e s correspondem às correntes de entrada e de saída, respectivamente. As densidades das correntes que não continham cristais foram calculadas por meio da equação de densidade da solução impura (Equação B.9), enquanto que, para as correntes contendo cristais, utilizou-se a equação de densidade da suspensão (Equação B.10).

Balanço de massa para sacarose (Cozedores A e B):

$$\frac{dM_{sac}}{dt} = F_e \cdot \rho_e \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,e}}{100}\right) \cdot \frac{bx_e}{100} \cdot \frac{pur_e}{100} - J_{cris} - F_s \cdot \rho_s \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,s}}{100}\right) \cdot \frac{bx_s}{100} \cdot \frac{pur_s}{100} \quad (4.1)$$

Balanço de massa para impurezas (Cozedores A e B):

$$\frac{dM_{imp}}{dt} = F_e \cdot \rho_e \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,e}}{100}\right) \cdot \frac{bx_e}{100} \cdot \frac{(1 - pur_e)}{100} - F_s \cdot \rho_s \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,s}}{100}\right) \cdot \frac{bx_s}{100} \cdot \frac{(1 - pur_s)}{100} \quad (4.2)$$

Balanço de massa para água (Cozedores A e B):

$$\frac{dM_w}{dt} = F_e \cdot \rho_e \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,e}}{100}\right) \cdot \frac{(1 - bx_e)}{100} - J_{vap} - F_s \cdot \rho_s \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,s}}{100}\right) \cdot \frac{(1 - bx_s)}{100} \quad (4.3)$$

Balanço de massa para cristais (Cozedores A e B):

$$\frac{dM_c}{dt} = F_e \cdot \rho_e \cdot \frac{\omega_{c,e}}{100} + J_{cris} - F_s \cdot \rho_s \cdot \frac{\omega_{c,s}}{100} \quad (4.4)$$

A taxa de cristalização, J_{cris} , é resultado do balanço populacional, e a taxa de vaporização, J_{vap} , é dada pela Equação 4.5, na qual o parâmetro k_{vap} traduz o efeito de superaquecimento da massa na taxa de vaporização, e é considerado igual a 108 kg/(h°C) (CHORÃO, 1995; GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003; JESUS, 2004; MARCINIUK JUNIOR, 2015).

$$J_{vap} = \frac{Q_{v1}}{\Delta H_{vap,v2}} + k_{vap} \cdot (T - T_{sat} - EPE) \quad (4.5)$$

Q_{v1} representa a taxa de calor fornecida pelo vapor de aquecimento, calculada pela Equação 4.6, na qual o parâmetro α é o fator de correção para a entalpia do vapor de aquecimento, que engloba perdas de calor e imprecisões nos medidores de pressão do vapor, e é considerado igual a 1,02 (CHORÃO, 1995; GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003; MARCINIUK JUNIOR, 2015). T é a temperatura, T_{sat} , a temperatura de saturação, EPE , a elevação do ponto de ebulição, ΔH_{vap} , a entalpia específica de vaporização, e W , a vazão mássica. Os subíndices $v1$ e $v2$ dizem respeito ao vapor de aquecimento e ao vapor gerado no cozedor, respectivamente.

$$Q_{v1} = W_{v1} \cdot \alpha \cdot \Delta H_{vap,v1} \quad (4.6)$$

O balanço de energia durante o processo de cristalização é representado pela Equação 4.7. Após as passagens matemáticas descritas no Apêndice A, esta equação toma a forma da Equação 4.8, amplamente utilizada na literatura (CHORÃO, 1995; GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003; JESUS, 2004; MARCINIUK JUNIOR, 2015). Nela, Cp representa o calor específico, H , a entalpia específica, e o subíndice sol significa solução.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(M_{sol}H_{sol} + M_c H_c) \\ = Q_{v1} + F_e \cdot \rho_e \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega_{c,e}}{100}\right) \cdot H_{sol,e} + \frac{\omega_{c,e}}{100} \cdot H_{c,e} \right] - J_{vap} \cdot H_{v2} - F_s \cdot \rho_s \\ \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega_{c,s}}{100}\right) \cdot H_{sol,s} + \frac{\omega_{c,s}}{100} \cdot H_{c,s} \right] \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} (M_{sol} \cdot Cp_{sol} + M_c \cdot Cp_c) \frac{dT}{dt} \\ = Q_{v1} + F_e \cdot \rho_e \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega_{c,e}}{100}\right) \cdot H_{sol,e} + \frac{\omega_{c,e}}{100} \cdot H_{c,e} \right] - J_{vap} \cdot H_{v2} - F_s \cdot \rho_s \\ \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega_{c,s}}{100}\right) \cdot H_{sol,s} + \frac{\omega_{c,s}}{100} \cdot H_{c,s} \right] - H_{sol} \cdot \left(\frac{dM_{sac}}{dt} + \frac{dM_{imp}}{dt} + \frac{dM_w}{dt} \right) - H_c \cdot \frac{dM_c}{dt} \\ - 100 \cdot \frac{dH_{sol}}{dx_{sol}} \cdot \left[\left(1 - \frac{bx_{sol}}{100}\right) \cdot \left(\frac{dM_{sac}}{dt} + \frac{dM_{imp}}{dt} \right) - \frac{bx_{sol}}{100} \cdot \frac{dM_w}{dt} \right] - \left(\frac{100}{bx_{sol}} \right) \cdot 100 \\ \cdot \frac{dH_{sol}}{dpur_{sol}} \cdot \left[\left(1 - \frac{pur_{sol}}{100}\right) \cdot \frac{dM_{sac}}{dt} - \frac{pur_{sol}}{100} \cdot \frac{dM_{imp}}{dt} \right] \end{aligned} \quad (4.8)$$

Define-se densidade populacional dos cristais, n , como a dependência do número de cristais, N , com o seu tamanho, L , em determinado volume de solução e em um intervalo infinitesimal de L , de acordo com a Equação 4.9. Dessa forma, o balanço populacional, desconsiderados os fenômenos de aglomeração e quebra de cristais, é representado pela Equação 4.10, na qual G é a velocidade de crescimento linear dos cristais e D_g , a dispersão da velocidade de crescimento. Nesta equação, é assumido que a velocidade de

crescimento do cristal independe do tamanho deste, hipótese conhecida como Lei de McCabe (MERSMANN, 2001; MULLIN, 2001).

$$n(L) = \lim_{L \rightarrow 0} \frac{\Delta N}{\Delta L} = \frac{dN}{dL} \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + G \cdot \frac{\partial n}{\partial L} - D_g \frac{\partial^2 n}{\partial L^2} = 0 \quad (4.10)$$

Como a equação diferencial parcial descrita acima não tem solução analítica simples, o balanço populacional é convenientemente substituído, para fins de modelagem e simulação, por equações diferenciais ordinárias que representam os momentos de distribuição, μ_i (Equações 4.12 a 4.14). Nelas, B^0 representa a taxa de nucleação. Tais equações são obtidas a partir da Equação 4.10 e da definição do j -ésimo momento de distribuição, expressa na Equação 4.11 (MYERSON, 2002).

$$\mu_j = \int_0^{\infty} L^j \cdot n(L) \cdot dL, \quad j = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.11)$$

$$\frac{d\mu_0}{dt} = B^0 \quad (4.12)$$

$$\frac{d\mu_1}{dt} = G \cdot \mu_0 + D_g \cdot \frac{B^0}{G} \quad (4.13)$$

$$\frac{d\mu_j}{dt} = j \cdot G \cdot \mu_{j-1} + j \cdot (j-1) \cdot D_g \cdot \mu_{j-2}, \quad j = 2 \text{ a } 5 \quad (4.14)$$

A taxa de cristalização, J_{cris} , está relacionada ao terceiro momento da distribuição, conforme a Equação 4.15, na qual k_v é o fator de forma dos cristais, considerado igual a 0,75 (JESUS, 2004).

$$J_{cris} = \rho_c \cdot k_v \cdot \frac{d\mu_3}{dt} \quad (4.15)$$

Para o cálculo da velocidade de crescimento linear dos cristais, G , da dispersão da velocidade de crescimento, D_g , e da taxa de nucleação, B^0 , foram utilizadas as Equações 4.16 a 4.18, respectivamente, nas quais S é a supersaturação, V , o volume, e o subíndice *susp* representa suspensão. Os parâmetros experimentais K_g e Kd_g foram considerados iguais a 887 e $5 \cdot 10^{-5}$, respectivamente (CHORÃO, 1995; JESUS, 2004; MARCINIUK JUNIOR, 2015). Para o parâmetro experimental da taxa de nucleação, K_n , foi considerado o ajuste empírico expresso na Equação 4.19.

$$G = K_g \cdot \exp\left(-\frac{57000}{R \cdot (T + 273,15)}\right) \cdot (S - 1) \cdot \exp\left[-8 \cdot \left(1 - \frac{pur_{sol}}{100}\right)\right] \cdot \left(1 + \frac{2 \cdot V_c}{V_{susp}}\right) \quad (4.16)$$

$$D_g = Kd_g \cdot \left(2 \cdot \frac{pur_{sol}}{100} - 1\right) \cdot G \quad (4.17)$$

$$B^0 = V_{susp} \cdot K_n \cdot 2,894 \cdot 10^{12} \cdot G^{0,51} \cdot \left(\frac{\mu_3}{V_{susp}} \right)^{0,53} \quad (4.18)$$

$$K_n = 1,15 \cdot 10^{-4} \cdot \exp \left[22,10 \cdot \left(1 - \frac{pur_{sol}}{100} \right) \right] \quad (4.19)$$

Os balanços de massa nas centrífugas de massa A e B estão descritos nas Equações 4.20 a 4.27, nas quais β representa a eficiência percentual de separação sólido-líquido e η é a porcentagem mássica de cristais que permanece na corrente sólida. O subíndice m representa a corrente de massa cozida, mel , a corrente de mel, e ac , a corrente de açúcar.

Balanço de massa para sacarose (Centrífugas A e B):

$$F_m \cdot \rho_m \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,m}}{100} \right) \cdot \frac{bx_m}{100} \cdot \frac{pur_m}{100} \cdot \frac{\beta}{100} = F_{mel} \cdot \rho_{mel} \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,mel}}{100} \right) \cdot \frac{bx_{mel}}{100} \cdot \frac{pur_{mel}}{100} \quad (4.20)$$

$$F_m \cdot \rho_m \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,m}}{100} \right) \cdot \frac{bx_m}{100} \cdot \frac{pur_m}{100} \cdot \left(1 - \frac{\beta}{100} \right) = F_{ac} \cdot \rho_{ac} \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,ac}}{100} \right) \cdot \frac{bx_{ac}}{100} \cdot \frac{pur_{ac}}{100} \quad (4.21)$$

Balanço de massa para impurezas (Centrífugas A e B):

$$F_m \cdot \rho_m \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,m}}{100} \right) \cdot \frac{bx_m}{100} \cdot \left(1 - \frac{pur_m}{100} \right) \cdot \frac{\beta}{100} = F_{mel} \cdot \rho_{mel} \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,mel}}{100} \right) \cdot \frac{bx_{mel}}{100} \cdot \left(1 - \frac{pur_{mel}}{100} \right) \quad (4.22)$$

$$F_m \cdot \rho_m \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,m}}{100} \right) \cdot \frac{bx_m}{100} \cdot \left(1 - \frac{pur_m}{100} \right) \cdot \left(1 - \frac{\beta}{100} \right) = F_{ac} \cdot \rho_{ac} \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,ac}}{100} \right) \cdot \frac{bx_{ac}}{100} \cdot \left(1 - \frac{pur_{ac}}{100} \right) \quad (4.23)$$

Balanço de massa para água (Centrífugas A e B):

$$F_m \cdot \rho_m \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,m}}{100} \right) \cdot \left(1 - \frac{bx_m}{100} \right) \cdot \frac{\beta}{100} + F_w \cdot \rho_w = F_{mel} \cdot \rho_{mel} \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,mel}}{100} \right) \cdot \left(1 - \frac{bx_{mel}}{100} \right) \quad (4.24)$$

$$F_m \cdot \rho_m \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,m}}{100} \right) \cdot \left(1 - \frac{bx_m}{100} \right) \cdot \left(1 - \frac{\beta}{100} \right) = F_{ac} \cdot \rho_{ac} \cdot \left(1 - \frac{\omega_{c,ac}}{100} \right) \cdot \left(1 - \frac{bx_{ac}}{100} \right) \quad (4.25)$$

Balanço de massa para cristais (Centrífugas A e B):

$$F_m \cdot \rho_m \cdot \frac{\omega_{c,m}}{100} \cdot \left(1 - \frac{\eta}{100} \right) = F_{mel} \cdot \rho_{mel} \cdot \frac{\omega_{c,mel}}{100} \quad (4.26)$$

$$F_m \cdot \rho_m \cdot \frac{\omega_{c,m}}{100} \cdot \frac{\eta}{100} = F_{ac} \cdot \rho_{ac} \cdot \frac{\omega_{c,ac}}{100} \quad (4.27)$$

O balanço de energia nas centrífugas é descrito pela Equação 4.28, à qual é imposta a condição expressa na Equação 4.29. A vazão volumétrica de água, F_w , que aparece nas Equações 4.24 e 4.28, corresponde à vazão de água utilizada para lavagem dos cristais nas centrífugas.

$$\begin{aligned} F_m \cdot \rho_m \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega_{c,m}}{100} \right) \cdot H_{sol,m} + \frac{\omega_{c,m}}{100} \cdot H_{c,m} \right] + F_w \cdot \rho_w \cdot H_w \\ = F_{ac} \cdot \rho_{ac} \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega_{c,ac}}{100} \right) \cdot H_{sol,ac} + \frac{\omega_{c,ac}}{100} \cdot H_{c,ac} \right] + F_{mel} \cdot \rho_{mel} \\ \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega_{c,mel}}{100} \right) \cdot H_{sol,mel} + \frac{\omega_{c,mel}}{100} \cdot H_{c,mel} \right] \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$T_{ac} = T_{mel} \quad (4.29)$$

As demais equações do modelo, bem como as correlações para propriedades físicas, encontram-se no Apêndice B. O Apêndice C apresenta o código completo do modelo da simulação base utilizado no *software* EMSO.

4.3 Resultados e discussão

As Figuras 4.4 a 4.10 apresentam, respectivamente, as seguintes variáveis do cozimento de massa B em função do tempo, resultantes da simulação base: volume de solução/suspensão (m^3), temperatura ($^{\circ}\text{C}$), massa de cristais (t), porcentagem mássica de cristais (%), supersaturação e supersaturação crítica, brix e pureza (%) e tamanho médio dos cristais (mm). As linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento da massa B: enchimento da calandra do cozedor de granagem (20 min), concentração (5 min), granagem (5 min), enchimento (58 min), corte 1 (90 min), corte 2 (105 min), aperto (28 min) e descarregamento (20 min). O tempo total de cozimento da massa B (do enchimento da calandra até o aperto da massa) foi de 311 minutos, ou 5,19 horas.

Figura 4.4 – Volume da massa B em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa B)

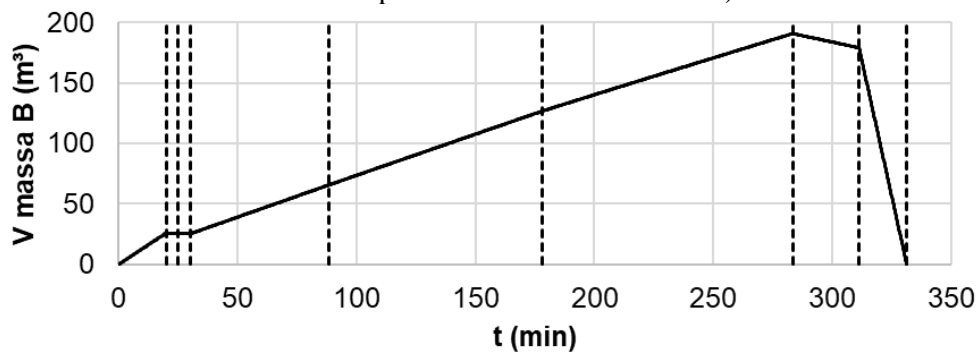


Figura 4.5 – Temperatura da massa B em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa B)

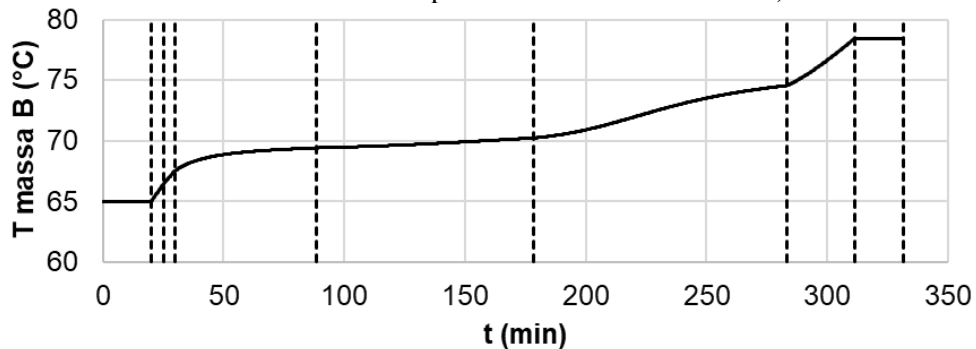


Figura 4.6 – Massa de cristais na massa B em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa B)

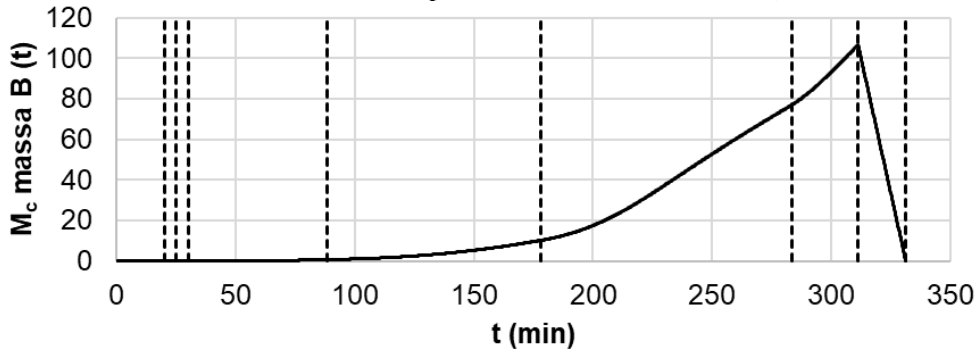


Figura 4.7 – Porcentagem mássica de cristais na massa B em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa B)

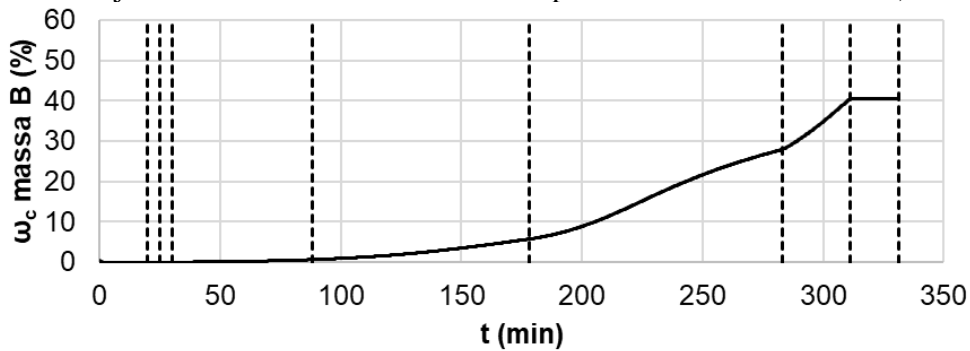


Figura 4.8 – Supersaturação e supersaturação crítica da massa B em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa B)

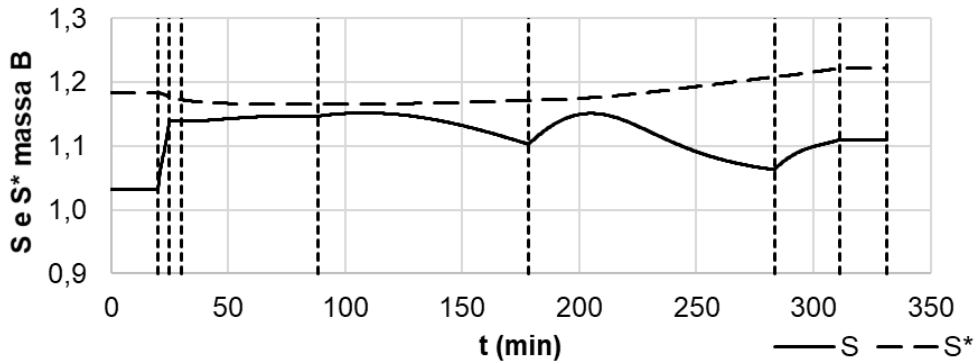


Figura 4.9 – Brix e pureza da massa B em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa B)

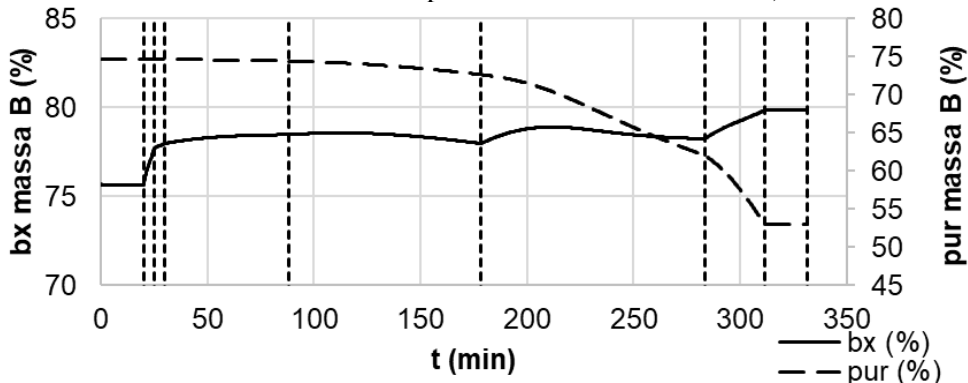
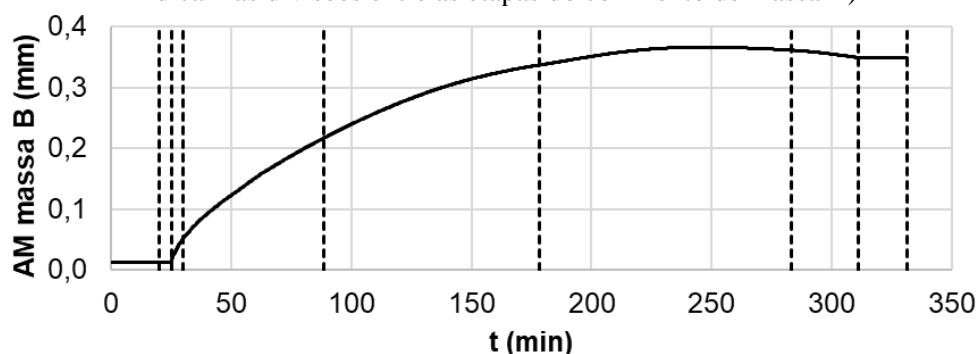
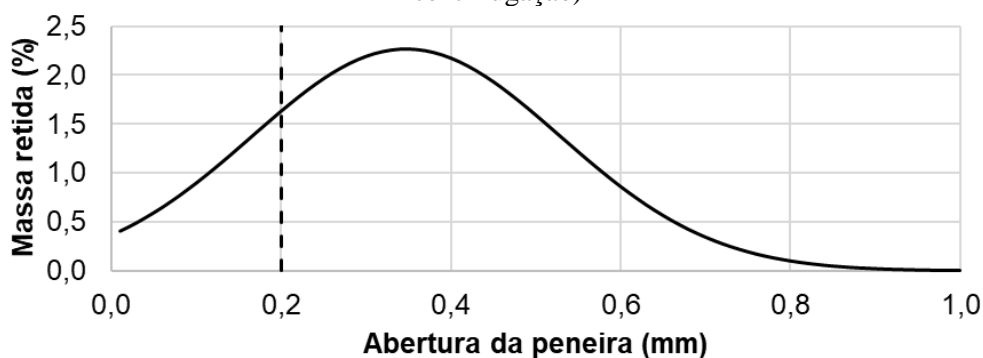


Figura 4.10 – Tamanho médio dos cristais da massa B em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa B)



Assumindo que os tamanhos dos cristais da massa B ao final do cozimento seguem uma distribuição normal de probabilidade, e a partir dos resultados da simulação para o tamanho médio e o coeficiente de variação, foi construída a distribuição mostrada na Figura 4.11. A eliminação dos cristais com tamanho menor que 0,20 mm nas centrífugas, representada pela linha vertical tracejada, resultou numa perda de 17,7% da massa de cristais presentes na massa B para o mel final, e num aumento do tamanho médio dos cristais de 0,347 mm para 0,411 mm.

Figura 4.11 – Distribuição de tamanhos dos cristais da massa B, considerando uma distribuição normal de probabilidade (linha vertical tracejada representa a eliminação de cristais finos na etapa de centrifugação)



Durante a etapa de enchimento da calandra com mel A, não houve fornecimento de vapor ao cozedor. Dessa forma, o volume de solução no interior do cozedor aumentou e a temperatura, o brix e a pureza permaneceram constantes. Na etapa de concentração, a alimentação de mel A foi interrompida, e iniciou-se o fornecimento de vapor, e, conseqüentemente, a evaporação da água presente na solução. Assim, houve uma ligeira diminuição do volume da solução, elevação da temperatura, aumento do coeficiente de supersaturação até próximo ao limite crítico e elevação do brix. A pureza da solução permaneceu constante na etapa de concentração, já que a eliminação de água da solução fez

com que a porcentagem mássica de sólidos dissolvidos e a porcentagem mássica de sacarose em solução aumentassem na mesma proporção.

Na etapa de granagem, teve início o crescimento das sementes. Nas etapas de enchimento, corte 1 e corte 2, a vazão de água evaporada foi menor que a vazão de entrada de mel A, fazendo com que o volume ocupado pela suspensão aumentasse gradativamente até o limite máximo de 195 m³. A massa de cristais aumentou durante essas etapas, bem como o tamanho médio dos cristais.

O coeficiente de supersaturação manteve-se dentro dos limites da zona metaestável, entre 1,0 e o limite crítico, durante todo o cozimento. O brix permaneceu próximo a 78%, pois a alimentação de mel A e a cristalização da sacarose eram compensadas pela evaporação da água. A pureza diminuiu gradativamente, devido à diminuição progressiva de sacarose em solução, já que esta foi, aos poucos, sendo incorporada aos cristais. A diminuição da pureza fez com que a temperatura do cozimento aumentasse, acompanhando o aumento da elevação do ponto de ebulição da solução (Equação B.7). Durante a etapa corte 2, o tamanho médio dos cristais estabilizou, devido à diminuição da velocidade de crescimento. Tal fato ocorreu devido à queda de pureza da solução.

Durante a etapa de aperto, interrompeu-se novamente a alimentação de mel A, fazendo com que ocorresse nova contração no volume da massa e aumento do brix. A cristalização da sacarose continuou acontecendo, o que pode ser comprovado pelo aumento da massa de cristais e pela queda na pureza da solução. Durante o descarregamento da massa, a cristalização foi interrompida. O volume de suspensão e a massa de cristais foram as únicas variáveis que sofreram alterações nessa etapa.

Nas Figuras 4.12 a 4.18, podem ser vistas as mesmas variáveis para o cozimento da massa A, cujas etapas consideradas na simulação base foram: enchimento da calandra (20 min), concentração (10 min), enchimento (90 min), corte 1 (138 minutos), aperto (15 min) e descarregamento (20 min). O tempo total de cozimento da massa A (do enchimento da calandra até o aperto da massa) foi de 273 minutos, ou 4,56 horas. A simulação do cozimento da massa A teve início após 45 minutos do início da simulação do cozimento da massa B, de forma a garantir que houvesse volume suficiente de magma no tanque pulmão para enchimento da calandra.

Figura 4.12 – Volume da massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A)

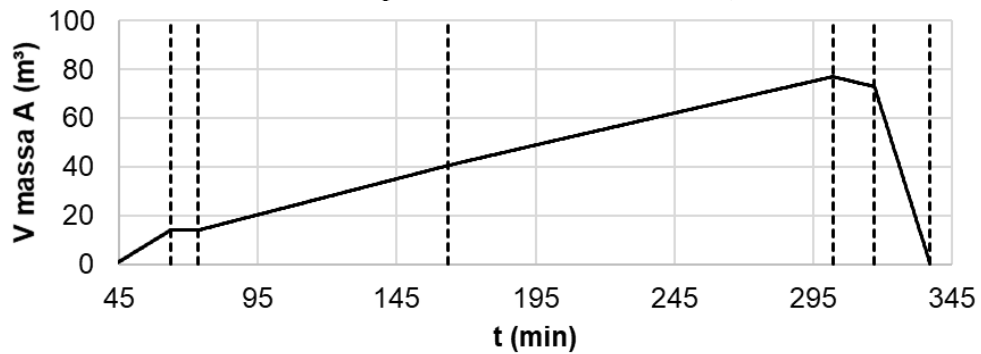


Figura 4.13 – Temperatura da massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A)

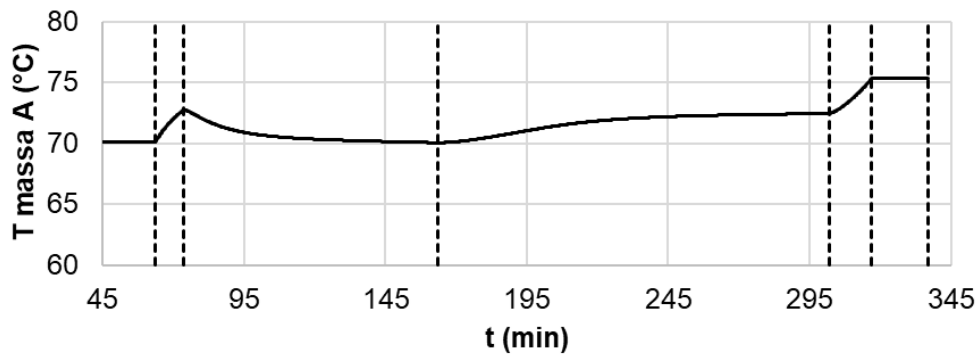


Figura 4.14 – Massa de cristais na massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A)

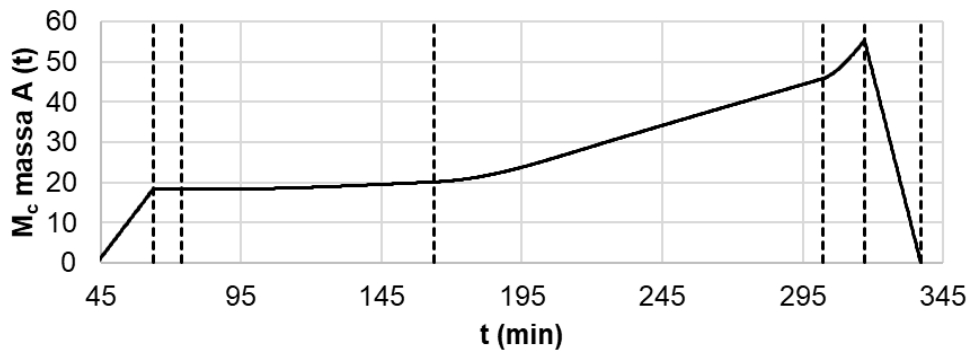


Figura 4.15 – Porcentagem mássica de cristais na massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A)

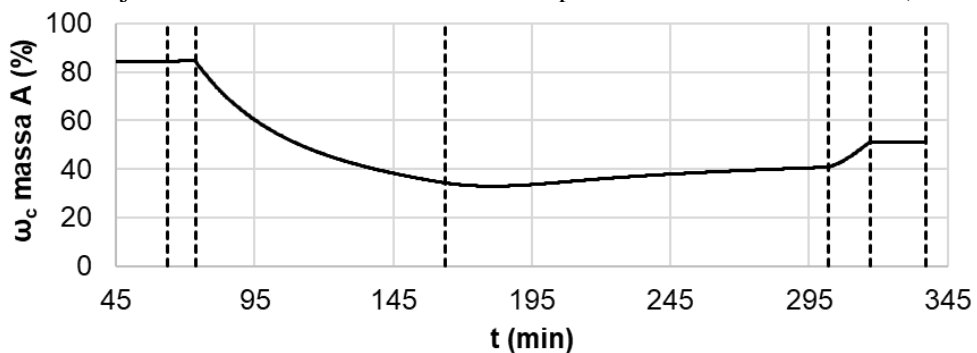


Figura 4.16 – Supersaturação e supersaturação crítica da massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A)

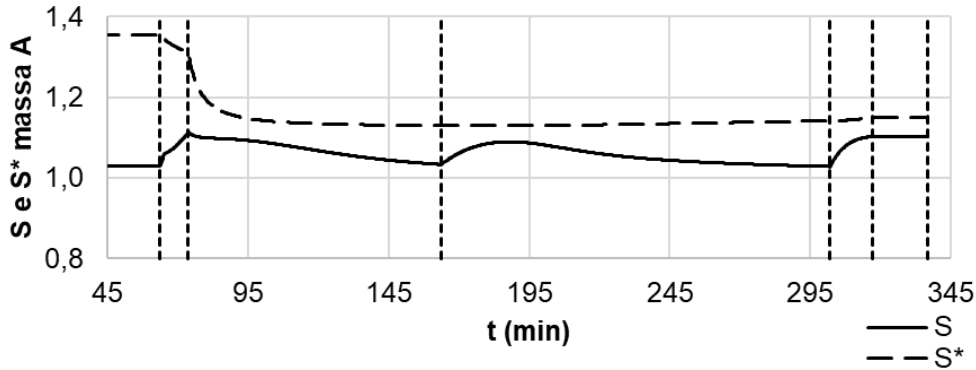


Figura 4.17 – Brix e pureza da massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A)

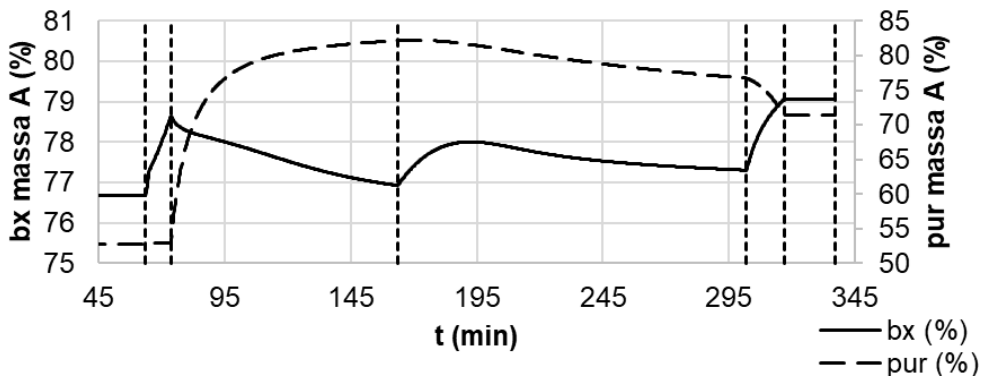
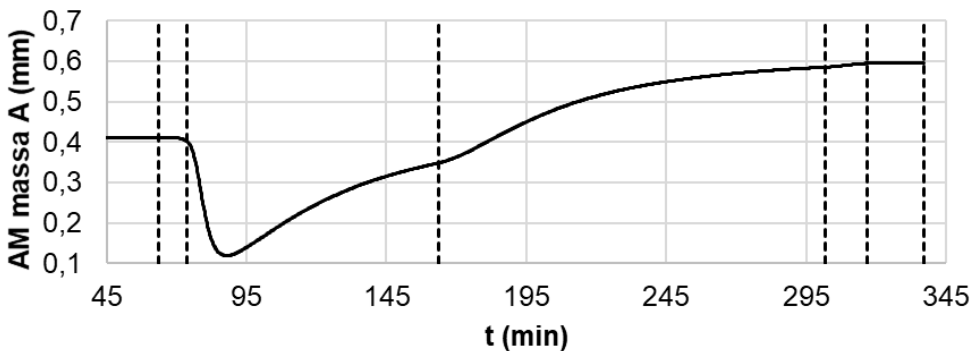
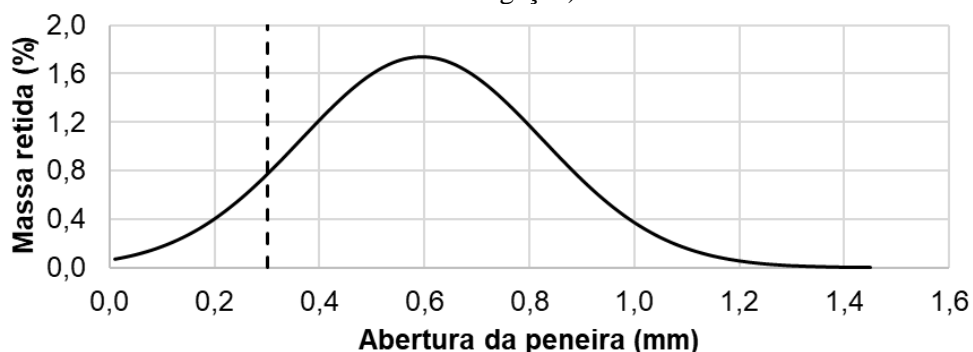


Figura 4.18 – Tamanho médio dos cristais da massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A)



A curva mostrada na Figura 4.19 foi construída a partir do tamanho médio e coeficiente de variação resultantes da simulação, e da consideração de que os tamanhos dos cristais da massa A ao final do cozimento seguem uma distribuição normal de probabilidade. A eliminação dos cristais com tamanho inferior a 0,30 mm nas centrífugas, representada pela linha vertical tracejada, resultou numa perda de 9,2% da massa de cristais presentes na massa A para o mel de primeira, e num aumento do tamanho médio dos cristais de 0,595 mm para 0,639 mm.

Figura 4.19 – Distribuição de tamanhos dos cristais da massa A, considerando uma distribuição normal de probabilidade (linha vertical tracejada representa a eliminação de cristais finos na etapa de centrifugação)

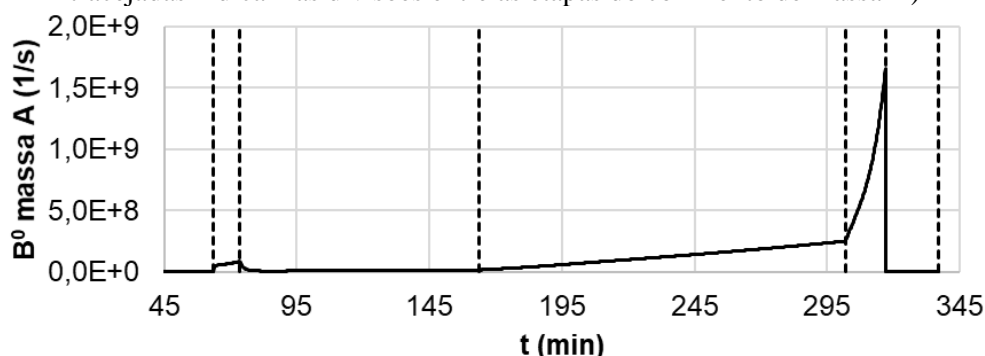


Diferentemente do cozimento B, a pureza da solução durante o enchimento com xarope flotado aumentou, já que a pureza deste material é maior que a pureza do magma utilizado para o enchimento da calandra do cozedor A. O brix diminuiu e, assim, durante esta etapa, a temperatura do cozimento diminuiu, acompanhando a queda na elevação do ponto de ebulição da solução. A porcentagem de cristais na massa também diminuiu, visto que não havia cristais no xarope flotado que alimentava o cozedor.

O tamanho médio dos cristais sofreu uma queda entre o final da etapa de concentração e o início do enchimento com xarope flotado, devido ao fenômeno de nucleação secundária. O brix atingiu um valor máximo ao final da concentração, o que aumentou a supersaturação e, conseqüentemente, a taxa de nucleação secundária, como pode ser visto na Figura 4.20. Este fenômeno está relacionado ao aparecimento de novos núcleos induzido pelos cristais em suspensão já existentes, e ocorre a níveis de supersaturação mais baixos que a nucleação primária, ou espontânea (MULLIN, 2001).

A Figura 4.20 mostra, também, que a taxa de nucleação secundária aumentou ao final da etapa de corte 1 e na etapa de aperto, de forma ainda mais expressiva que na etapa de concentração. Porém, nas etapas finais do processo de cozimento, além da massa de cristais ser significativamente maior que na etapa de concentração (Figura 4.14), a velocidade de crescimento linear dos cristais também foi maior: em média, $9,72 \cdot 10^{-9}$ m/s na fase de concentração, $3,73 \cdot 10^{-8}$ m/s na fase de corte 1, e $4,45 \cdot 10^{-8}$ m/s na fase de aperto. A massa maior de cristais e a maior velocidade de crescimento nas fases de corte 1 e aperto impediram que houvesse nova queda no tamanho médio dos cristais.

Figura 4.20 – Taxa de nucleação secundária da massa A em função do tempo (linhas verticais tracejadas indicam as divisões entre as etapas do cozimento de massa A)



A partir do corte 1, as variáveis seguiram as mesmas tendências observadas no cozimento B. O aumento da zona metaestável ao final do processo não foi tão pronunciado como no cozimento B. Isto ocorreu porque a queda de pureza na massa A foi menos intensa que na massa B. A supersaturação crítica, limite superior da zona metaestável, é função do quadrado da pureza (Equação B.15).

A Tabela 4.3 apresenta a comparação dos resultados da simulação base com as especificações de cada variável na usina em estudo, e com as médias reais no período estudado, entre 01 de junho e 31 de outubro de 2015.

Tabela 4.3 – Comparação dos resultados da simulação base com as especificações de cada variável e com sua média real no período estudado

	Simulação base	Especificação	Média real (01/06 a 31/10/15)
Tempo do cozimento B (h)	5,19	4,5 - 6,0	-
Porcentagem mássica de cristais na massa B (%)	40,54	40-45	41,92
Pureza do magma (%)	94,15	-	93,13
Pureza do mel final (%)	59,58	< 65	59,79
Tempo do cozimento A (h)	4,56	4,0 - 5,0	-
Porcentagem mássica de cristais na massa A (%)	51,13	50-55	45,19
Pol do açúcar (%)	97,82	> 99,60	99,80
Tamanho médio dos cristais após centrifugação (mm)	0,64	0,60 - 0,70	0,65
Coefficiente de variação dos cristais após centrifugação (%)	30,58	quanto menor melhor	25,36
Brix do mel A (%)	75,67	-	75,71
Pureza do mel A (%)	74,65	75-80	74,59

Pode-se verificar que os resultados da simulação se aproximaram satisfatoriamente dos valores esperados. As variáveis relacionadas ao açúcar produzido (pol, tamanho médio e coeficiente de variação) na simulação referem-se ao açúcar úmido, logo após

a saída das centrífugas, enquanto as especificações e as médias reais dessas variáveis dizem respeito ao açúcar após posterior passagem pelos secadores, operação que não foi considerada na simulação. Sabendo-se que na etapa de secagem acontece a separação de finos, é razoável que o tamanho médio real seja ligeiramente maior que o resultado da simulação, e que o coeficiente de variação seja menor. O pol do açúcar aumenta durante a secagem, pois há eliminação do residual de água presente no açúcar, fazendo com que sua umidade, que na saída das centrífugas é de 1% a 2%, seja reduzida para valores em torno de 0,03% (HUGOT, 1986; CHEN; CHOU, 1993).

Na Tabela 4.4, os resultados do cozimento A obtidos na simulação base são comparados com os resultados das simulações 1 e 2, nas quais a pureza do xarope flotado foi alterada para o menor e o maior valores do período estudado, respectivamente.

Tabela 4.4 – Comparação entre os resultados da simulação base e das simulações nas quais a pureza do xarope flotado foi alterada

	Simulação base	Simulação 1	Simulação 2
Pureza do xarope flotado (%)	85,92	81,06	87,26
Tempo do cozimento A (h)	4,56	4,56	4,56
Porcentagem mássica de cristais na massa A (%)	51,13	49,44	51,57
Tamanho médio antes da centrifugação (mm)	0,59	0,46	0,64
Coefficiente de variação antes da centrifugação (%)	38,81	44,06	37,13
Vazão de entrada de massa na centrífuga A (m³/h)	13,00	13,00	13,00
Vazão de saída de açúcar na centrífuga A (m³/h)	6,02	5,18	6,19
Pol do açúcar (%)	97,82	97,54	97,98
Tamanho médio após centrifugação (mm)	0,64	0,53	0,67
Coefficiente de variação após centrifugação (%)	30,58	28,66	30,53
Vazão de saída de mel na centrífuga A (m³/h)	7,68	8,52	7,50
Brix do mel A (%)	75,67	78,21	75,06
Pureza do mel A (%)	74,65	71,50	75,98
Consumo total de xarope no cozimento A (m³)	104	104	104
Consumo total de vapor no cozimento A (t)	47	47	47

Nota-se que a porcentagem mássica de cristais na massa não sofreu alteração significativa quando a pureza do xarope foi alterada. Porém, a distribuição de tamanho dos cristais se modificou, com diminuição do tamanho médio na simulação 1 para 0,53 mm após a centrifugação, caracterizando produção de açúcar fora de especificação. O tamanho médio na simulação 2 foi maior, porém permaneceu dentro dos limites desejados (0,60 – 0,70 mm).

Devido à alteração na distribuição de tamanho dos cristais, a separação dos cristais menores que 0,30 mm na centrífuga, que na simulação base havia representado uma perda de 9,2% da massa de cristais originalmente contida na massa, resultou numa perda de

20,2% na simulação 1 e 7,1% na simulação 2. Consequentemente, houve prejuízo na produção de açúcar da simulação 1 comparada à simulação base, com vazão de açúcar na saída das centrífugas 14,0% menor. Na simulação 2, houve aumento de 2,8% na produção de açúcar. Não houve alteração nos consumos de xarope e vapor das simulações 1 e 2 em relação à simulação base. Observou-se ainda que, na simulação 1, com pureza do xarope menor, houve uma diminuição da pureza do mel, e um aumento do seu brix, indicando que as impurezas presentes na corrente inicial saíram dissolvidas na corrente de mel. O contrário ocorreu na simulação 2.

Com o objetivo de tentar alcançar a especificação desejada do açúcar, a simulação 1 foi repetida, modificando-se os tempos e vazões de xarope e vapor em cada etapa do processo. A estratégia utilizada foi aumentar o tempo de cozimento, de forma semelhante ao que seria feito na prática do cozimento industrial. Entretanto, a distribuição de tamanho dos cristais não se alterou. A Tabela 4.5 apresenta os resultados de uma dessas simulações (Simulação 1'), na qual se nota que a produção de açúcar permaneceu baixa, pois continuou ocorrendo grande perda de finos na centrifugação. Comparando com a simulação 1, a produção foi ligeiramente maior, devido ao ligeiro aumento da porcentagem mássica de cristais na massa.

Tabela 4.5 – Comparação entre os resultados da simulação base e das simulações com pureza do xarope flotado menor

	Simulação base	Simulação 1	Simulação 1'
Pureza do xarope flotado (%)	85,92	81,06	81,06
Tempo do cozimento A (h)	4,56	4,56	4,64
Porcentagem mássica de cristais na massa A (%)	51,13	49,44	51,74
Tamanho médio antes da centrifugação (mm)	0,59	0,46	0,45
Coefficiente de variação antes da centrifugação (%)	38,81	44,06	44,83
Vazão de entrada de massa na centrífuga A (m³/h)	13,00	13,00	13,00
Vazão de saída de açúcar na centrífuga A (m³/h)	6,02	5,18	5,38
Pol do açúcar (%)	97,82	97,54	97,19
Tamanho médio após centrifugação (mm)	0,64	0,53	0,53
Coefficiente de variação após centrifugação (%)	30,58	28,66	28,87
Vazão de saída de mel na centrífuga A (m³/h)	7,68	8,52	8,32
Brix do mel A (%)	75,67	78,21	78,37
Pureza do mel A (%)	74,65	71,50	70,69
Consumo total de xarope no cozimento A (m³)	104	104	104
Consumo total de vapor no cozimento A (t)	47	47	47

Qualquer impureza, em geral, tende a reduzir a velocidade de crescimento dos cristais, apesar de esta depender não somente da concentração de impurezas, mas também de sua constituição. Mesmo em concentrações baixas, as impurezas podem afetar de maneira significativa a velocidade de crescimento, a forma e a distribuição de tamanho dos cristais, pois

alteram as propriedades da solução e adsorvem seletivamente em diferentes faces do cristal (CHEN; CHOU, 1993; CHORÃO, 1995; MULLIN, 2001).

Zaorska (1968) e Zagrodzki e Zaorska (1974) obtiveram, a partir de experimentos com soluções industriais impuras, uma relação entre a pureza da solução de sacarose e a redução da velocidade de crescimento dos cristais. Tal relação, utilizada nos trabalhos de Chorão (1995), Georgieva; Meireles; Feyer de Azevedo (2003), Jesus (2004) e Marciniuk Junior (2015), foi também considerada neste trabalho, por meio da multiplicação do termo exponencial referente à pureza da solução na equação da velocidade de crescimento linear dos cristais (Equação 4.16).

Nos experimentos de cristalização por evaporação a vácuo realizados por Merheb (2014), o aumento da contaminação por dextrana levou à diminuição da velocidade de crescimento dos cristais e contribuiu para a diminuição de seu tamanho médio, apesar de não interferir na porcentagem mássica de cristais da massa.

Enquanto, na simulação base, a taxa média de cristalização durante o cozimento foi de $8,76 \cdot 10^3$ kg/h, na simulação com pureza do xarope menor, essa taxa caiu para $8,37 \cdot 10^3$ kg/h, e, na simulação com pureza do xarope maior, a taxa aumentou para $8,88 \cdot 10^3$ kg/h. A velocidade de crescimento linear, que na simulação base havia apresentado média de $3,90 \cdot 10^{-8}$ m/s, caiu para $3,32 \cdot 10^{-8}$ m/s na simulação com pureza menor, e aumentou para $4,08 \cdot 10^{-8}$ m/s na simulação com pureza maior.

Os resultados das simulações do cozimento A nas quais o brix do xarope foi alterado para o menor e o maior valor do período estudado podem ser vistos na Tabela 4.6. Nas simulações 3 e 4, não foram alterados os tempos de cada etapa, apenas foram ajustadas as vazões de xarope e vapor para que a supersaturação permanecesse dentro dos limites da zona metaestável, e para que os volumes máximos de cada etapa fossem respeitados. Já nas simulações 3' e 4', os tempos das etapas foram ajustados para tentar aproximar as variáveis das especificações desejadas.

Tais alterações não exerceram influência sobre a distribuição de tamanho dos cristais produzidos, porém alteraram consideravelmente a porcentagem mássica de cristais na massa. Dessa forma, o aumento da produção de açúcar da simulação 3 em relação à simulação base, e sua diminuição na simulação 4, não estiveram relacionados à perda de cristais finos na centrifugação, como ocorreu no caso das variações da pureza do xarope flotado, mas sim à maior ou menor concentração de cristais na massa.

Tabela 4.6 – Comparação entre os resultados da simulação base e as simulações nas quais o brix do xarope flotado foi alterado

	Simulação base	Simulação 3	Simulação 3'	Simulação 4	Simulação 4'
Brix do xarope flotado (%)	58,27	50,56	50,56	64,60	64,60
Tempo do cozimento A (h)	4,56	4,56	4,49	4,56	4,60
Porcentagem mássica de cristais na massa A (%)	51,13	55,75	51,33	48,49	51,28
Tamanho médio antes da centrifugação (mm)	0,59	0,62	0,62	0,61	0,62
Coefficiente de variação antes da centrifugação (%)	38,81	40,15	38,97	37,43	38,05
Vazão de entrada de massa na centrífuga A (m³/h)	13,00	13,00	13,00	13,00	13,00
Vazão de saída de açúcar na centrífuga A (m³/h)	6,02	6,56	6,09	5,80	6,11
Pol do açúcar (%)	97,82	98,10	97,86	97,71	97,88
Tamanho médio após centrifugação (mm)	0,64	0,66	0,66	0,65	0,66
Coefficiente de variação após centrifugação (%)	30,58	31,53	31,04	30,31	30,62
Vazão de saída de mel na centrífuga A (m³/h)	7,68	7,14	7,61	7,90	7,59
Brix do mel A (%)	75,67	76,13	75,76	75,75	75,89
Pureza do mel A (%)	74,65	72,39	74,39	75,52	74,31
Consumo total de xarope no cozimento A (m³)	104	123	123	91	91
Consumo total de vapor no cozimento A (t)	47	69	68	33	34

Conseqüentemente, a diminuição do tempo de aperto na simulação 3' em quatro minutos, e o aumento do tempo de aperto na simulação 4' em 2,5 minutos foram suficientes para que a concentração mássica de cristais na massa se igualasse à simulação base. Dessa forma, a produção de açúcar alcançou valores próximos à produção resultante da simulação base.

A utilização de xarope mais diluído para o cozimento resultou num aumento de 18,3% no consumo de xarope e em aumentos no consumo de vapor de 46,8% na simulação 3, e 44,7% na simulação 3'. Nas simulações 4 e 4', com utilização de xarope mais concentrado, houve diminuição no consumo de xarope em 12,5% e nos consumos de vapor em 29,8% e 27,7%, respectivamente.

No processo industrial, a oscilação do brix do xarope é reflexo das variações das vazões de caldo e vapor na etapa de evaporação. O período estudado foi marcado por grande instabilidade no processamento de cana e na oferta de vapor, devido a problemas mecânicos

apresentados pelas moendas e a desarmes frequentes do gerador de energia elétrica. O setor de fabricação de açúcar representa grande parcela do consumo de vapor vegetal das usinas (SHAMIM et al., 2016), e, dessa forma, as variações citadas promovem grande desequilíbrio em outras operações que também utilizam vapor vegetal, como o aquecimento do caldo, no setor de tratamento, e a destilação do etanol.

A Tabela 4.7 compara os resultados da simulação base com os da simulação 5, na qual a pressão do vapor vegetal utilizada nos cozedores de massa A e B foi substituída pela curva senoidal, de forma a simular a variação de pressão que ocorre no processo industrial.

Tabela 4.7 – Comparação entre os resultados da simulação base e a simulação 5, na qual a pressão do vapor vegetal foi modificada

	Simulação base	Simulação 5
Tempo do cozimento B (h)	5,19	5,19
Porcentagem mássica de cristais na massa B (%)	40,54	40,75
Pureza do magma (%)	94,15	94,15
Pureza do mel B (%)	59,58	59,58
Consumo de vapor no cozedor B (t)	47	47
Tempo do cozimento A (h)	4,56	4,56
Porcentagem mássica de cristais na massa A (%)	51,13	51,77
Vazão de entrada de massa na centrífuga A (m³/h)	13,00	13,00
Vazão de saída de açúcar na centrífuga A (m³/h)	6,02	6,02
Pol do açúcar (%)	97,82	97,82
Tamanho médio após centrifugação (mm)	0,64	0,64
Coefficiente de variação após centrifugação (%)	30,58	30,69
Vazão de saída de mel na centrífuga A (m³/h)	7,68	7,68
Brix do mel A (%)	75,67	75,67
Pureza do mel A (%)	74,65	74,65
Consumo total de xarope no cozimento A (m³)	104	104
Consumo total de vapor no cozimento A (t)	47	47

Verificou-se, neste caso, que nenhuma variável sofreu alteração significativa. Na simulação 5, a pressão do vapor vegetal variou dentro da faixa de 1,42 a 1,70 bar, fazendo com que sua entalpia de vaporização variasse de 2227,4 kJ/kg a 2211,9 kJ/kg, respectivamente. Ou seja, houve uma variação de, no máximo, 0,7% em relação à entalpia de vaporização do vapor na simulação base, o que não foi suficiente para que houvesse alguma alteração considerável nos resultados da simulação.

Na prática industrial, o que realmente impacta o processo de cozimento é a vazão de vapor disponível para essa operação. Como, geralmente, não existem medidores de vazão nas linhas de vapor, e sim manômetros, a queda na vazão é percebida pela queda de pressão na linha.

As vazões de vapor, na simulação base, foram mantidas constantes em cada etapa do cozimento, como porcentagens da vazão máxima possível, igual a 8,8 kg/s, de forma que a supersaturação se mantivesse dentro dos limites desejados. Na simulação 6, foram impostas as máximas variações senoidais possíveis às vazões máximas de vapor utilizadas nos cozimentos de massa A e B, separadamente, de forma que os limites da supersaturação continuassem sendo respeitados. Para o cozimento de massa A, a amplitude máxima da função senoidal foi de 0,5 kg/s, e para o cozimento de massa B, 1,0 kg/s. Em cada etapa do cozimento, foram mantidas as mesmas porcentagens da vazão máxima utilizadas na simulação base. O período das curvas senoidais foi mantido em 15 minutos, como o período da variação da pressão do vapor vegetal (Simulação 5), de forma a simular as variações observadas no processo real da usina.

As Figuras 4.21 e 4.22 apresentam as variações senoidais aplicadas às vazões máximas de vapor vegetal nos cozimentos A e B, respectivamente. Em ambas, foi mantida a vazão máxima possível de 8,8 kg/s, correspondente à válvula de vapor totalmente aberta.

Figura 4.21 – Variação da vazão máxima de vapor vegetal no cozimento de massa A

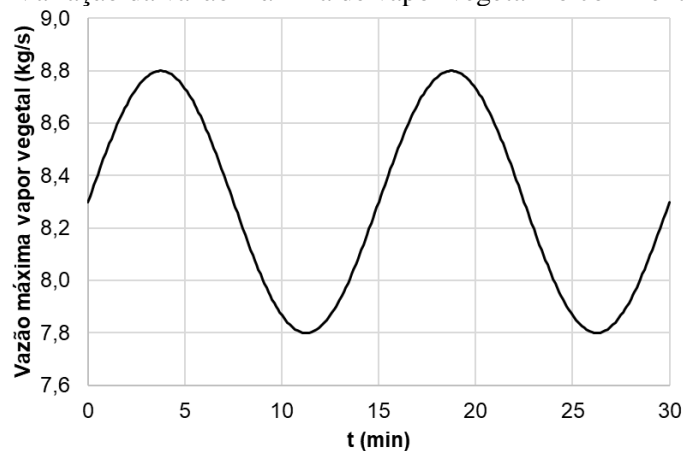
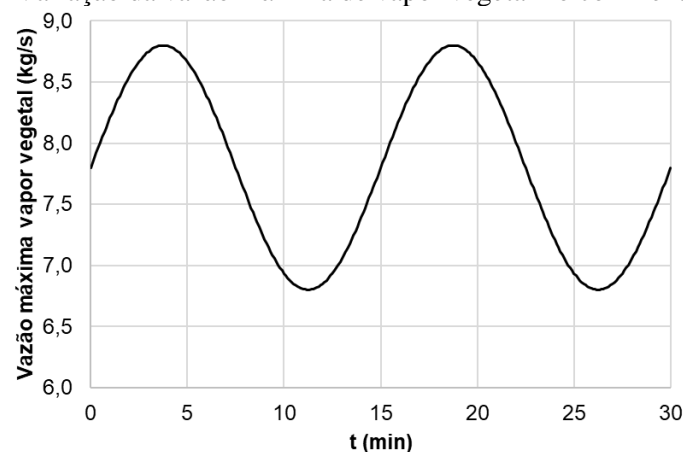


Figura 4.22 – Variação da vazão máxima de vapor vegetal no cozimento de massa B



A Tabela 4.8 apresenta os resultados da simulação 6, juntamente com os resultados da simulação base. A variação de vazão do vapor vegetal prejudicou as porcentagens mássicas de cristais nas massas A e B. No cozimento de massa B, isso levou a uma diminuição da pureza do magma e a um aumento da pureza do mel B. Na massa A, houve diminuição da vazão de açúcar produzido, e aumento da vazão e da pureza do mel A. Não houve alteração significativa na distribuição de tamanho dos cristais.

Tabela 4.8 – Comparação entre os resultados da simulação base e as simulações nas quais foi imposta variação senoidal à vazão de vapor vegetal

	Simulação base	Simulação 6
Tempo do cozimento B (h)	5,19	5,19
Porcentagem mássica de cristais na massa B (%)	40,54	34,22
Pureza do magma (%)	94,15	93,54
Pureza do mel B (%)	59,58	62,31
Tempo do cozimento A (h)	4,56	4,56
Porcentagem mássica de cristais na massa A (%)	51,13	40,97
Vazão de entrada de massa na centrífuga A (m³/h)	13,00	13,00
Vazão de saída de açúcar na centrífuga A (m³/h)	6,02	5,01
Pol do açúcar (%)	97,82	97,18
Tamanho médio após centrifugação (mm)	0,64	0,66
Coefficiente de variação após centrifugação (%)	30,58	29,70
Vazão de saída de mel na centrífuga A (m³/h)	7,68	8,68
Brix do mel A (%)	75,67	75,24
Pureza do mel A (%)	74,65	78,22
Consumo total de xarope no cozimento A (m³)	104	104

Na usina que foi utilizada como base para esse estudo, havia seis operadores efetivos por turno no setor de cozimento do açúcar. Visto que havia três turnos de produção, e que o custo médio mensal de cada operador de cozimento para a usina, considerando, inclusive, os encargos trabalhistas, era de, aproximadamente, R\$ 3 mil, o gasto anual da empresa com mão-de-obra, nesse setor, era algo em torno de R\$ 650 mil. Considerando que o trabalho de modelagem e simulação do cozimento auxiliou o desenvolvimento da automatização deste setor, e que, juntamente com o desenvolvimento de sensores mais confiáveis para os cozedores, esses esforços se traduzam em redução da força operacional pela metade, a usina deixaria de gastar R\$ 325 mil por ano em pagamento de mão-de-obra.

Se for levado em consideração que a automatização levaria a um controle efetivo das variáveis do processo de cozimento, a maior uniformidade de operação, e, conseqüentemente, à produção de açúcar de melhor qualidade durante períodos maiores da safra, os ganhos seriam ainda maiores.

4.4 Conclusões

O modelo utilizado para a simulação da cristalização da sacarose, que englobou os balanços de massa, energia e populacional, e considerou os mecanismos de nucleação e dispersão da velocidade de crescimento, mostrou-se adequado para representar o processo de cozimento em duas massas com reciclo do mel de primeira, adotado na maioria das usinas brasileiras. Os resultados da simulação, incluindo a distribuição de tamanho dos cristais, aproximaram-se satisfatoriamente dos dados da usina cujo processo foi representado. A comparação entre os resultados simulados e os dados reais do processo se limitou aos resultados finais, dada a falta de informações das variáveis no decorrer do cozimento.

A pureza do xarope utilizado como matéria-prima para o cozimento mostrou ter grande influência sobre a distribuição de tamanho dos cristais e, conseqüentemente, sobre a perda de finos na etapa de centrifugação, impactando consideravelmente a produção de açúcar. As simulações do cozimento utilizando xarope com baixa pureza resultaram em açúcar com tamanho médio abaixo da especificação desejada, independentemente das tentativas de alteração dos tempos e vazões de xarope e vapor nas etapas do processo.

O brix do xarope, por sua vez, não apresentou ter grande impacto sobre a distribuição de tamanho dos cristais, mas sim sobre o consumo de vapor durante a cristalização e a porcentagem mássica de cristais da massa produzida. Esta foi facilmente corrigida com pequenas alterações nos tempos da etapa de aperto, normalizando, dessa forma, a produção de açúcar. Porém, as variações no consumo de vapor vegetal no cozimento causam prejuízos às demais operações da usina que utilizam o mesmo vapor, como o aquecimento do caldo na etapa de tratamento e a destilação do etanol.

A variação da pressão do vapor vegetal não representou, por si só, alterações nas variáveis resultantes da simulação. Na verdade, variações na vazão de vapor foram as responsáveis por afetar a supersaturação da massa, e, conseqüentemente, a taxa de cristalização.

Notação

AM	tamanho médio dos cristais, m
B^0	taxa de nucleação, 1/s
bx	brix (porcentagem mássica de sólidos dissolvidos), %
Cp	calor específico, kJ/(kg°C)

C_{sat}	parâmetro para o cálculo da supersaturação da solução impura
CV	coeficiente de variação, %
D_g	dispersão da velocidade de crescimento dos cristais, m ² /s
DP	desvio padrão, m
EPE	elevação do ponto de ebulição, °C
F	vazão volumétrica, m ³ /h
G	velocidade de crescimento linear dos cristais, m/s
H	entalpia específica, kJ/kg
J_{cris}	taxa de cristalização, kg/h
J_{vap}	taxa de vaporização, kg/h
K_g	parâmetro experimental da velocidade de crescimento
Kd_g	parâmetro experimental da dispersão da velocidade
K_n	parâmetro experimental da taxa de nucleação
k_v	fator de forma dos cristais
k_{vap}	parâmetro para o cálculo da taxa de vaporização, kg/(h°C)
L	tamanho característico do cristal, m
M	massa, kg
n	densidade populacional, 1/m
N	número de cristais
P	pressão, bar
pur	pureza (porcentagem mássica de sacarose dentre os sólidos dissolvidos), %
Q	taxa de calor, kJ/h
S	supersaturação
S^*	supsaturação crítica
t	tempo, s
T	temperatura, °C
V	volume, m ³
W	vazão mássica, kg/h

Letras Gregas

α	fator de correção para entalpia do vapor de aquecimento
β	eficiência de separação sólido-líquido, %

η	porcentagem mássica de manutenção de cristais na corrente sólida, %
μ_i	momento de distribuição
ρ	densidade, kg/m ³
ω_c	porcentagem mássica de cristais, %

Subíndices

<i>ac</i>	açúcar
<i>c</i>	cristais
<i>imp</i>	impurezas
<i>e</i>	correntes de entrada
<i>m</i>	massa
<i>mel</i>	mel
<i>s</i>	correntes de saída
<i>sac</i>	sacarose
<i>sat</i>	saturação
<i>sol</i>	solução
<i>susp</i>	suspensão
v_1	vapor de aquecimento
v_2	vapor gerado no cozedor
<i>vap</i>	vaporização
<i>w</i>	água

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CHEN, J. C. P.; CHOU, C. C. **Cane sugar handbook: a manual for cane sugar manufacturers and their chemists**. 12. ed. New York: John Wiley & Sons, 1993.

CHORÃO, J. M. M. N. **Operação assistida por computador de um cristalizador evaporativo industrial de açúcar**. 1995. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Porto.

DIAS, M. O. S.; MACIEL FILHO, R.; MANTELATTO, P. E.; CAVALETT, O.; ROSSELL, C. E. V.; BONOMI, A.; LEAL, M. R. L. V. Sugarcane processing for ethanol and sugar in Brazil. **Environmental Development**, v. 15, p. 35–51, 2015.

FERNANDES, A. C. **Cálculos na agroindústria da cana-de-açúcar**. 3. ed. Piracicaba, SP: STAB, 2011.

GEORGIEVA, P.; MEIRELES, M. J.; FEYO DE AZEVEDO, S. Knowledge-based hybrid modelling of a batch crystallisation when accounting for nucleation, growth and agglomeration phenomena. **Chemical Engineering Science**, v. 58, n. 16, p. 3699–3713, 2003.

HOWELL, T. A.; BEN-YOSEPH, E.; RAO, C.; HARTEL, R. W. Sucrose crystallization kinetics in thin films at elevated temperatures and supersaturations. **Crystal Growth & Design**, v. 2, n. 1, p. 67–72, 2002.

HUGOT, É. **Handbook of cane sugar engineering**. 3. ed. Amsterdam: Elsevier, 1986.

JESUS, C. D. F. **Validação da simulação dinâmica das etapas de evaporação e cristalização da produção de açúcar com dados obtidos em plantas industriais**. 2004. Universidade Federal de São Carlos, 2004.

KHADDOUR, I. A.; BENTO, L. S. M.; FERREIRA, A. M. A.; ROCHA, F. A. N. Kinetics and thermodynamics of sucrose crystallization from pure solution at different initial supersaturations. **Surface Science**, v. 604, n. 13–14, p. 1208–1214, 2010.

KUMAR, K. V.; MARTINS, P.; ROCHA, F. Modelling of the batch sucrose crystallization kinetics using artificial neural networks: comparison with conventional regression analysis. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 47, n. 14, p. 4917–4923, 2008.

LIANG, B.; HARTEL, R. W. Techniques for developing nucleation and growth kinetics from MSMR data for sucrose crystallization in the presence of growth rate dispersion. **Journal of Crystal Growth**, v. 108, n. 1–2, p. 129–142, 1991.

MARCINIUK JUNIOR, M. **Três diferentes abordagens de modelagem e simulação do processo de cristalização na produção de açúcar no simulador EMSO**. 2015. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos.

MARTINS, P. M.; ROCHA, F. A.; REIN, P. Modeling Sucrose Evaporative Crystallization. Part 2. Investigation into Crystal Growth Kinetics and Solubility. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 44, n. 23, p. 8865–8872, 2005.

MAZAEDA, R.; ACEBES, L. F.; RODRÍGUEZ, A.; ENGELL, S.; PRADA, C. Sugar crystallization benchmark. **Computer Aided Chemical Engineering**, v. 33, p. 613–618, 2014.

MERHEB, G. de A. **Influência da contaminação combinada de dextrana e amido na cristalização do açúcar**. 2014. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos.

MERSMANN, A. **Crystallization technology handbook**. 2. ed. New York: Marcel Dekker, 2001.

MULLIN, J. W. **Crystallization**. 4. ed. Woburn, MA: Butterworth Heinemann, 2001.

MYERSON, A. S. **Handbook of industrial crystallization**. 2. ed. Elsevier Science & Technology Books, 2002.

OUIAZZANE, S.; MESSNAOUI, B.; ABDERAFLI, S.; WOUTERS, J.; BOUNAHMIDI, T. Estimation of sucrose crystallization kinetics from batch crystallizer data. **Journal of Crystal Growth**, v. 310, n. 4, p. 798–803, 2008a.

OUIAZZANE, S.; MESSNAOUI, B.; ABDERAFLI, S.; WOUTERS, J.; BOUNAHMIDI, T. Modeling of sucrose crystallization kinetics: the influence of glucose and fructose. **Journal of Crystal Growth**, v. 310, n. 15, p. 3498–3503, 2008b.

PAYNE, J. H. **Operações unitárias na produção de açúcar de cana**. São Paulo: Nobel, 1989.

RODRIGUES, R.; SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. Teaching chemical reaction engineering using EMSO simulator. **Computer Applications in Engineering Education**, v. 18, n. 4, p. 607–618, 2010.

SHAMIM, F.; HERNÁNDEZ, R.; PAULEN, R.; ENGELL, S. A hierarchical coordination approach to the optimal operation of a sugar crystallization process. **Computer Aided Chemical Engineering**, v. 38, p. 703-708, 2016.

SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. EMSO: A new environment for modelling, simulation and optimisation. In: **European Symposium on Computer Aided Process Engineering**, p. 947–952, 2003.

SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. Modifications, simplifications, and efficiency tests for the CAPE-OPEN numerical open interfaces. **Computers & Chemical Engineering**, v. 28, n. 9, p. 1611–1621, 2004.

SOUSA, J. S. I.; PEIXOTO, A. M.; TOLEDO, F. F. **Enciclopédia agrícola brasileira**. ESALQ, São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 1995.

VAN HOOK, A. Kinetics of sucrose crystallization: pure sucrose solutions. **Industrial & Engineering Chemistry**, v. 36, n. 11, p. 1042–1047, 1944.

VAN HOOK, A. Kinetics of sucrose crystallization: mechanism of reaction. **Industrial & Engineering Chemistry**, v. 37, n. 8, p. 782–785, 1945.

VAN HOOK, A. Kinetics of sucrose crystallization: sucrose-nonsucrose solutions. **Industrial & Engineering Chemistry**, v. 38, n. 1, p. 50–53, 1946.

VAN HOOK, A. Kinetics of sucrose crystallization: real massecurites. **Industrial & Engineering Chemistry**, v. 40, n. 1, p. 85–89, 1948.

ZAGRODZKI, S.; ZAORSKA, H. Influence of the decolorization of sugar juices and products on the crystallization rate in impure solutions. **International Sugar Journal**, v. 76, p. 300-303, 337-338, 1974.

ZAORSKA, H. Changes in sucrose crystallization rate as a function of the quantity of colouring matter in the solution. **International Sugar Journal**, v. 70, p. 99-103, 1968.

Capítulo 5 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Foram apresentadas três abordagens distintas relacionadas à necessidade das usinas de açúcar e etanol brasileiras de se manterem competitivas frente às adversidades impostas frequentemente pelo mercado.

A primeira abordagem, descrita no Capítulo 2, tratou do aumento de eficiência industrial, por meio da identificação rápida e correção das perdas de sacarose no processo. Foi apresentado um método de reconciliação para os dados de vazão e concentração, que pode ser aplicado a qualquer equipamento ou etapa do processo para identificar perdas. Neste trabalho, o método foi aplicado à etapa de concentração do caldo da usina em estudo e permitiu o cálculo do balanço de massa das etapas posteriores de cozimento, centrifugação e secagem. A produção de açúcar calculada resultou em 34.037 sacos de 50 quilos de açúcar superior à produção real da usina no período estudado. Verificou-se que o setor de fabricação de açúcar, que compreende desde a pré-*evaporação* do caldo até o *ensaque*, foi responsável por 37,3% das perdas indeterminadas da unidade. Se essas perdas fossem identificadas rapidamente durante a safra, de modo que fossem corrigidas e, metade delas, evitadas e transformadas em açúcar a ser comercializado, o ganho adicional da usina seria de R\$ 883,5 mil. Como sugestões para trabalhos futuros, propõe-se a aplicação do método descrito aos demais setores da produção, como tratamento do caldo, fermentação e destilação, de modo a identificar a contribuição de cada etapa para as perdas indeterminadas do processo. Também pode-se aplicar o método para o monitoramento diário das perdas em determinado equipamento da planta, de forma a identificar e corrigir rapidamente situações anormais de perdas que venham a ocorrer.

O Capítulo 3 abordou a necessidade de redução de variabilidade do processo industrial, de forma a diminuir o desperdício gerado pela produção de açúcar fora dos padrões de qualidade exigidos pelo mercado consumidor. Foram utilizados dois métodos estatísticos multivariados, PCA e PLS, para identificar as maiores fontes de variabilidade da planta e elucidar as principais relações entre as variáveis do processo. Os três principais componentes resultantes da análise PCA foram responsáveis por 40,92% da variabilidade total dos dados. A análise PCA destacou a relação entre a concentração de amido e dextrana no açúcar e a presença de flocos alcoólicos, bem como a importância da estabilidade de processamento de cana para a produção de açúcar de menor cor. Tanto a análise PCA quanto a regressão PLS salientaram a relação entre cor e umidade do açúcar. Supondo que a identificação das variáveis altamente correlacionadas à produção de açúcar levasse a um maior controle sobre elas, e que esse

controle fosse suficiente para atingir a produção planejada, a receita adicional da usina com a venda do açúcar produzido seria R\$ 52,2 milhões ao final da safra. Sugere-se, para trabalhos futuros, a aplicação de métodos derivados da análise PCA e da regressão PLS aos dados de processo das usinas, como o ICA (*Independent Component Analysis*), o DPCA (*Dynamic Principal Component Analysis*) e o DPLS (*Dynamic Partial Least Squares*) (GE; SONG; GAO, 2013; KU; STORER; GEORGAKIS, 1995; QIN, 2012; YIN et al., 2014, 2015). Dessa forma, as relações estabelecidas neste trabalho poderão ser confirmadas, e novas relações poderão ser discutidas.

A terceira abordagem foi descrita no Capítulo 4 e tratou da modelagem do processo de cristalização da sacarose em duas massas. O modelo utilizado, que englobou os balanços mássico, energético e populacional, e considerou os fenômenos de nucleação e dispersão da velocidade de crescimento dos cristais, representou adequadamente o processo. O tamanho médio dos cristais na simulação foi de 0,64 mm, com coeficiente de variação igual a 30,58%, enquanto o tamanho médio dos cristais da produção real da usina em estudo foi de 0,65 mm, com coeficiente de variação igual a 25,36%. Alterações nas variáveis de entrada da simulação, como brix e pureza do xarope flotado, levaram a distúrbios no processo muito semelhantes aos que ocorrem no processo real. O desenvolvimento da automatização do cozimento do açúcar na usina considerada neste estudo poderia levar a uma redução de, no mínimo, R\$ 325 mil por ano, considerando, dentre as vantagens da automatização, apenas a diminuição da necessidade de mão-de-obra no setor. As sugestões para trabalhos futuros são a integração do modelo com as demais etapas do processo industrial de produção de açúcar, como a concentração do caldo e a secagem, e a utilização do modelo descrito para o desenvolvimento de estratégias de controle que visem à redução dos custos envolvidos na cristalização da sacarose.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- GE, Z.; SONG, Z.; GAO, F. Review of recent research on data-based process monitoring. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 52, n. 10, p. 3543–3562, 2013.
- KU, W.; STORER, R. H.; GEORGAKIS, C. Disturbance detection and isolation by dynamic principal component analysis. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 30, n. 1, p. 179–196, 1995.
- QIN, S. J. Survey on data-driven industrial process monitoring and diagnosis. **Annual Reviews in Control**, v. 36, n. 2, p. 220–234, 2012.

YIN, S.; DING, S. X.; XIE, X.; LUO, H. A review on basic data-driven approaches for industrial process monitoring. **IEEE Transactions on Industrial Electronics**, v. 61, n. 11, p. 6418–6428, 2014.

YIN, S.; LI, X.; GAO, H.; KAYNAK, O. Data-based techniques focused on modern industry: an overview. **IEEE Transactions on Industrial Electronics**, v. 62, n. 1, p. 657–667, 2015.

APÊNDICE A – DEMONSTRAÇÃO MATEMÁTICA DO BALANÇO DE ENERGIA DO PROCESSO DE CRISTALIZAÇÃO DA SACAROSE

Balanço de energia nos cozedores:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(M_{sol}H_{sol} + M_cH_c) \\ = Q_{v1} + F_e \cdot \rho_e \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega_{c,e}}{100}\right) \cdot H_{sol,e} + \frac{\omega_{c,e}}{100} \cdot H_{c,e} \right] - J_{vap} \cdot H_{v2} - F_s \cdot \rho_s \\ \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega_{c,s}}{100}\right) \cdot H_{sol,s} + \frac{\omega_{c,s}}{100} \cdot H_{c,s} \right] \end{aligned} \quad (4.7)$$

Termo

Significado físico

$$\frac{d}{dt}(M_{sol}H_{sol} + M_cH_c)$$

Acúmulo de energia

$$Q_{v1}$$

Energia fornecida pelo vapor de aquecimento

$$F_e \cdot \rho_e \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega_{c,e}}{100}\right) \cdot H_{sol,e} + \frac{\omega_{c,e}}{100} \cdot H_{c,e} \right]$$

Energia adicionada ao sistema por meio das correntes de entrada

$$J_{vap} \cdot H_{v2}$$

Energia que sai do sistema pela corrente de água evaporada

$$F_s \cdot \rho_s \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega_{c,s}}{100}\right) \cdot H_{sol,s} + \frac{\omega_{c,s}}{100} \cdot H_{c,s} \right]$$

Energia que sai do sistema por meio das correntes de saída

Abrindo o termo referente ao acúmulo de energia, temos:

$$\frac{d}{dt}(M_{sol}H_{sol} + M_cH_c) = \frac{d}{dt}(M_{sol}H_{sol}) + \frac{d}{dt}(M_cH_c) = M_{sol} \frac{dH_{sol}}{dt} + H_{sol} \frac{dM_{sol}}{dt} + M_c \frac{dH_c}{dt} + H_c \frac{dM_c}{dt}$$

Sabendo que M_{sol} é função de M_{sac} , M_{imp} e M_w (Equação B.1), H_{sol} é função de bx_{sol} , pur_{sol} e T (Equações B.4 e B.5), e H_c é função de T (Equações B.16 e B.17),

$$\begin{aligned} M_{sol} \frac{dH_{sol}}{dt} + H_{sol} \frac{dM_{sol}}{dt} + M_c \frac{dH_c}{dt} + H_c \frac{dM_c}{dt} \\ = M_{sol} \left(\frac{dH_{sol}}{dbx_{sol}} \cdot \frac{dbx_{sol}}{dt} + \frac{dH_{sol}}{dpur_{sol}} \cdot \frac{dpur_{sol}}{dt} + \frac{dH_{sol}}{dT} \cdot \frac{dT}{dt} \right) \\ + H_{sol} \left(\frac{dM_{sol}}{dM_{sac}} \cdot \frac{dM_{sac}}{dt} + \frac{dM_{sol}}{dM_{imp}} \cdot \frac{dM_{imp}}{dt} + \frac{dM_{sol}}{dM_w} \cdot \frac{dM_w}{dt} \right) + M_c \left(\frac{dH_c}{dT} \cdot \frac{dT}{dt} \right) + H_c \frac{dM_c}{dt} \end{aligned}$$

Tendo ainda que bx_{sol} é função de M_{sac} , M_{imp} e M_w (Equação B.2), pur_{sol} é função de M_{sac} e M_{imp} (Equação B.3),

$$\begin{aligned}
& M_{sol} \left(\frac{dH_{sol}}{dbx_{sol}} \cdot \frac{dbx_{sol}}{dt} + \frac{dH_{sol}}{dpur_{sol}} \cdot \frac{dpur_{sol}}{dt} + \frac{dH_{sol}}{dT} \cdot \frac{dT}{dt} \right) \\
& + H_{sol} \left(\frac{dM_{sol}}{dM_{sac}} \cdot \frac{dM_{sac}}{dt} + \frac{dM_{sol}}{dM_{imp}} \cdot \frac{dM_{imp}}{dt} + \frac{dM_{sol}}{dM_w} \cdot \frac{dM_w}{dt} \right) + M_c \left(\frac{dH_c}{dT} \cdot \frac{dT}{dt} \right) + H_c \frac{dM_c}{dt} \\
& = M_{sol} \left[\frac{dH_{sol}}{dbx_{sol}} \left(\frac{dbx_{sol}}{dM_{sac}} \cdot \frac{dM_{sac}}{dt} + \frac{dbx_{sol}}{dM_{imp}} \cdot \frac{dM_{imp}}{dt} + \frac{dbx_{sol}}{dM_w} \cdot \frac{dM_w}{dt} \right) \right. \\
& \left. + \frac{dH_{sol}}{dpur_{sol}} \left(\frac{dpur_{sol}}{dM_{sac}} \cdot \frac{dM_{sac}}{dt} + \frac{dpur_{sol}}{dM_{imp}} \cdot \frac{dM_{imp}}{dt} \right) + \frac{dH_{sol}}{dT} \cdot \frac{dT}{dt} \right] \\
& + H_{sol} \left(\frac{dM_{sol}}{dM_{sac}} \cdot \frac{dM_{sac}}{dt} + \frac{dM_{sol}}{dM_{imp}} \cdot \frac{dM_{imp}}{dt} + \frac{dM_{sol}}{dM_w} \cdot \frac{dM_w}{dt} \right) + M_c \left(\frac{dH_c}{dT} \cdot \frac{dT}{dt} \right) + H_c \frac{dM_c}{dt} \\
& = M_{sol} \left\{ \frac{dH_{sol}}{dbx_{sol}} \left[100 \cdot \frac{M_w}{M_{sol}^2} \cdot \frac{dM_{sac}}{dt} + 100 \cdot \frac{M_w}{M_{sol}^2} \cdot \frac{dM_{imp}}{dt} - 100 \cdot \frac{(M_{sac} + M_{imp})}{M_{sol}^2} \cdot \frac{dM_w}{dt} \right] \right. \\
& \left. + \frac{dH_{sol}}{dpur_{sol}} \left[100 \cdot \frac{M_{imp}}{(M_{sac} + M_{imp})^2} \cdot \frac{dM_{sac}}{dt} - 100 \cdot \frac{M_{sac}}{(M_{sac} + M_{imp})^2} \cdot \frac{dM_{imp}}{dt} \right] + Cp_{sol} \cdot \frac{dT}{dt} \right\} \\
& + H_{sol} \left(\frac{dM_{sac}}{dt} + \frac{dM_{imp}}{dt} + \frac{dM_w}{dt} \right) + M_c Cp_c \frac{dT}{dt} + H_c \frac{dM_c}{dt} \\
& = 100 \cdot \frac{dH_{sol}}{dbx_{sol}} \left[\frac{M_w}{M_{sol}} \cdot \left(\frac{dM_{sac}}{dt} + \frac{dM_{imp}}{dt} \right) - \frac{(M_{sac} + M_{imp})}{M_{sol}} \cdot \frac{dM_w}{dt} \right] + 100 \\
& \cdot \frac{dH_{sol}}{dpur_{sol}} \left[\frac{M_{sol}}{(M_{sac} + M_{imp})(M_{sac} + M_{imp})} \cdot \frac{dM_{sac}}{dt} - \frac{M_{sol}}{(M_{sac} + M_{imp})(M_{sac} + M_{imp})} \cdot \frac{dM_{imp}}{dt} \right] \\
& + M_{sol} Cp_{sol} \cdot \frac{dT}{dt} + H_{sol} \left(\frac{dM_{sac}}{dt} + \frac{dM_{imp}}{dt} + \frac{dM_w}{dt} \right) + M_c Cp_c \frac{dT}{dt} + H_c \frac{dM_c}{dt} \\
& = 100 \cdot \frac{dH_{sol}}{dbx_{sol}} \left[\left(1 - \frac{bx_{sol}}{100} \right) \cdot \left(\frac{dM_{sac}}{dt} + \frac{dM_{imp}}{dt} \right) - \frac{bx_{sol}}{100} \cdot \frac{dM_w}{dt} \right] + 100 \\
& \cdot \frac{100}{bx_{sol}} \frac{dH_{sol}}{dpur_{sol}} \left[\left(1 - \frac{pur_{sol}}{100} \right) \cdot \frac{dM_{sac}}{dt} - \frac{pur_{sol}}{100} \cdot \frac{dM_{imp}}{dt} \right] + M_{sol} Cp_{sol} \cdot \frac{dT}{dt} \\
& + H_{sol} \left(\frac{dM_{sac}}{dt} + \frac{dM_{imp}}{dt} + \frac{dM_w}{dt} \right) + M_c Cp_c \frac{dT}{dt} + H_c \frac{dM_c}{dt}
\end{aligned}$$

Dessa forma, a Equação 4.7 toma a forma da Equação 4.8:

$$\begin{aligned}
& (M_{sol} \cdot Cp_{sol} + M_c \cdot Cp_c) \frac{dT}{dt} \\
& = Q_{v1} + F_e \cdot \rho_e \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega_{c,e}}{100} \right) \cdot H_{sol,e} + \frac{\omega_{c,e}}{100} \cdot H_{c,e} \right] - J_{vap} \cdot H_{v2} - F_s \cdot \rho_s \\
& \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega_{c,s}}{100} \right) \cdot H_{sol,s} + \frac{\omega_{c,s}}{100} \cdot H_{c,s} \right] - H_{sol} \cdot \left(\frac{dM_{sac}}{dt} + \frac{dM_{imp}}{dt} + \frac{dM_w}{dt} \right) - H_c \cdot \frac{dM_c}{dt} \\
& - 100 \cdot \frac{dH_{sol}}{dbx_{sol}} \cdot \left[\left(1 - \frac{bx_{sol}}{100} \right) \cdot \left(\frac{dM_{sac}}{dt} + \frac{dM_{imp}}{dt} \right) - \frac{bx_{sol}}{100} \cdot \frac{dM_w}{dt} \right] - \left(\frac{100}{bx_{sol}} \right) \cdot 100 \\
& \cdot \frac{dH_{sol}}{dpur_{sol}} \cdot \left[\left(1 - \frac{pur_{sol}}{100} \right) \cdot \frac{dM_{sac}}{dt} - \frac{pur_{sol}}{100} \cdot \frac{dM_{imp}}{dt} \right]
\end{aligned} \tag{4.8}$$

APÊNDICE B – EQUAÇÕES DO MODELO E CORRELAÇÕES PARA PROPRIEDADES FÍSICAS

Solução/Suspensão

Massa de solução (kg):

$$M_{sol} = M_{sac} + M_{imp} + M_w \quad (B.1)$$

(GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003)

Brix da solução (%):

$$bx_{sol} = \left(\frac{M_{sac} + M_{imp}}{M_{sol}} \right) \cdot 100 \quad (B.2)$$

(GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003)

Pureza da solução (%):

$$pur_{sol} = \left(\frac{M_{sac}}{M_{sac} + M_{imp}} \right) \cdot 100 \quad (B.3)$$

(GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003)

Calor específico da solução (kJ/(kg°C)):

$$Cp_{sol} = \frac{4186,8 - 29,7 \cdot bx_{sol} + 4,61 \cdot bx_{sol} \cdot \frac{pur_{sol}}{100} + 0,075 \cdot bx_{sol} \cdot T}{1000} \quad (B.4)$$

(CHORÃO, 1995)

Entalpia específica da solução (kJ/kg):

$$H_{sol} = Cp_{sol} \cdot T \quad (B.5)$$

Volume de suspensão (m³):

$$V_{susp} = \frac{M_{sol}}{\rho_{sol}} + \frac{M_c}{\rho_c} \quad (B.6)$$

(GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003)

Elevação do ponto de ebulição (°C):

$$EPE = \left(0,03 - 0,018 \cdot \frac{pur_{sol}}{100} \right) \cdot (T_{sat} + 84) \cdot \left(\frac{bx_{sol}}{100 - bx_{sol}} \right) \quad (B.7)$$

(CHORÃO, 1995)

Densidade da solução pura (kg/m³):

$$\rho_{sol}^* = \left(1000 + \frac{bx_{sol} \cdot (200 + bx_{sol})}{54} \right) \cdot \left(1 - 0,036 \cdot \frac{T - 20}{160 - T} \right) \quad (B.8)$$

(CHORÃO, 1995)

Densidade da solução impura (kg/m³):

$$\rho_{sol} = \rho_{sol}^* + 1000 \cdot \left\{ -1 + \exp \left[(-6,927 \cdot 10^{-6} \cdot bx_{sol}^2 - 1,164 \cdot 10^{-4} \cdot bx_{sol}) \cdot \left(\frac{pur_{sol}}{100} - 1 \right) \right] \right\} \quad (B.9)$$

(CHORÃO, 1995)

Densidade da suspensão (kg/m³):

$$\rho_{susp} = \frac{\rho_{sol} \cdot \rho_c}{\rho_c - \frac{\omega_c}{100} \cdot (\rho_c - \rho_{sol})} \quad (B.10)$$

(CHORÃO, 1995)

Porcentagem mássica de cristais (%):

$$\omega_c = \frac{M_c}{M_{sol} + M_c} \quad (B.11)$$

(GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003)

Brix de saturação (%):

$$bx_{sat} = 64,447 + 8,222 \cdot 10^{-2} \cdot T + 1,66169 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - 1,558 \cdot 10^{-6} \cdot T^3 - 4,63 \cdot 10^{-8} \cdot T^4 \quad (B.12)$$

(CHORÃO, 1995)

Supersaturação:

$$S = \frac{bx_{sol}/(100 - bx_{sol})}{(bx_{sat} \cdot C_{sat})/(100 - bx_{sat})} \quad (B.13)$$

$$C_{sat} = 0,1 \cdot \frac{bx_{sol}}{100 - bx_{sol}} \cdot \left(1 - \frac{pur_{sol}}{100} \right) + 0,4 + 0,6 \cdot \exp \left[-0,24 \cdot \frac{bx_{sol}}{100 - bx_{sol}} \cdot \left(1 - \frac{pur_{sol}}{100} \right) \right] \quad (B.14)$$

(CHORÃO, 1995; GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003)

Supersaturação crítica:

$$S^* = 1,129 - 0,284 \cdot \left(1 - \frac{pur_{sol}}{100} \right) + [2,333 - 0,0709 \cdot (T - 60)] \cdot \left(1 - \frac{pur_{sol}}{100} \right)^2 \quad (B.15)$$

(CHORÃO, 1995)

Cristais

Calor específico dos cristais (kJ/(kg°C)):

$$Cp_c = \frac{1163,2 + 3,488 \cdot T}{1000} \quad (\text{B.16})$$

(GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003)

Entalpia específica dos cristais (kJ/kg):

$$H_c = Cp_c \cdot T \quad (\text{B.17})$$

Volume de cristais (m³):

$$V_c = \frac{M_c}{\rho_c} \quad (\text{B.18})$$

(GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003)

Tamanho médio (m):

$$AM = \frac{\mu_4}{\mu_3} \quad (\text{B.19})$$

(CHORÃO, 1995)

Coefficiente de variação (%):

$$CV = \left(\sqrt{\frac{\mu_3 \cdot \mu_5}{\mu_4^2} - 1} \right) \cdot 100 \quad (\text{B.20})$$

(CHORÃO, 1995)

Desvio padrão (m):

$$DP = \frac{AM \cdot CV}{100} \quad (\text{B.21})$$

Água

Densidade da água (kg/m³):

$$\rho_w = 1016,7 - 0,57 \cdot T \quad (\text{B.22})$$

(GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003)

Calor específico da água (kJ/(kg°C)):

$$Cp_w = 4,18 \cdot (1,0017 - 1,5754 \cdot 10^{-4} \cdot T) + 2,107 \cdot 10^{-6} \cdot T^2 \quad (\text{B.23})$$

(Tabela Termodinâmica)

Entalpia específica da água (kJ/kg):

$$H_w = Cp_w \cdot T \quad (\text{B.24})$$

Entalpia específica de vaporização da água (kJ/kg):

$0,1 < P < 1 \text{ bar}$,

$$\Delta H_{vap} = \frac{2263280 - 58210 \cdot \ln(P)}{1000} \quad (\text{B.25})$$

$1 < P < 3 \text{ bar}$,

$$\Delta H_{vap} = \frac{2257510 - 85950 \cdot \ln(P)}{1000} \quad (\text{B.26})$$

(CHORÃO, 1995)

Temperatura de saturação da água (°C):

$0,1 < P < 1 \text{ bar}$,

$$T_{sat} = 122,551 \cdot \exp(-0,246 \cdot P) \cdot P^{0,413} \quad (\text{B.27})$$

$1 < P < 3 \text{ bar}$,

$$T_{sat} = 100,884 \cdot \exp(-1,203 \cdot 10^{-2} \cdot P) \cdot P^{0,288} \quad (\text{B.28})$$

(GEORGIEVA; MEIRELES; FEYO DE AZEVEDO, 2003)

Vapor

Entalpia específica do vapor (kJ/kg):

$$H_v = \frac{1766,07 \cdot (99,65 + 27,55 \cdot \ln(P) + 1,8 \cdot \ln(P)^2) + 2501800}{1000} \quad (\text{B.29})$$

(JESUS, 2004)

APÊNDICE C – CÓDIGO DO MODELO PARA SIMULAÇÃO BASE NO SOFTWARE EMSO

Modelo Corrente de Água

```
using "types";
```

```
Model CorrenteAgua
```

```
VARIABLES
```

```
F as flow_vol (Brief="Vazão volumétrica"); #m³/h
```

```
T as temperature (Brief="Temperatura"); #K
```

```
TC as Real (Brief="Temperatura em °C"); #°C
```

```
dens as dens_mass (Brief="Densidade"); #kg/m³
```

```
Cp as cp_mass(Brief="Calor específico"); #kJ/(kg°C)
```

```
H as enth_mass (Brief="Entalpia"); #kJ/kg
```

```
EQUATIONS
```

```
"Temperatura em °C"
```

$$TC = T * 1 / K - 273.15; \text{ #}^\circ\text{C}$$

```
"Densidade da água"
```

$$\text{dens} = 1016.7 * \text{kg/m}^3 - 0.57 * \text{kg/m}^3 / \text{K} * (T - 273.15 * \text{K}); \text{ #kg/m}^3$$

```
"Calor específico"
```

$$Cp = 4.18 * \text{kJ/kg/K}^2 * (1.0017 * \text{K} - 1.5754e-4 * (T - 273.15 * \text{K})) + 2.107e-6 * (T - 273.15 * \text{K})^2 * \text{kJ/kg/K}^3; \text{ #kJ/(kg}^\circ\text{C)}$$

```
"Entalpia"
```

$$H = Cp * (T - 273.15 * \text{K});$$

end

Modelo Corrente de Massa

using "types";

Model CorrenteMassa

VARIABLES

F as flow_vol (Brief="Vazão volumétrica"); #m³/h

T as temperature (Brief="Temperatura"); #K

TC as Real (Brief="Temperatura em °C"); #°C

bx as percent (Brief="Brix"); #%

pur as percent (Brief="Pureza"); #%

bxt as Real (Brief="Brix após dissolução dos cristais"); #%

polt as Real (Brief="Pol após dissolução dos cristais"); #%

purt as Real (Brief="Pureza após dissolução dos cristais"); #%

dens_pure as dens_mass (Brief="Densidade da solução pura"); #kg/m³

dens as dens_mass (Brief="Densidade da solução impura"); #kg/m³

densm as dens_mass (Brief="Densidade da massa"); #kg/m³

dense as dens_mass (Brief="Densidade do cristal"); #kg/m³

Cp as cp_mass (Brief="Calor específico"); #kJ/(kg°C)

H as enth_mass (Brief="Entalpia"); #kJ/kg

Cpc as cp_mass (Brief="Calor específico dos cristais"); #kJ/(kg°C)

Hc as enth_mass (Brief="Entalpia dos cristais"); #kJ/kg

Wc as percent (Brief="Porcentagem mássica de cristais na massa"); #%

mi0 as Real (Brief="Momento 0 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi1 as Real (Brief="Momento 1 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi2 as Real (Brief="Momento 2 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi3 as Real (Brief="Momento 3 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi4 as Real (Brief="Momento 4 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi5 as Real (Brief="Momento 5 da distribuição dos cristais"); #adimensional

EQUATIONS

"Temperatura em °C"

$$TC = T * 1 / K - 273.15; \#^{\circ}C$$

"Densidade da solução pura"

$$\text{dens_pure} = (1000 + (bx * (200 + bx) / 54)) * (1 - 0.036 * ((T - 273.15 * K - 20 * K) / (160 * K - (T - 273.15 * K)))) * \text{kg}/\text{m}^3; \# \text{kg}/\text{m}^3$$

"Densidade da solução impura"

$$\text{dens} = \text{dens_pure} + 1000 * (-1 + \exp((-6.927e-6 * bx^2 - 1.164e-4 * bx) * ((\text{pur}/100) - 1))) * \text{kg}/\text{m}^3; \# \text{kg}/\text{m}^3$$

"Densidade da massa"

$$\text{densm} = \text{dens} * \text{densc} / (\text{densc} - Wc / 100 * (\text{densc} - \text{dens})); \# \text{kg}/\text{m}^3$$

"Calor específico da solução"

$$Cp = (4186.8 * \text{kJ}/\text{kg}/\text{K} - 29.7 * bx * \text{kJ}/\text{kg}/\text{K} + 4.61 * bx * \text{pur}/100 * \text{kJ}/\text{kg}/\text{K} + 0.075 * bx * (T - 273.15 * K) * \text{kJ}/\text{kg}/\text{K}^2) / 1000; \# \text{kJ}/(\text{kg}^{\circ}C)$$

"Entalpia da solução"

$$H = Cp * TC * K; \# \text{kJ}/\text{kg}$$

"Calor específico dos cristais"

$$C_{pc}=(1163.2+3.488*TC)/1000*\text{kJ/kg/K}; \text{ #kJ/(kg}^\circ\text{C)}$$

"Entalpia dos cristais"

$$H_c=C_{pc}*TC*\text{K}; \text{ #kJ/kg}$$

"Brix após dissolução dos cristais"

$$b_{xt}=b_x/100*(100-W_c)+W_c; \text{ \%}$$

"Pol após dissolução dos cristais"

$$p_{olt}=p_{ur}*b_x/100*(100-W_c)/100+W_c; \text{ \%}$$

"Pureza após dissolução dos cristais"

$$p_{urt}=p_{olt}/b_{xt}*100; \text{ \%}$$

end

Modelo Corrente de Mel

using "types";

Model CorrenteMel

VARIABLES

F as flow_vol (Brief="Vazão volumétrica"); #m³/h

T as temperature (Brief="Temperatura"); #K

TC as Real (Brief="Temperatura em °C"); #°C

b_x as percent (Brief="Brix"); #%

p_{ur} as percent (Brief="Pureza"); #%

dens_pure as dens_mass (Brief="Densidade da solução pura"); #kg/m³

dens as dens_mass (Brief="Densidade da solução impura"); #kg/m³

Cp as cp_mass (Brief="Calor específico"); #kJ/(kg°C)

H as enth_mass (Brief="Entalpia"); #kJ/kg

EQUATIONS

"Temperatura em °C"

$$TC=T*1/K'-273.15; \#^{\circ}C$$

"Densidade da solução pura"

$$\text{dens_pure} = (1000+(bx*(200+bx)/54))*(1-0.036*((T-273.15*'K'-20*'K')/(160*'K'-(T-273.15*'K'))))*\text{kg}/\text{m}^3; \# \text{kg}/\text{m}^3$$

"Densidade da solução impura"

$$\text{dens} = \text{dens_pure}+1000*(-1+\exp((-6.927e-6*bx^2-1.164e-4*bx)*((\text{pur}/100)-1)))*\text{kg}/\text{m}^3; \# \text{kg}/\text{m}^3$$

"Calor específico"

$$Cp=(4186.8*\text{kJ}/\text{kg}/\text{K}'-29.7*bx*\text{kJ}/\text{kg}/\text{K}'+4.61*bx*\text{pur}/100*\text{kJ}/\text{kg}/\text{K}'+0.075*bx*(T-273.15*'K')*\text{kJ}/\text{kg}/\text{K}'^2)/1000; \# \text{kJ}/(\text{kg}^{\circ}C)$$

"Entalpia"

$$H=Cp*(T-273.15*'K'); \# \text{kJ}/\text{kg}$$

end

Modelo Corrente de Vapor

using "types";

Model CorrenteVapor

VARIABLES

Fmax as flow_mass (Brief="Vazão mássica máxima do vapor"); #kg/h

F as flow_mass (Brief="Vazão mássica do vapor"); #kg/h

P as pressure (Brief="Pressão do vapor em atm"); #atm

Pbar as Real (Brief="Pressão do vapor em bar"); #bar

T as temperature (Brief="Temperatura do vapor"); #K

TC as Real (Brief="Temperatura em °C"); #°C

alpha as positive (Brief="Fator de correção para entalpia"); #adimensional

H as enth_mass (Brief="Entalpia do vapor"); #kJ/kg

Te as temperature (Brief="Temperatura de saturação do vapor"); #K

deltaHv as enth_mass (Brief="Entalpia de vaporização"); #kJ/kg

Q as power (Brief="Energia fornecida pelo vapor"); #kJ/h

EQUATIONS

"Temperatura em °C"

$$TC=T*1/K'-273.15; \#^{\circ}C$$

"Pressão em bar"

$$Pbar=P*1.01325*1/atm'; \#bar$$

"Entalpia específica do vapor"

$$H=(1766.07*(99.65+27.55*\ln(Pbar))+1.8*\ln(Pbar)^2+2501800)/1000*'kJ/kg'; \#kJ/kg$$

"Temperatura de saturação do vapor"

$$Te=(100.884*'K'*\exp(-1.203e-2*Pbar)*Pbar^0.288)+273.15*'K'; \#K$$

"Entalpia de vaporização"

$$\text{deltaHv}'*kg/kJ'=(2257510-85950*\ln(Pbar))/1000; \#kJ/kg$$

"Energia fornecida pelo vapor"

$$Q=F*\alpha*\delta H_v; \#kJ/h$$

end

Modelo Cozimento B

using "types";

using "CorrenteMel";

using "CorrenteAgua";

using "CorrenteVapor";

using "CorrenteMassa";

Model CozimentoB

PARAMETERS

t_op as Switcher (Brief="Tempo de operação",
Valid=["PréEnchimento", "Concentração", "Semeadura", "Enchimento", "Corte1", "Corte2",
"Aperto", "Descarga", "Espera"], Default="PréEnchimento");

VARIABLES

M as mass (Brief="Massa de solução"); #kg

Msac as mass (Brief="Massa de sacarose"); #kg

Mimp as mass (Brief="Massa de impurezas"); #kg

Mw as mass (Brief="Massa de água"); #kg

Mc as mass (Brief="Massa de cristais"); #kg

V as volume (Brief="Volume de solução/suspensão", Upper=195); #m³

P as pressure (Brief="Pressão do cozedor em atm"); #atm-Input

Pbar as Real (Brief="Pressão do cozedor em bar"); #bar

T as temperature (Brief="Temperatura"); #K

TC as Real (Brief="Temperatura em °C"); #°C

bx as percent (Brief="Brix"); #%

pur as percent (Brief="Pureza"); #%

Kvap as positive (Brief="Parâmetro da taxa de evaporação"); #kg/(hK)-Input

Jvap as flow_mass (Brief="Taxa de vaporização"); #kg/h

Tsat as temperature (Brief="Temperatura de saturação"); #°C

bxsat as percent (Brief="Brix de saturação"); #%

Csat as positive (Brief="Parâmetro para cálculo da supersaturação"); #adimensional

S as positive (Brief="Supersaturação", Upper=1.17); #adimensional

S_ as positive (Brief="Saturação crítica"); #adimensional

Cp as cp_mass (Brief="Calor específico da solução"); #kJ/(kg°C)

H as enth_mass (Brief="Entalpia da solução"); #kJ/kg;

EPE as temp_delta (Brief="Elevação do ponto de ebulição da solução"); #°C

dens_pure as dens_mass (Brief="Densidade da solução pura"); #kg/m³

dens as dens_mass (Brief="Densidade da solução impura"); #kg/m³

densm as dens_mass (Brief="Densidade da massa"); #kg/m³

deltaHv as enth_mass (Brief="Entalpia de vaporização da água"); #kJ/kg

Hv as enth_mass (Brief="Entalpia do vapor gerado no cozedor"); #kJ/kg

Jcris as flow_mass (Brief="Taxa de cristalização"); #kg/h

densc as dens_mass (Brief="Densidade do cristal"); #kg/m³-Input

Cpc as cp_mass (Brief="Calor específico dos cristais"); #kJ/(kg°C)

Hc as enth_mass (Brief="Entalpia dos cristais"); #kJ/kg

Vc as volume (Brief="Volume total dos cristais"); #m³

mi0 as Real (Brief="Momento 0 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi1 as Real (Brief="Momento 1 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi2 as Real (Brief="Momento 2 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi3 as Real (Brief="Momento 3 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi4 as Real (Brief="Momento 4 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi5 as Real (Brief="Momento 5 da distribuição dos cristais"); #adimensional

B0 as Real (Brief="Taxa de nucleação"); # #/(sm³)

G as velocity (Brief="Velocidade de crescimento dos cristais"); #m/s

Dg as velocity (Brief="Difusividade da velocidade de crescimento"); #m/s

Kdg as Real (Brief="Constante de difusividade de crescimento"); #adimensional

Kg as Real (Brief="Constante de crescimento"); #adimensional-Input

Kv as Real (Brief="Fator volumétrico"); #adimensional-Input

Kn as Real (Brief="Constante de nucleação"); #adimensional

Kno as Real (Brief="Parâmetro da equação da constante de nucleação"); #adimensional -
Input

C as Real (Brief="Parâmetro da equação da constante de nucleação"); #adimensional - Input

CV as positive (Brief="Coeficiente de variação"); #%

AM as length (Brief="Tamanho médio dos cristais"); #m

DP as length (Brief="Desvio padrão"); #m

Wc as percent (Brief="Porcentagem mássica de cristais na massa"); #%

EntMel as CorrenteMel (Brief="Entrada de mel");

EntAgua as CorrenteAgua (Brief="Entrada de água");

EntVapor as CorrenteVapor (Brief="Entrada de vapor");

out SaiMassa as CorrenteMassa (Brief="Saída de massa");

EQUATIONS

switch t_op

case "PréEnchimento":

"Vazão de vapor"

EntVapor.F=0*EntVapor.Fmax; #kg/h

"Vazão de mel"

EntMel.F=78*m^3/h'; #m³/h

"Vazão de água"

EntAgua.F=0*m^3/h'; #m³/h

"Vazão de saída"

SaiMassa.F=0*m^3/h'; #m³/h

"Cristalização"

diff(mi0)=0*1/s';

diff(mi1)=0*1/s';

diff(mi2)=0*1/s';

```
diff(mi3)=0*'1/s';

diff(mi4)=0*'1/s';

diff(mi5)=0*'1/s';

Dg=0*'m/s'; #m/s

B0=0; # #/s

G=0.000000000001*'m/s'; #m/s

"Taxa de cristalização"

Jcris=0*'kg/h'; #kg/h

"Taxa de vaporização"

Jvap=0*'kg/h'; #kg/h

when time>1200*'s' swichto "Concentração";

case "Concentração":

if S<1.06 then

    "Vazão de vapor"

    EntVapor.F=0.55*EntVapor.Fmax; #kg/h

    "Vazão de mel"

    EntMel.F*EntMel.dens+EntAgua.F*EntAgua.dens=Jvap; #kg/h

    "Vazão de água"

    EntAgua.F=0*'m^3/h'; #m^3/h

else

    "Vazão de vapor"
```

EntVapor.F=0.36*EntVapor.Fmax; #kg/h

"Vazão de mel"

EntMel.F=0*'m^3/h'; #m³/h

"Vazão de água"

EntAgua.F=0*'m^3/h'; #m³/h

end

"Vazão de saída"

SaiMassa.F=0*'m^3/h'; #m³/h

"Cristalização"

diff(mi0)=0*'1/s';

diff(mi1)=0*'1/s';

diff(mi2)=0*'1/s';

diff(mi3)=0*'1/s';

diff(mi4)=0*'1/s';

diff(mi5)=0*'1/s';

Dg=0*'m/s'; #m/s

B0=0; # #/s

G=0.000000000001*'m/s'; #m/s

"Taxa de cristalização"

Jcris=0*'kg/h'; #kg/h

"Taxa de vaporização"

$$J_{\text{vap}} = \text{EntVapor} \cdot Q / \Delta H_v + K_{\text{vap}} \cdot \text{kg/h/K} \cdot (T_C \cdot K - T_{\text{sat}} - \text{EPE}); \text{ #kg/h}$$

when time < 1200 * 's' switchto "PréEnchimento";

when time > 1500 * 's' switchto "Semeadura";

case "Semeadura":

"Vazão de vapor"

$$\text{EntVapor.F} = 0.06 \cdot \text{EntVapor.Fmax}; \text{ #kg/h}$$

"Vazão de mel"

$$\text{EntMel.F} = 0 \cdot \text{m}^3/\text{h}; \text{ #m}^3/\text{h}$$

"Vazão de água"

$$\text{EntAgua.F} = 0 \cdot \text{m}^3/\text{h}; \text{ #m}^3/\text{h}$$

"Vazão de saída"

$$\text{SaiMassa.F} = 0 \cdot \text{m}^3/\text{h}; \text{ #m}^3/\text{h}$$

"Cristalização"

$$\text{diff}(mi_0) = B_0 \cdot 1/\text{s};$$

$$\text{diff}(mi_1) = (G \cdot mi_0 + D_g \cdot B_0 / G \cdot \text{m/s}) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(mi_2) = (2 \cdot G \cdot mi_1 + 2 \cdot D_g \cdot mi_0) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(mi_3) = (3 \cdot G \cdot mi_2 + 6 \cdot D_g \cdot mi_1) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(mi_4) = (4 \cdot G \cdot mi_3 + 12 \cdot D_g \cdot mi_2) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(mi_5) = (5 \cdot G \cdot mi_4 + 20 \cdot D_g \cdot mi_3) \cdot 1/\text{m};$$

$$D_g = K_{dg} \cdot (2 \cdot \text{pur}/100 - 1) \cdot G; \text{ #m/s}$$

$$B_0 \cdot \text{m}^{1.92} / \text{s}^{0.51} = V \cdot K_n \cdot 2.894 \cdot 10^{12} \cdot (G^{0.51}) \cdot ((mi_3/V)^{0.53}); \text{ # #/s}$$

$$G = K_g * m/s * \exp(-57000 * K' / (8.314 * T)) * (S-1) * \exp(-8 * (1 - pur/100)) * (1 + 2 * V_c/V);$$

#m/s

"Taxa de cristalização"

$$J_{cris} = K_v * m^3 * denc * diff(mi3); \text{ #kg/h}$$

"Taxa de vaporização"

$$J_{vap} = EntVapor.Q / \Delta H_v + K_{vap} * \text{kg/h/K}' * (TC * K' - T_{sat} - EPE); \text{ #kg/h}$$

when time < 1500 * 's' switchto "Concentração";

when time > 1800 * 's' switchto "Enchimento";

case "Enchimento":

"Vazão de vapor"

$$EntVapor.F = 0.12 * EntVapor.F_{max}; \text{ #kg/h}$$

"Vazão de mel"

$$EntMel.F = 44 * m^3/h'; \text{ #m}^3/h$$

"Vazão de água"

$$EntAgua.F = 0.8 * m^3/h'; \text{ #m}^3/h$$

"Vazão de saída"

$$SaiMassa.F = 0 * m^3/h'; \text{ #m}^3/h$$

"Cristalização"

$$diff(mi0) = B_0 * 1/s';$$

$$diff(mi1) = (G * mi0 + D_g * B_0 / G * m/s') * 1/m';$$

$$diff(mi2) = (2 * G * mi1 + 2 * D_g * mi0) * 1/m';$$

$$diff(mi3) = (3 * G * mi2 + 6 * D_g * mi1) * 1/m';$$

$$\text{diff(mi4)}=(4*G*mi3+12*Dg*mi2)*1/m';$$

$$\text{diff(mi5)}=(5*G*mi4+20*Dg*mi3)*1/m';$$

$$Dg=Kdg*(2*pur/100-1)*G; \#m/s$$

$$B0*m^{1.92}/s^{0.51}=V*Kn*2.894e12*(G^{(0.51)})*((mi3/V)^{(0.53)}); \# \#/s$$

$$G=Kg*m/s'*exp(-57000*K'/(8.314*T))*(S-1)*exp(-8*(1-pur/100))*(1+2*Vc/V);$$

#m/s

"Taxa de cristalização"

$$Jcris=Kv*m^3*dense*diff(mi3); \#kg/h$$

"Taxa de vaporização"

$$Jvap=EntVapor.Q/deltaHv+Kvap*kg/h/K'*(TC*K'-Tsat-EPE); \#kg/h$$

when time<1800*'s' switchto "Semeadura";

when time>5300*'s' switchto "Corte1";

case "Corte1":

"Vazão de vapor"

$$EntVapor.F=0.12*EntVapor.Fmax; \#kg/h$$

"Vazão de mel"

$$EntMel.F=44*m^3/h'; \#m^3/h$$

"Vazão de água"

$$EntAgua.F=0.2*m^3/h'; \#m^3/h$$

"Vazão de saída"

$$SaiMassa.F=0*m^3/h'; \#m^3/h$$

"Cristalização"

$$\text{diff}(\text{mi}0)=B0*1/s';$$

$$\text{diff}(\text{mi}1)=(G*\text{mi}0+Dg*B0/G*'m/s')*1/m';$$

$$\text{diff}(\text{mi}2)=(2*G*\text{mi}1+2*Dg*\text{mi}0)*1/m';$$

$$\text{diff}(\text{mi}3)=(3*G*\text{mi}2+6*Dg*\text{mi}1)*1/m';$$

$$\text{diff}(\text{mi}4)=(4*G*\text{mi}3+12*Dg*\text{mi}2)*1/m';$$

$$\text{diff}(\text{mi}5)=(5*G*\text{mi}4+20*Dg*\text{mi}3)*1/m';$$

$$Dg=Kdg*(2*\text{pur}/100-1)*G; \#m/s$$

$$B0*'m^1.92/s^0.51'=V*Kn*2.894e12*(G^{(0.51)})*((\text{mi}3/V)^{(0.53)}); \# \#/s$$

$$G=Kg*'m/s'*\exp(-57000*'K'/(8.314*T))*(S-1)*\exp(-8*(1-\text{pur}/100))*(1+2*Vc/V);$$

#m/s

"Taxa de cristalização"

$$J_{\text{cris}}=Kv*'m^3'*\text{densc}*\text{diff}(\text{mi}3); \#kg/h$$

"Taxa de vaporização"

$$J_{\text{vap}}=\text{EntVapor}.Q/\text{deltaHv}+K_{\text{vap}}*'kg/h/K'*(TC*'K'-T_{\text{sat}}-EPE); \#kg/h$$

when time<5300*'s' switchto "Enchimento";

when time>10700*'s' switchto "Corte2";

case "Corte2":

"Vazão de vapor"

$$\text{EntVapor}.F=0.44*\text{EntVapor}.F_{\text{max}}; \#kg/h$$

"Vazão de mel"

$$\text{EntMel}.F=50*'m^3/h'; \#m^3/h$$

"Vazão de água"

$$\text{EntAgua.F}=0.2 \cdot \text{m}^3/\text{h}; \# \text{m}^3/\text{h}$$

"Vazão de saída"

$$\text{SaiMassa.F}=0 \cdot \text{m}^3/\text{h}; \# \text{m}^3/\text{h}$$

"Cristalização"

$$\text{diff}(\text{mi}0)=\text{B}0 \cdot 1/\text{s};$$

$$\text{diff}(\text{mi}1)=(\text{G} \cdot \text{mi}0 + \text{Dg} \cdot \text{B}0 / \text{G} \cdot \text{m}/\text{s}) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(\text{mi}2)=(2 \cdot \text{G} \cdot \text{mi}1 + 2 \cdot \text{Dg} \cdot \text{mi}0) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(\text{mi}3)=(3 \cdot \text{G} \cdot \text{mi}2 + 6 \cdot \text{Dg} \cdot \text{mi}1) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(\text{mi}4)=(4 \cdot \text{G} \cdot \text{mi}3 + 12 \cdot \text{Dg} \cdot \text{mi}2) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(\text{mi}5)=(5 \cdot \text{G} \cdot \text{mi}4 + 20 \cdot \text{Dg} \cdot \text{mi}3) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{Dg}=\text{Kd}g \cdot (2 \cdot \text{pur}/100 - 1) \cdot \text{G}; \# \text{m}/\text{s}$$

$$\text{B}0 \cdot \text{m}^{1.92}/\text{s}^{0.51} = \text{V} \cdot \text{Kn} \cdot 2.894 \cdot 10^{12} \cdot (\text{G}^{0.51}) \cdot ((\text{mi}3/\text{V})^{0.53}); \# \#/\text{s}$$

$$\text{G}=\text{Kg} \cdot \text{m}/\text{s} \cdot \exp(-57000 \cdot \text{K}'/(8.314 \cdot \text{T})) \cdot (\text{S}-1) \cdot \exp(-8 \cdot (1-\text{pur}/100)) \cdot (1+2 \cdot \text{Vc}/\text{V});$$

#m/s

"Taxa de cristalização"

$$\text{Jcris}=\text{Kv} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{densc} \cdot \text{diff}(\text{mi}3); \# \text{kg}/\text{h}$$

"Taxa de vaporização"

$$\text{Jvap}=\text{EntVapor.Q}/\text{deltaHv} + \text{Kvap} \cdot \text{kg}/\text{h}/\text{K}' \cdot (\text{TC} \cdot \text{K}' - \text{Ts}at - \text{EPE}); \# \text{kg}/\text{h}$$

when time < 10700 * 's' swichto "Corte1";

when time > 17000 * 's' swichto "Aperto";

case "Aperto":

"Vazão de vapor"

$$\text{EntVapor.F}=0.8*\text{EntVapor.Fmax}; \text{ \#kg/h}$$

"Vazão de mel"

$$\text{EntMel.F}=0*\text{m}^3/\text{h}; \text{ \#m}^3/\text{h}$$

"Vazão de água"

$$\text{EntAgua.F}=0*\text{m}^3/\text{h}; \text{ \#m}^3/\text{h}$$

"Vazão de saída"

$$\text{SaiMassa.F}=0*\text{m}^3/\text{h}; \text{ \#m}^3/\text{h}$$

"Cristalização"

$$\text{diff(mi0)}=B0*1/\text{s};$$

$$\text{diff(mi1)}=(G*mi0+Dg*B0/G*\text{m/s})*1/\text{m};$$

$$\text{diff(mi2)}=(2*G*mi1+2*Dg*mi0)*1/\text{m};$$

$$\text{diff(mi3)}=(3*G*mi2+6*Dg*mi1)*1/\text{m};$$

$$\text{diff(mi4)}=(4*G*mi3+12*Dg*mi2)*1/\text{m};$$

$$\text{diff(mi5)}=(5*G*mi4+20*Dg*mi3)*1/\text{m};$$

$$Dg=Kdg*(2*\text{pur}/100-1)*G; \text{ \#m/s}$$

$$B0*\text{m}^{1.92}/\text{s}^{0.51}=V*Kn*2.894e12*(G^{0.51})*((mi3/V)^{0.53}); \text{ \# \#s}$$

$$G=Kg*\text{m/s}*\exp(-57000*K'/(8.314*T))*(S-1)*\exp(-8*(1-\text{pur}/100))*(1+2*Vc/V);$$

#m/s

"Taxa de cristalização"

$$J_{\text{cris}}=Kv*\text{m}^3*\text{densc}*\text{diff(mi3)}; \text{ \#kg/h}$$

"Taxa de vaporização"

$$J_{\text{vap}}=\text{EntVapor.Q}/\text{deltaHv}+K_{\text{vap}}*\text{kg/h/K}'*(TC*K'-T_{\text{sat}}-EPE); \text{ \#kg/h}$$

when time<17000*'s' switchto "Corte2";

when time>18680*'s' switchto "Descarga";

case "Descarga":

"Vazão de vapor"

EntVapor.F=0*EntVapor.Fmax; #kg/h

"Vazão de mel"

EntMel.F=0*'m^3/h'; #m^3/h

"Vazão de água"

EntAgua.F=0*'m^3/h'; #m^3/h

"Vazão de saída"

SaiMassa.F=536*'m^3/h'; #m^3/h

"Cristalização"

diff(mi0)=0*'1/s';

diff(mi1)=0*'1/s';

diff(mi2)=0*'1/s';

diff(mi3)=0*'1/s';

diff(mi4)=0*'1/s';

diff(mi5)=0*'1/s';

Dg=0*'m/s'; #m/s

B0=0; # #/s

G=0.000000000001*'m/s'; #m/s

"Taxa de cristalização"

$J_{cris}=0 \text{ kg/h}; \# \text{kg/h}$

"Taxa de vaporização"

$J_{vap}=0 \text{ kg/h}; \# \text{kg/h}$

when time < 18680*s' switchto "Aperto";

when time > 19880*s' switchto "Espera";

case "Espera":

"Vazão de vapor"

$EntVapor.F=0 \text{ EntVapor.Fmax}; \# \text{kg/h}$

"Vazão de mel"

$EntMel.F=0 \text{ m}^3/\text{h}; \# \text{m}^3/\text{h}$

"Vazão de água"

$EntAgua.F=0 \text{ m}^3/\text{h}; \# \text{m}^3/\text{h}$

"Vazão de saída"

$SaiMassa.F=0 \text{ m}^3/\text{h}; \# \text{m}^3/\text{h}$

"Cristalização"

$diff(mi0)=0 \text{ 1/s};$

$diff(mi1)=0 \text{ 1/s};$

$diff(mi2)=0 \text{ 1/s};$

$diff(mi3)=0 \text{ 1/s};$

$diff(mi4)=0 \text{ 1/s};$

```

diff(mi5)=0*'1/s';

Dg=0*'m/s'; #m/s

B0=0; # #/s

G=0.000000000001*'m/s'; #m/s

"Taxa de cristalização"

Jcris=0*'kg/h'; #kg/h

"Taxa de vaporização"

Jvap=0*'kg/h'; #kg/h

when time<19880*'s' swichto "Descarga";

end

"Pressão em bar"

Pbar=P*1.01325*'1/atm'; #bar

"Temperatura em °C"

TC=T*'1/K'-273.15; #°C

"Volume de solução/suspensão"

V=M/dens+Mc/densc; #m³

"Massa de solução"

M=Msac+Mimp+Mw; #kg total

"Massa de sacarose"

diff(Msac)=EntMel.F*EntMel.dens*EntMel.bx/100*EntMel.pur/100-Jcris-
SaiMassa.F*SaiMassa.densm*(1-SaiMassa.Wc/100)*SaiMassa.bx/100*SaiMassa.pur/100;
#kg/h

```

"Massa de impurezas"

$$\text{diff}(M_{\text{imp}}) = \text{EntMel.F} * \text{EntMel.dens} * \text{EntMel.bx} / 100 * (1 - \text{EntMel.pur} / 100) - \text{SaiMassa.F} * \text{SaiMassa.densm} * (1 - \text{SaiMassa.Wc} / 100) * \text{SaiMassa.bx} / 100 * (1 - \text{SaiMassa.pur} / 100); \# \text{kg/h}$$

"Massa de água"

$$\text{diff}(M_w) = \text{EntMel.F} * \text{EntMel.dens} * (1 - \text{EntMel.bx} / 100) + \text{EntAgua.F} * \text{EntAgua.dens} - \text{Jvapor} - \text{SaiMassa.F} * \text{SaiMassa.densm} * (1 - \text{SaiMassa.Wc} / 100) * (1 - \text{SaiMassa.bx} / 100); \# \text{kg/h}$$

"Massa de cristais"

$$\text{diff}(M_c) = \text{Jcris} - \text{SaiMassa.F} * \text{SaiMassa.densm} * \text{SaiMassa.Wc} / 100; \# \text{kg/h}$$

"Balanço de energia"

$$\begin{aligned} (M * C_p + M_c * C_{pc}) * \text{diff}(TC) = & \text{EntVapor.Q} * 1 / K' + \text{EntMel.F} * \text{EntMel.dens} * \text{EntMel.H} * 1 / \\ & K' + \text{EntAgua.F} * \text{EntAgua.dens} * \text{EntAgua.H} * 1 / K' - \text{Jvapor} * H_v * 1 / K' - \\ & \text{SaiMassa.F} * \text{SaiMassa.densm} * ((1 - \\ & \text{SaiMassa.Wc} / 100) * \text{SaiMassa.H} + \text{SaiMassa.Wc} / 100 * \text{SaiMassa.Hc}) * 1 / K' - \\ & H * (\text{diff}(M_{\text{sac}}) + \text{diff}(M_{\text{imp}}) + \text{diff}(M_w)) * 1 / K' - H_c * \text{diff}(M_c) * 1 / K' - ((- \\ & 2970 * TC + 461 * \text{pur} / 100 * TC + 7.5 * TC^2) / 1000) * ((1 - \\ & \text{bx} / 100) * (\text{diff}(M_{\text{sac}}) + \text{diff}(M_{\text{imp}})) * \text{kJ/kg/K}' - (\text{bx} / 100) * (\text{diff}(M_w)) * \text{kJ/kg/K}' - \\ & (1 / (\text{bx} / 100)) * ((461 * (\text{bx} / 100) * TC) / 1000) * ((1 - \text{pur} / 100) * (\text{diff}(M_{\text{sac}})) * \text{kJ/kg/K}' - \\ & (\text{pur} / 100) * (\text{diff}(M_{\text{imp}})) * \text{kJ/kg/K}'))); \# \text{kJ/h} \end{aligned}$$

"Entalpia de vaporização da água"

$$\text{deltaH}_v = (2263280 * \text{kJ/kg}' - 58210 * \text{kJ/kg}' * \ln(\text{Pbar})) / 1000; \# \text{kJ/kg}$$

"Entalpia do vapor gerado dentro do cozedor"

$$H_v = (1766.07 * (99.65 + 27.55 * \ln(\text{Pbar}) + 1.8 * \ln(\text{Pbar})^2) + 2501800) / 1000 * \text{kJ/kg}'; \# \text{kJ/kg}$$

"Calor específico da solução"

$$C_p = (4186.8 * \text{kJ/kg/K}' - 29.7 * \text{bx} * \text{kJ/kg/K}' + 4.61 * \text{bx} * \text{pur} / 100 * \text{kJ/kg/K}' + 0.075 * \text{bx} * (T - 273.15 * K') * \text{kJ/kg/K}^2) / 1000; \# \text{kJ/(kg}^\circ\text{C)}$$

"Entalpia da solução"

$$H=C_p*TC*'K'; \text{ #kJ/kg}$$

"Calor específico dos cristais"

$$C_{pc}=(1163.2+3.488*TC)/1000*'kJ/kg/K'; \text{ #kJ/(kg}^\circ\text{C)}$$

"Entalpia dos cristais"

$$H_c=C_{pc}*TC*'K'; \text{ #kJ/kg}$$

"Brix da solução"

$$b_x=(M_{sac}+M_{imp})/M*100; \text{ \#}\%$$

"Pureza da solução"

$$pur=M_{sac}/(M_{sac}+M_{imp})*100; \text{ \#}\%$$

"Temperatura de saturação"

$$T_{sat}*1/K'=122.551*\exp(-0.246*P_{bar})*P_{bar}^{0.413}; \text{ }^\circ\text{C}$$

"Elevação do ponto de ebulição"

$$EPE=(0.03-0.018*pur/100)*(T_{sat}+84*'K')*(b_x/(100-b_x)); \text{ }^\circ\text{C}$$

"Densidade da solução pura"

$$\text{dens_pure} = (1000+(b_x*(200+b_x)/54))*(1-0.036*((TC-20)/(160-TC)))*'kg/m^3';$$

#kg/m³

"Densidade da solução impura"

$$\text{dens} = \text{dens_pure}+1000*(-1+\exp((-6.927e-6*b_x^2-1.164e-4*b_x)*((pur/100)-1)))*'kg/m^3'; \text{ #kg/m}^3$$

"Densidade da massa"

$$\text{densm} = \text{dens}*\text{densc}/(\text{densc}-W_c/100*(\text{densc}-\text{dens})); \text{ #kg/m}^3$$

"Fração mássica de cristais"

$$Wc = Mc / (M + Mc) * 100; \# \%$$

"Brix de saturação"

$$bxsat = 64.447 + 8.222e-2 * TC + 1.66169e-3 * TC^2 - 1.558e-6 * TC^3 - 4.63e-8 * TC^4; \# \%$$

"Parâmetro para o cálculo da supersaturação"

$$C_{sat} = (0.1 * (bx / (100 - bx)) * (1 - pur / 100) + 0.4 + 0.6 * \exp(-0.24 * (bx / (100 - bx)) * (1 - pur / 100))); \# \text{adimensional}$$

"Supersaturação"

$$S = (bx / (100 - bx)) / (bxsat * C_{sat} / (100 - bxsat)); \# \text{adimensional}$$

"Supersaturação crítica"

$$S_{-} = 1.129 - 0.284 * (1 - pur / 100) + (2.333 - 0.0709 * (TC - 60)) * (1 - pur / 100)^2; \# \text{adimensional}$$

"Volume total dos cristais"

$$Vc = Mc / \text{densc};$$

"Constante de nucleação"

$$K_n = K_{no} * \exp(C * (1 - pur / 100));$$

"Tamanho médio dos cristais"

$$AM = (mi_4 / mi_3) * 'm'; \# m$$

if time < 2000 * 's' then CV = 0.4;

else

$$CV = (((mi_3 * mi_5) / (mi_4^2 - 1))^{(1/2)}) * 100; \# \%$$

end

"Desvio padrão"

DP=AM*CV/100; #m

"Mistura perfeita"

SaiMassa.Wc=Wc;

SaiMassa.T=T;

SaiMassa.bx=bx;

SaiMassa.pur=pur;

SaiMassa.mi0=mi0;

SaiMassa.mi1=mi1;

SaiMassa.mi2=mi2;

SaiMassa.mi3=mi3;

SaiMassa.mi4=mi4;

SaiMassa.mi5=mi5;

end

Modelo Cristalizador B

using "types";

using "CorrenteMassa";

Model CristalizadorB

VARIABLES

h as length (Brief="Altura do cristalizador", Upper=3.3); #m

Ab as area (Brief="Área da base do cristalizador"); #m²

Comp as length (Brief="Comprimento da base do cristalizador"); #m

Larg as length (Brief="Largura da base do cristalizador"); #m

in EntMassa as CorrenteMassa;

out SaiMassa as CorrenteMassa;

EQUATIONS

"Área da base"

$$Ab=Comp*Larg; \#m^2$$

"Balanço de massa"

$$diff(h)=(EntMassa.F-SaiMassa.F)/(Ab); \#m$$

"Vazão de saída de massa para centrífugas"

$$SaiMassa.F=37*m^3/h; \#m^3/h$$

"Cristalizador como tanque pulmão"

$$SaiMassa.T=338.15*K; \#K$$

$$SaiMassa.Wc=40.7083; \#\%$$

$$SaiMassa.bx=79.8542; \#\%$$

$$SaiMassa.pur=52.743; \#\%$$

$$SaiMassa.mi0=1.18832e14;$$

$$SaiMassa.mi1=3.79477e9;$$

$$SaiMassa.mi2=397154;$$

$$SaiMassa.mi3=90.3649;$$

$$SaiMassa.mi4=0.0313769;$$

$$SaiMassa.mi5=1.38801e-5;$$

end

Modelo Centrífuga B

using "types";

using "CorrenteAgua";

using "CorrenteMassa";

Model CentrífugaB

VARIABLES

beta as percent (Brief="Eficiência de separação"); #%

eta as percent (Brief="Manutenção dos cristais no magma"); #%

EntAgua as CorrenteAgua (Brief="Entrada de Água");

in EntMassa as CorrenteMassa (Brief="Entrada de Massa");

out SaiMagma as CorrenteMassa (Brief="Saída de Magma");

out SaiMel as CorrenteMassa (Brief="Saída de Mel Final");

EQUATIONS

"Massa de sacarose"

$$\begin{aligned} & \text{EntMassa.F*EntMassa.densm*(1-} \\ & \text{EntMassa.Wc/100)*EntMassa.bx/100*EntMassa.pur/100*beta/100 =} \\ & \text{SaiMel.F*SaiMel.densm*(1-SaiMel.Wc/100)*SaiMel.bx/100*SaiMel.pur/100; \#kg/h} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \text{EntMassa.F*EntMassa.densm*(1-} \\ & \text{EntMassa.Wc/100)*EntMassa.bx/100*EntMassa.pur/100*(1-beta/100) =} \\ & \text{SaiMagma.F*SaiMagma.densm*(1-} \\ & \text{SaiMagma.Wc/100)*SaiMagma.bx/100*SaiMagma.pur/100; \#kg/h} \end{aligned}$$

"Massa de impurezas"

$$\text{EntMassa.F} * \text{EntMassa.densm} * (1 - \text{EntMassa.Wc}/100) * \text{EntMassa.bx}/100 * (1 - \text{EntMassa.pur}/100) * \text{beta}/100 = \text{SaiMel.F} * \text{SaiMel.densm} * (1 - \text{SaiMel.Wc}/100) * \text{SaiMel.bx}/100 * (1 - \text{SaiMel.pur}/100); \text{ \#kg/h}$$

$$\text{EntMassa.F} * \text{EntMassa.densm} * (1 - \text{EntMassa.Wc}/100) * \text{EntMassa.bx}/100 * (1 - \text{EntMassa.pur}/100) * (1 - \text{beta}/100) = \text{SaiMagma.F} * \text{SaiMagma.densm} * (1 - \text{SaiMagma.Wc}/100) * \text{SaiMagma.bx}/100 * (1 - \text{SaiMagma.pur}/100); \text{ \#kg/h}$$

"Massa de água"

$$\text{EntMassa.F} * \text{EntMassa.densm} * (1 - \text{EntMassa.Wc}/100) * (1 - \text{EntMassa.bx}/100) * \text{beta}/100 + \text{EntAgua.F} * \text{EntAgua.dens} = \text{SaiMel.F} * \text{SaiMel.densm} * (1 - \text{SaiMel.Wc}/100) * (1 - \text{SaiMel.bx}/100); \text{ \#kg/h}$$

$$\text{EntMassa.F} * \text{EntMassa.densm} * (1 - \text{EntMassa.Wc}/100) * (1 - \text{EntMassa.bx}/100) * (1 - \text{beta}/100) = \text{SaiMagma.F} * \text{SaiMagma.densm} * (1 - \text{SaiMagma.Wc}/100) * (1 - \text{SaiMagma.bx}/100); \text{ \#kg/h}$$

"Massa de cristais"

$$\text{EntMassa.F} * \text{EntMassa.densm} * \text{EntMassa.Wc} * (1 - \text{eta}/100) = \text{SaiMel.F} * \text{SaiMel.densm} * \text{SaiMel.Wc}; \text{ \#kg/h}$$

$$\text{EntMassa.F} * \text{EntMassa.densm} * \text{EntMassa.Wc} * \text{eta}/100 = \text{SaiMagma.F} * \text{SaiMagma.densm} * \text{SaiMagma.Wc}; \text{ \#kg/h}$$

"Balanço de energia"

$$\text{EntMassa.F} * \text{EntMassa.densm} * (\text{EntMassa.Wc}/100 * \text{EntMassa.Hc} + (1 - \text{EntMassa.Wc}/100) * \text{EntMassa.H}) + \text{EntAgua.F} * \text{EntAgua.dens} * \text{EntAgua.H} = \text{SaiMagma.F} * \text{SaiMagma.densm} * (\text{SaiMagma.Wc}/100 * \text{SaiMagma.Hc} + (1 - \text{SaiMagma.Wc}/100) * \text{SaiMagma.H}) + \text{SaiMel.F} * \text{SaiMel.densm} * (\text{SaiMel.Wc}/100 * \text{SaiMel.Hc} + (1 - \text{SaiMel.Wc}/100) * \text{SaiMel.H}); \text{ \#kJ/h}$$

$$\text{SaiMagma.T} = \text{SaiMel.T}; \text{ \#K}$$

$$\text{SaiMagma.mi0} = 1.92394\text{e}7;$$

$$\text{SaiMagma.mi1} = 5.74699\text{e}3;$$

SaiMagma.mi2 = 1.89219;

SaiMagma.mi3 = 6.94875e-4;

SaiMagma.mi4 = 2.85610e-7;

SaiMagma.mi5 = 1.30696e-10;

SaiMel.mi0 = 4.25714e9;

SaiMel.mi1 = 6.28731e4;

SaiMel.mi2 = 1.93435;

SaiMel.mi3 = 1.49006e-4;

SaiMel.mi4 = 1.80296e-8;

SaiMel.mi5 = 2.57473e-12;

end

Modelo Sementeira

using "types";

using "CorrenteAgua";

using "CorrenteMassa";

Model Sementeira

VARIABLES

h as length (Brief="Altura da sementeira", Upper=2.6); #m

Ab as area (Brief="Área da base da sementeira"); #m²

Comp as length (Brief="Comprimento da base da sementeira"); #m

Larg as length (Brief="Largura da base da sementeira"); #m

T as temperature (Brief="Temperatura"); #K

TC as Real (Brief="Temperatura em °C"); #°C

M as mass (Brief="Massa de solução"); #kg

Msac as mass (Brief="Massa de sacarose"); #kg

Mimp as mass (Brief="Massa de impurezas"); #kg

Mw as mass (Brief="Massa de água"); #kg

Mc as mass (Brief="Massa de cristais"); #kg

V as volume (Brief="Volume de suspensão"); #m³

Vc as volume (Brief="Volume total dos cristais"); #m³

bx as percent (Brief="Brix"); #%

pur as percent (Brief="Pureza"); #%

Cp as cp_mass (Brief="Calor específico da solução"); #kJ/(kg°C)

H as enth_mass (Brief="Entalpia da solução"); #kJ/kg;

Cpc as cp_mass (Brief="Calor específico dos cristais"); #kJ/(kg°C)

Hc as enth_mass (Brief="Entalpia dos cristais"); #kJ/kg

dens_pure as dens_mass (Brief="Densidade da solução pura"); #kg/m³

dens as dens_mass (Brief="Densidade da solução impura"); #kg/m³

densc as dens_mass (Brief="Densidade do cristal"); #kg/m³-Input

Wc as percent (Brief="Porcentagem mássica de cristais na massa"); #%

EntAgua as CorrenteAgua (Brief="Entrada de água");

in EntMagma as CorrenteMassa;

out SaiMagma as CorrenteMassa;

EQUATIONS

"Área da base"

$$Ab=Comp*Larg; \#m^2$$

"Balanço de massa"

$$diff(h)=(EntMagma.F+EntAgua.F-SaiMagma.F)/(Ab); \#m$$

$$EntAgua.F=0.01*EntMagma.F; \#m^3/h$$

"Temperatura em °C"

$$TC=T*1/K'-273.15; \#^{\circ}C$$

"Massa de solução"

$$M=Msac+Mimp+Mw; \#kg \text{ total}$$

"Volume de solução/suspensão"

$$V=M/dens+Mc/densc; \#m^3$$

"Volume total dos cristais"

$$Vc=Mc/densc;$$

"Densidade da solução pura"

$$dens_pure = (1000+(bx*(200+bx)/54))*(1-0.036*((TC-20)/(160-TC))) * kg/m^3;$$

#kg/m³

"Densidade da solução impura"

$$dens = dens_pure+1000*(-1+exp((-6.927e-6*bx^2-1.164e-4*bx)*((pur/100)-1))) * kg/m^3; \#kg/m^3$$

"Massa de sacarose"

$$\text{diff}(\text{Msac}) = \text{EntMagma.F} * \text{EntMagma.densm} * (1 - \text{EntMagma.Wc}/100) * \text{EntMagma.bx}/100 * \text{EntMagma.pur}/100 - \text{SaiMagma.F} * \text{SaiMagma.densm} * (1 - \text{SaiMagma.Wc}/100) * \text{SaiMagma.bx}/100 * \text{SaiMagma.pur}/100; \text{ \#kg/h}$$

"Massa de impurezas"

$$\text{diff}(\text{Mimp}) = \text{EntMagma.F} * \text{EntMagma.densm} * (1 - \text{EntMagma.Wc}/100) * \text{EntMagma.bx}/100 * (1 - \text{EntMagma.pur}/100) - \text{SaiMagma.F} * \text{SaiMagma.densm} * (1 - \text{SaiMagma.Wc}/100) * \text{SaiMagma.bx}/100 * (1 - \text{SaiMagma.pur}/100); \text{ \#kg/h}$$

"Massa de água"

$$\text{diff}(\text{Mw}) = \text{EntMagma.F} * \text{EntMagma.densm} * (1 - \text{EntMagma.Wc}/100) * (1 - \text{EntMagma.bx}/100) + \text{EntAgua.F} * \text{EntAgua.dens} - \text{SaiMagma.F} * \text{SaiMagma.densm} * (1 - \text{SaiMagma.Wc}/100) * (1 - \text{SaiMagma.bx}/100); \text{ \#kg/h}$$

"Massa de cristais"

$$\text{diff}(\text{Mc}) = \text{EntMagma.F} * \text{EntMagma.densm} * \text{EntMagma.Wc}/100 - \text{SaiMagma.F} * \text{SaiMagma.densm} * \text{SaiMagma.Wc}/100; \text{ \#kg/h}$$

"Balanço de energia"

$$\begin{aligned} & (\text{M} * \text{Cp} + \text{Mc} * \text{Cpc}) * \text{diff}(\text{TC}) = \text{EntMagma.F} * \text{EntMagma.densm} * ((1 - \text{EntMagma.Wc}/100) * \text{EntMagma.H} + \text{EntMagma.Wc}/100 * \text{EntMagma.Hc}) * '1/\text{K}' + \text{EntAgua.F} * \text{EntAgua.dens} * \text{EntAgua.H} * '1/\text{K}' - \text{SaiMagma.F} * \text{SaiMagma.densm} * ((1 - \text{SaiMagma.Wc}/100) * \text{SaiMagma.H} + \text{SaiMagma.Wc}/100 * \text{SaiMagma.Hc}) * '1/\text{K}' - \\ & \text{H} * (\text{diff}(\text{Msac}) + \text{diff}(\text{Mimp}) + \text{diff}(\text{Mw})) * '1/\text{K}' - \text{Hc} * \text{diff}(\text{Mc}) * '1/\text{K}' - ((- \\ & 2970 * \text{TC} + 461 * \text{pur}/100 * \text{TC} + 7.5 * \text{TC}^2)/1000) * ((1 - \text{bx}/100) * (\text{diff}(\text{Msac}) + \text{diff}(\text{Mimp})) * \text{kJ/kg/K}' - (\text{bx}/100) * (\text{diff}(\text{Mw})) * \text{kJ/kg/K}' - \\ & (1/(\text{bx}/100)) * ((461 * (\text{bx}/100) * \text{TC})/1000) * ((1 - \text{pur}/100) * (\text{diff}(\text{Msac})) * \text{kJ/kg/K}' - \\ & (\text{pur}/100) * (\text{diff}(\text{Mimp})) * \text{kJ/kg/K}')) * \text{kJ/h} \end{aligned}$$

"Calor específico da solução"

$$C_p = (4186.8 \cdot \text{kJ/kg/K} - 29.7 \cdot b_x \cdot \text{kJ/kg/K} + 4.61 \cdot b_x \cdot \text{pur}/100 \cdot \text{kJ/kg/K} + 0.075 \cdot b_x \cdot (T - 273.15 \cdot \text{K}) \cdot \text{kJ/kg/K}^2) / 1000; \# \text{kJ}/(\text{kg}^\circ\text{C})$$

"Entalpia da solução"

$$H = C_p \cdot T_C \cdot \text{K}; \# \text{kJ/kg}$$

"Calor específico dos cristais"

$$C_{pc} = (1163.2 + 3.488 \cdot T_C) / 1000 \cdot \text{kJ/kg/K}; \# \text{kJ}/(\text{kg}^\circ\text{C})$$

"Entalpia dos cristais"

$$H_c = C_{pc} \cdot T_C \cdot \text{K}; \# \text{kJ/kg}$$

"Brix da solução"

$$b_x = (M_{sac} + M_{imp}) / M \cdot 100; \# \%$$

"Pureza da solução"

$$\text{pur} = M_{sac} / (M_{sac} + M_{imp}) \cdot 100; \# \%$$

"Fração mássica de cristais"

$$W_c = M_c / (M + M_c) \cdot 100; \# \%$$

"Mistura perfeita"

$$\text{SaiMagma}.W_c = W_c;$$

$$\text{SaiMagma}.T = T;$$

$$\text{SaiMagma}.b_x = b_x;$$

$$\text{SaiMagma}.pur = pur;$$

$$\text{SaiMagma}.mi_0 = \text{EntMagma}.mi_0;$$

$$\text{SaiMagma}.mi_1 = \text{EntMagma}.mi_1;$$

$$\text{SaiMagma}.mi_2 = \text{EntMagma}.mi_2;$$

```
SaiMagma.mi3=EntMagma.mi3;
```

```
SaiMagma.mi4=EntMagma.mi4;
```

```
SaiMagma.mi5=EntMagma.mi5;
```

```
end
```

Modelo Cozimento A

```
using "types";
```

```
using "CorrenteMel";
```

```
using "CorrenteAgua";
```

```
using "CorrenteVapor";
```

```
using "CorrenteMassa";
```

```
Model CozimentoA
```

PARAMETERS

```
t_op as Switcher (Brief="Tempo de operação",
```

```
Valid=["Espera", "PréEnchimento", "Concentração", "Enchimento", "Corte 1", "Aperto", "Descar  
ga"], Default="Espera");
```

VARIABLES

```
M as mass (Brief="Massa de solução"); #kg
```

```
Msac as mass (Brief="Massa de sacarose"); #kg
```

```
Mimp as mass (Brief="Massa de impurezas"); #kg
```

```
Mw as mass (Brief="Massa de água"); #kg
```

```
Mc as mass (Brief="Massa de cristais"); #kg
```

```
V as volume (Brief="Volume de solução/suspensão", Upper=80); #m3
```

P as pressure (Brief="Pressão do cozedor em atm"); #atm-Input

Pbar as Real (Brief="Pressão do cozedor em bar"); #bar

T as temperature (Brief="Temperatura"); #K

TC as Real (Brief="Temperatura em °C"); #°C

bx as percent (Brief="Brix"); #%

pur as percent (Brief="Pureza"); #%

Kvap as positive (Brief="Parâmetro da taxa de evaporação"); #kg/(hK)-Input

Jvap as flow_mass (Brief="Taxa de vaporização"); #kg/h

Tsat as temperature (Brief="Temperatura de saturação"); #°C

bxsat as percent (Brief="Brix de saturação"); #%

Csat as positive (Brief="Parâmetro para cálculo da supersaturação"); #adimensional

S as positive (Brief="Supersaturação", Upper=1.13); #adimensional

S_ as positive (Brief="Saturação crítica"); #adimensional

Cp as cp_mass (Brief="Calor específico da solução"); #kJ/(kg°C)

H as enth_mass (Brief="Entalpia da solução"); #kJ/kg;

EPE as temp_delta (Brief="Elevação do ponto de ebulição da solução"); #°C

dens_pure as dens_mass (Brief="Densidade da solução pura"); #kg/m³

dens as dens_mass (Brief="Densidade da solução impura"); #kg/m³

densm as dens_mass (Brief="Densidade da massa"); #kg/m³

deltaHv as enth_mass (Brief="Entalpia de vaporização da água"); #kJ/kg

Hv as enth_mass (Brief="Entalpia do vapor gerado no cozedor"); #kJ/kg

Jcris as flow_mass (Brief="Taxa de cristalização"); #kg/h

densc as dens_mass (Brief="Densidade do cristal"); #kg/m³-Input

Cpc as cp_mass (Brief="Calor específico dos cristais"); #kJ/(kg°C)

Hc as enth_mass (Brief="Entalpia dos cristais"); #kJ/kg

Vc as volume (Brief="Volume total dos cristais"); #m³

mi0 as Real (Brief="Momento 0 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi1 as Real (Brief="Momento 1 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi2 as Real (Brief="Momento 2 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi3 as Real (Brief="Momento 3 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi4 as Real (Brief="Momento 4 da distribuição dos cristais"); #adimensional

mi5 as Real (Brief="Momento 5 da distribuição dos cristais"); #adimensional

B0 as Real (Brief="Taxa de nucleação"); # #/(sm³)

G as velocity (Brief="Velocidade de crescimento dos cristais"); #m/s

Dg as velocity (Brief="Difusividade da velocidade de crescimento"); #m/s

Kdg as Real (Brief="Constante de difusividade de crescimento"); #adimensional

Kg as Real (Brief="Constante de crescimento"); #adimensional-Input

Kv as Real (Brief="Fator volumétrico"); #adimensional-Input

Kn as Real (Brief="Constante de nucleação"); #adimensional - Input

Kno as Real (Brief="Parâmetro da equação da constante de nucleação"); #adimensional -
Input

C as Real (Brief="Parâmetro da equação da constante de nucleação"); #adimensional - Input

CV as positive (Brief="Coeficiente de variação"); #%

AM as length (Brief="Tamanho médio dos cristais"); #m

DP as length (Brief="Desvio padrão"); #m

Wc as percent (Brief="Porcentagem mássica de cristais na massa"); #%

EntXarope as CorrenteMel (Brief="Entrada de xarope");

EntAgua as CorrenteAgua (Brief="Entrada de água");

EntVapor as CorrenteVapor (Brief="Entrada de vapor");

in EntMagma as CorrenteMassa (Brief="Entrada de magma");

out SaiMassa as CorrenteMassa (Brief="Saída de massa");

EQUATIONS

switch t_op

case "Espera":

"Vazão de vapor"

EntVapor.F=0*EntVapor.Fmax; #kg/h

"Vazão de magma"

EntMagma.F=0.0000000001*'m^3/h'; #m³/h

"Vazão de xarope"

EntXarope.F=0*'m^3/h'; #m³/h

"Vazão de água"

EntAgua.F=0*'m^3/h'; #m³/h

"Vazão de saída"

SaiMassa.F=0*'m^3/h'; #m³/h

"Cristalização"

diff(mi0)=0*'1/s';

diff(mi1)=0*'1/s';

diff(mi2)=0*'1/s';

diff(mi3)=0*'1/s';

diff(mi4)=0*'1/s';

diff(mi5)=0*'1/s';

Dg=0*'m/s'; #m/s

B0=0; # #/s

G=0.000000000001*'m/s'; #m/s

"Taxa de cristalização"

Jcris=0*'kg/h'; #kg/h

"Taxa de vaporização"

Jvap=0*'kg/h'; #kg/h

when time>2620*'s' swichto "PréEnchimento";

case "PréEnchimento":

"Vazão de vapor"

EntVapor.F=0*EntVapor.Fmax; #kg/h

"Vazão de magma"

EntMagma.F=42*'m^3/h'; #m^3/h

"Vazão de xarope"

EntXarope.F=0*'m^3/h'; #m³/h

"Vazão de água"

EntAgua.F=0*'m^3/h'; #m³/h

"Vazão de saída"

SaiMassa.F=0*'m^3/h'; #m³/h

"Cristalização"

diff(mi0)=0*'1/s';

diff(mi1)=0*'1/s';

diff(mi2)=0*'1/s';

diff(mi3)=0*'1/s';

diff(mi4)=0*'1/s';

diff(mi5)=0*'1/s';

Dg=0*'m/s'; #m/s

B0=0; # #/s

G=0.000000000001*'m/s'; #m/s

"Taxa de cristalização"

Jcris=0*'kg/h'; #kg/h

"Taxa de vaporização"

Jvap=0*'kg/h'; #kg/h

when time<2620*'s' switchto "Espera";

when time>3820*'s' switchto "Concentração";

case "Concentração":

if $S < 1.06$ then

"Vazão de vapor"

$\text{EntVapor.F} = 0.06 * \text{EntVapor.Fmax}$; #kg/h

"Vazão de magma"

$\text{EntMagma.F} = 0 * \text{m}^3/\text{h}$; #m³/h

"Vazão de xarope"

$\text{EntXarope.F} * \text{EntXarope.dens} + \text{EntAgua.F} * \text{EntAgua.dens} = \text{Jvap}$; #kg/h

"Vazão de água"

$\text{EntAgua.F} = 0 * \text{m}^3/\text{h}$; #m³/h

else

"Vazão de vapor"

$\text{EntVapor.F} = 0.02 * \text{EntVapor.Fmax}$; #kg/h

"Vazão de magma"

$\text{EntMagma.F} = 0 * \text{m}^3/\text{h}$; #m³/h

"Vazão de xarope"

$\text{EntXarope.F} = 0 * \text{m}^3/\text{h}$; #m³/h

"Vazão de água"

$\text{EntAgua.F} = 0 * \text{m}^3/\text{h}$; #m³/h

end

"Vazão de saída"

$$\text{SaiMassa.F}=0 \cdot \text{m}^3/\text{h}; \# \text{m}^3/\text{h}$$

"Cristalização"

$$\text{diff}(\text{mi}0)=\text{B}0 \cdot 1/\text{s};$$

$$\text{diff}(\text{mi}1)=(\text{G} \cdot \text{mi}0 + \text{Dg} \cdot \text{B}0/\text{G} \cdot \text{m}/\text{s}) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(\text{mi}2)=(2 \cdot \text{G} \cdot \text{mi}1 + 2 \cdot \text{Dg} \cdot \text{mi}0) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(\text{mi}3)=(3 \cdot \text{G} \cdot \text{mi}2 + 6 \cdot \text{Dg} \cdot \text{mi}1) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(\text{mi}4)=(4 \cdot \text{G} \cdot \text{mi}3 + 12 \cdot \text{Dg} \cdot \text{mi}2) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(\text{mi}5)=(5 \cdot \text{G} \cdot \text{mi}4 + 20 \cdot \text{Dg} \cdot \text{mi}3) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{Dg}=\text{Kd}g \cdot (2 \cdot \text{pur}/100 - 1) \cdot \text{G}; \# \text{m}/\text{s}$$

if $S < 1$ then

$$\text{B}0=0;$$

$$\text{G}=0.000000000001 \cdot \text{m}/\text{s};$$

else

$$\text{B}0 \cdot \text{m}^{1.92}/\text{s}^{0.51} = \text{V} \cdot \text{K}n \cdot 2.894e12 \cdot (\text{G}^{0.51}) \cdot ((\text{mi}3/\text{V})^{0.53}); \# \#/\text{s}$$

$$\text{G}=\text{K}g \cdot \text{m}/\text{s} \cdot \exp(-57000 \cdot \text{K}'/(8.314 \cdot \text{T})) \cdot (\text{S}-1) \cdot \exp(-8 \cdot (1-\text{pur}/100)) \cdot (1+2 \cdot \text{V}c/\text{V});$$

#m/s

end

"Taxa de cristalização"

$$\text{Jcris}=\text{K}v \cdot \text{m}^3 \cdot \text{densc} \cdot \text{diff}(\text{mi}3); \# \text{kg}/\text{h}$$

"Taxa de vaporização"

$$\text{Jvap}=\text{EntVapor.Q}/\text{deltaHv} + \text{Kvap} \cdot \text{kg}/\text{h}/\text{K}' \cdot (\text{TC} \cdot \text{K}' - \text{Tsat} - \text{EPE}); \# \text{kg}/\text{h}$$

when $\text{time} < 3820 \cdot \text{s}$ switchto "PréEnchimento";

when time>4420*'s' switchto "Enchimento";

case "Enchimento":

"Vazão de vapor"

EntVapor.F=0.28*EntVapor.Fmax; #kg/h

"Vazão de magma"

EntMagma.F=0*'m^3/h'; #m³/h

"Vazão de xarope"

EntXarope.F=26*'m^3/h'; #m³/h

"Vazão de água"

EntAgua.F=0.2*'m^3/h'; #m³/h

"Vazão de saída"

SaiMassa.F=0*'m^3/h'; #m³/h

"Cristalização"

diff(mi0)=B0*'1/s';

diff(mi1)=(G*mi0+Dg*B0/G*'m/s')*'1/m';

diff(mi2)=(2*G*mi1+2*Dg*mi0)'1/m';

diff(mi3)=(3*G*mi2+6*Dg*mi1)'1/m';

diff(mi4)=(4*G*mi3+12*Dg*mi2)'1/m';

diff(mi5)=(5*G*mi4+20*Dg*mi3)'1/m';

Dg=Kdg*(2*pur/100-1)*G; #m/s

B0*'m^1.92/s^0.51'=V*Kn*2.894e12*(G^(0.51))*((mi3/V)^(0.53)); # #/s

$G = K_g \cdot m/s \cdot \exp(-57000 \cdot K' / (8.314 \cdot T)) \cdot (S-1) \cdot \exp(-8 \cdot (1 - \text{pur}/100)) \cdot (1 + 2 \cdot V_c/V);$
 #m/s

"Taxa de cristalização"

$J_{\text{cris}} = K_v \cdot m^3 \cdot \text{densc} \cdot \text{diff}(mi3);$ #kg/h

"Taxa de vaporização"

$J_{\text{vap}} = \text{EntVapor.Q} / \Delta H_v + K_{\text{vap}} \cdot \text{kg/h/K}' \cdot (T_C \cdot K' - T_{\text{sat}} - \text{EPE});$ #kg/h

when time < 4420 * 's' switchto "Concentração";

when time > 9820 * 's' switchto "Corte1";

case "Corte1":

"Vazão de vapor"

$\text{EntVapor.F} = 0.40 \cdot \text{EntVapor.Fmax};$ #kg/h

"Vazão de magma"

$\text{EntMagma.F} = 0 \cdot m^3/h';$ #m³/h

"Vazão de xarope"

$\text{EntXarope.F} = 28 \cdot m^3/h';$ #m³/h

"Vazão de água"

$\text{EntAgua.F} = 0.2 \cdot m^3/h';$ #m³/h

"Vazão de saída"

$\text{SaiMassa.F} = 0 \cdot m^3/h';$ #m³/h

"Cristalização"

$\text{diff}(mi0) = B0 \cdot 1/s';$

$\text{diff}(mi1) = (G \cdot mi0 + Dg \cdot B0 / G \cdot m/s)' \cdot 1/m';$

$$\text{diff}(\text{mi}2)=(2*G*\text{mi}1+2*Dg*\text{mi}0)*1/m';$$

$$\text{diff}(\text{mi}3)=(3*G*\text{mi}2+6*Dg*\text{mi}1)*1/m';$$

$$\text{diff}(\text{mi}4)=(4*G*\text{mi}3+12*Dg*\text{mi}2)*1/m';$$

$$\text{diff}(\text{mi}5)=(5*G*\text{mi}4+20*Dg*\text{mi}3)*1/m';$$

$$Dg=Kdg*(2*\text{pur}/100-1)*G; \text{ #m/s}$$

$$B0*m^{1.92}/s^{0.51}=V*Kn*2.894e12*(G^{0.51})*((\text{mi}3/V)^{0.53}); \text{ # #/s}$$

$$G=Kg*m/s'*\exp(-57000*K'/(8.314*T))*(S-1)*\exp(-8*(1-\text{pur}/100))*(1+2*Vc/V);$$

#m/s

"Taxa de cristalização"

$$J\text{cris}=Kv*m^3*\text{densc}*\text{diff}(\text{mi}3); \text{ #kg/h}$$

"Taxa de vaporização"

$$J\text{vap}=\text{EntVapor}.Q/\text{deltaHv}+K\text{vap}*kg/h/K'*(TC*K'-T\text{sat}-EPE); \text{ #kg/h}$$

when time<9820*s' switchto "Enchimento";

when time>18120*s' switchto "Aperto";

case "Aperto":

"Vazão de vapor"

$$\text{EntVapor}.F=0.52*\text{EntVapor}.F\text{max}; \text{ #kg/h}$$

"Vazão de magma"

$$\text{EntMagma}.F=0*m^3/h'; \text{ #m}^3/h$$

"Vazão de xarope"

$$\text{EntXarope}.F=0*m^3/h'; \text{ #m}^3/h$$

"Vazão de água"

$$\text{EntAgua.F}=0 \cdot \text{m}^3/\text{h}; \# \text{m}^3/\text{h}$$

"Vazão de saída"

$$\text{SaiMassa.F}=0 \cdot \text{m}^3/\text{h}; \# \text{m}^3/\text{h}$$

"Cristalização"

$$\text{diff}(\text{mi}0)=\text{B}0 \cdot 1/\text{s};$$

$$\text{diff}(\text{mi}1)=(\text{G} \cdot \text{mi}0 + \text{Dg} \cdot \text{B}0 / \text{G} \cdot \text{m}/\text{s}) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(\text{mi}2)=(2 \cdot \text{G} \cdot \text{mi}1 + 2 \cdot \text{Dg} \cdot \text{mi}0) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(\text{mi}3)=(3 \cdot \text{G} \cdot \text{mi}2 + 6 \cdot \text{Dg} \cdot \text{mi}1) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(\text{mi}4)=(4 \cdot \text{G} \cdot \text{mi}3 + 12 \cdot \text{Dg} \cdot \text{mi}2) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{diff}(\text{mi}5)=(5 \cdot \text{G} \cdot \text{mi}4 + 20 \cdot \text{Dg} \cdot \text{mi}3) \cdot 1/\text{m};$$

$$\text{Dg}=\text{Kd}g \cdot (2 \cdot \text{pur}/100 - 1) \cdot \text{G}; \# \text{m}/\text{s}$$

$$\text{B}0 \cdot \text{m}^{1.92}/\text{s}^{0.51} = \text{V} \cdot \text{Kn} \cdot 2.894 \cdot 10^{12} \cdot (\text{G}^{0.51}) \cdot ((\text{mi}3/\text{V})^{0.53}); \# \#/\text{s}$$

$$\text{G}=\text{K}g \cdot \text{m}/\text{s} \cdot \exp(-57000 \cdot \text{K}'/(8.314 \cdot \text{T})) \cdot (\text{S}-1) \cdot \exp(-8 \cdot (1-\text{pur}/100)) \cdot (1+2 \cdot \text{Vc}/\text{V});$$

#m/s

"Taxa de cristalização"

$$\text{Jcris}=\text{Kv} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{densc} \cdot \text{diff}(\text{mi}3); \# \text{kg}/\text{h}$$

"Taxa de vaporização"

$$\text{Jvap}=\text{EntVapor.Q}/\text{deltaHv} + \text{Kvap} \cdot \text{kg}/\text{h}/\text{K}' \cdot (\text{TC} \cdot \text{K}' - \text{Ts}at - \text{EPE}); \# \text{kg}/\text{h}$$

when time < 18120 * 's' swichto "Corte1";

when time > 19020 * 's' swichto "Descarga";

case "Descarga":

"Vazão de vapor"

EntVapor.F=0*EntVapor.Fmax; #kg/h

"Vazão de magma"

EntMagma.F=0*'m^3/h'; #m³/h

"Vazão de xarope"

EntXarope.F=0*'m^3/h'; #m³/h

"Vazão de água"

EntAgua.F=0*'m^3/h'; #m³/h

"Vazão de saída"

SaiMassa.F=218*'m^3/h'; #m³/h

"Cristalização"

diff(mi0)=0*'1/s';

diff(mi1)=0*'1/s';

diff(mi2)=0*'1/s';

diff(mi3)=0*'1/s';

diff(mi4)=0*'1/s';

diff(mi5)=0*'1/s';

Dg=0*'m/s'; #m/s

B0=0; # #/s

G=0.000000000001*'m/s'; #m/s

"Taxa de cristalização"

Jcris=0*'kg/h'; #kg/h

"Taxa de vaporização"

$$J_{\text{vap}}=0 \cdot \text{kg/h}; \# \text{kg/h}$$

when time < 19020 * 's' switch to "Aperto";

end

"Pressão em bar"

$$P_{\text{bar}}=P \cdot 1.01325 \cdot 1/\text{atm}; \# \text{bar}$$

"Temperatura em °C"

$$TC=T \cdot 1/\text{K} - 273.15; \# \text{°C}$$

"Volume de solução/suspensão"

$$V=M/\text{dens}+M_c/\text{dens}_c; \# \text{m}^3$$

"Massa de solução"

$$M=M_{\text{sac}}+M_{\text{imp}}+M_w; \# \text{kg total}$$

"Massa de sacarose"

$$\begin{aligned} \text{diff}(M_{\text{sac}}) &= \text{EntMagma.F} \cdot \text{EntMagma.densm} \cdot (1 - \\ &\text{EntMagma.Wc}/100) \cdot \text{EntMagma.bx}/100 \cdot \text{EntMagma.pur}/100 + \text{EntXarope.F} \cdot \text{EntXarope.dens} \cdot \\ &\text{EntXarope.bx}/100 \cdot \text{EntXarope.pur}/100 - \text{Jcris-SaiMassa.F} \cdot \text{SaiMassa.densm} \cdot (1 - \\ &\text{SaiMassa.Wc}/100) \cdot \text{SaiMassa.bx}/100 \cdot \text{SaiMassa.pur}/100; \# \text{kg/h} \end{aligned}$$

"Massa de impurezas"

$$\begin{aligned} \text{diff}(M_{\text{imp}}) &= \text{EntMagma.F} \cdot \text{EntMagma.densm} \cdot (1 - \\ &\text{EntMagma.Wc}/100) \cdot \text{EntMagma.bx}/100 \cdot (1 - \\ &\text{EntMagma.pur}/100) + \text{EntXarope.F} \cdot \text{EntXarope.dens} \cdot \text{EntXarope.bx}/100 \cdot (1 - \\ &\text{EntXarope.pur}/100) - \text{SaiMassa.F} \cdot \text{SaiMassa.densm} \cdot (1 - \\ &\text{SaiMassa.Wc}/100) \cdot \text{SaiMassa.bx}/100 \cdot (1 - \text{SaiMassa.pur}/100); \# \text{kg/h} \end{aligned}$$

"Massa de água"

$$\text{diff}(M_w) = \text{EntMagma.F} * \text{EntMagma.densm} * (1 - \text{EntMagma.Wc}/100) * (1 - \text{EntMagma.bx}/100) + \text{EntXarope.F} * \text{EntXarope.dens} * (1 - \text{EntXarope.bx}/100) + \text{EntAgua.F} * \text{EntAgua.dens} - \text{Jvapor} - \text{SaiMassa.F} * \text{SaiMassa.densm} * (1 - \text{SaiMassa.Wc}/100) * (1 - \text{SaiMassa.bx}/100); \# \text{kg/h}$$

"Massa de cristais"

$$\text{diff}(M_c) = \text{EntMagma.F} * \text{EntMagma.densm} * \text{EntMagma.Wc}/100 + \text{Jcris} - \text{SaiMassa.F} * \text{SaiMassa.densm} * \text{SaiMassa.Wc}/100; \# \text{kg/h}$$

"Balanço de energia"

$$\begin{aligned} (M * C_p + M_c * C_{pc}) * \text{diff}(T_C) = & \text{EntVapor.Q} * 1/K' + \text{EntMagma.F} * \text{EntMagma.densm} * ((1 - \\ & \text{EntMagma.Wc}/100) * \text{EntMagma.H} + \text{EntMagma.Wc}/100 * \text{EntMagma.Hc}) * 1/K' + \text{EntXarope.F} * \\ & \text{EntXarope.dens} * \text{EntXarope.H} * 1/K' + \text{EntAgua.F} * \text{EntAgua.dens} * \text{EntAgua.H} * 1/K' - \\ & \text{Jvapor} * H_v * 1/K' - \text{SaiMassa.F} * \text{SaiMassa.densm} * ((1 - \\ & \text{SaiMassa.Wc}/100) * \text{SaiMassa.H} + \text{SaiMassa.Wc}/100 * \text{SaiMassa.Hc}) * 1/K' - \\ & H * (\text{diff}(M_{\text{sac}}) + \text{diff}(M_{\text{imp}}) + \text{diff}(M_w)) * 1/K' - H_c * \text{diff}(M_c) * 1/K' - ((- \\ & 2970 * T_C + 461 * \text{pur}/100 * T_C + 7.5 * T_C^2)/1000) * ((1 - \\ & \text{bx}/100) * (\text{diff}(M_{\text{sac}}) + \text{diff}(M_{\text{imp}})) * \text{kJ/kg/K}' - (\text{bx}/100) * (\text{diff}(M_w)) * \text{kJ/kg/K}' - \\ & (1/(\text{bx}/100)) * ((461 * (\text{bx}/100) * T_C)/1000) * ((1 - \text{pur}/100) * (\text{diff}(M_{\text{sac}})) * \text{kJ/kg/K}' - \\ & (\text{pur}/100) * (\text{diff}(M_{\text{imp}})) * \text{kJ/kg/K}'))); \# \text{kJ/h} \end{aligned}$$

"Entalpia de vaporização da água"

$$\text{deltaH}_v = (2263280 * \text{kJ/kg}' - 58210 * \text{kJ/kg}' * \ln(P_{\text{bar}}))/1000; \# \text{kJ/kg}$$

"Entalpia do vapor gerado dentro do cozedor"

$$H_v = (1766.07 * (99.65 + 27.55 * \ln(P_{\text{bar}}) + 1.8 * \ln(P_{\text{bar}})^2) + 2501800)/1000 * \text{kJ/kg}'; \# \text{kJ/kg}$$

"Calor específico da solução"

$$C_p = (4186.8 * \text{kJ/kg/K}' - 29.7 * \text{bx} * \text{kJ/kg/K}' + 4.61 * \text{bx} * \text{pur}/100 * \text{kJ/kg/K}' + 0.075 * \text{bx} * (T - 273.15 * \text{K}') * \text{kJ/kg/K}^2)/1000; \# \text{kJ}/(\text{kg}^\circ\text{C})$$

"Entalpia da solução"

$$H = C_p * T_C * \text{K}'; \# \text{kJ/kg}$$

"Calor específico dos cristais"

$$C_{pc} = (1163.2 + 3.488 * TC) / 1000 * 'kJ/kg/K'; \#kJ/(kg^{\circ}C)$$

"Entalpia dos cristais"

$$H_c = C_{pc} * TC * 'K'; \#kJ/kg$$

"Brix da solução"

$$b_x = (M_{sac} + M_{imp}) / M * 100; \#%$$

"Pureza da solução"

$$pur = M_{sac} / (M_{sac} + M_{imp}) * 100; \#%$$

"Temperatura de saturação"

$$T_{sat} * 1/K' = 122.551 * \exp(-0.246 * P_{bar}) * P_{bar}^{0.413}; \#^{\circ}C$$

"Elevação do ponto de ebulição"

$$EPE = (0.03 - 0.018 * pur / 100) * (T_{sat} + 84 * 'K') * (b_x / (100 - b_x)); \#^{\circ}C$$

"Densidade da solução pura"

$$dens_{pure} = (1000 + (b_x * (200 + b_x) / 54)) * (1 - 0.036 * ((TC - 20) / (160 - TC))) * 'kg/m^3'; \#kg/m^3$$

"Densidade da solução impura"

$$dens = dens_{pure} + 1000 * (-1 + \exp((-6.927e-6 * b_x^2 - 1.164e-4 * b_x) * ((pur / 100) - 1))) * 'kg/m^3'; \#kg/m^3$$

"Densidade da massa"

$$dens_m = dens * dens_c / (dens_c - W_c / 100 * (dens_c - dens)); \#kg/m^3$$

"Fração mássica de cristais"

$$W_c = M_c / (M + M_c) * 100; \#%$$

"Brix de saturação"

$$bxsat=64.447+8.222e-2*TC+1.66169e-3*TC^2-1.558e-6*TC^3-4.63e-8*TC^4; \#%$$

"Parâmetro para o cálculo da supersaturação"

$$C_{sat}=(0.1*(bx/(100-bx))*(1-pur/100)+0.4+0.6*\exp(-0.24*(bx/(100-bx))*(1-pur/100))); \#adimensional$$

"Supersaturação"

$$S=(bx/(100-bx))/(bxsat*C_{sat}/(100-bxsat)); \#adimensional$$

"Supersaturação crítica"

$$S_{-}=1.129-0.284*(1-pur/100)+(2.333-0.0709*(TC-60))*(1-pur/100)^2; \#adimensional$$

"Volume total dos cristais"

$$V_c=Mc/densc;$$

"Constante de nucleação"

$$K_n=K_{no}*\exp(C*(1-pur/100));$$

"Tamanho médio dos cristais"

$$AM=(m_4/m_3)*'m'; \#m$$

if time<2000*'s' then CV=0.4;

else

$$CV=((m_3*m_5)/(m_4^2-1))^{(1/2)}*100; \#%$$

end

"Desvio padrão"

$$DP=AM*CV/100; \#m$$

"Mistura perfeita"

```
SaiMassa.Wc=Wc;
```

```
SaiMassa.T=T;
```

```
SaiMassa.bx=bx;
```

```
SaiMassa.pur=pur;
```

```
SaiMassa.mi0=mi0;
```

```
SaiMassa.mi1=mi1;
```

```
SaiMassa.mi2=mi2;
```

```
SaiMassa.mi3=mi3;
```

```
SaiMassa.mi4=mi4;
```

```
SaiMassa.mi5=mi5;
```

```
end
```

Modelo Cristalizador A

```
using "types";
```

```
using "CorrenteMassa";
```

```
Model CristalizadorA
```

```
VARIABLES
```

```
h as length (Brief="Altura do cristalizador", Upper=2.7); #m
```

```
Ab as area (Brief="Área da base do cristalizador"); #m2
```

```
Comp as length (Brief="Comprimento da base do cristalizador"); #m
```

```
Larg as length (Brief="Largura da base do cristalizador"); #m
```

```
in EntMassa as CorrenteMassa;
```

out SaiMassa as CorrenteMassa;

EQUATIONS

"Área da base"

$$Ab=Comp*Larg; \#m^2$$

"Balanço de massa"

$$diff(h)=(EntMassa.F-SaiMassa.F)/(Ab); \#m$$

"Vazão de saída de massa para centrífugas"

$$SaiMassa.F=13*'m^3/h'; \#m^3/h$$

"Cristalizador como tanque pulmão"

$$SaiMassa.T=338.15*'K'; \#K$$

$$SaiMassa.Wc=51.1337; \\#%$$

$$SaiMassa.bx=79.066; \#%$$

$$SaiMassa.pur=71.3996; \#%$$

$$SaiMassa.mi0=1.84982e12;$$

$$SaiMassa.mi1=2.32901e8;$$

$$SaiMassa.mi2=67084.2;$$

$$SaiMassa.mi3=31.1919;$$

$$SaiMassa.mi4=0.0185524;$$

$$SaiMassa.mi5=1.26964e-5;$$

end

Modelo Centrífuga A

using "types";

using "CorrenteAgua";

using "CorrenteMassa";

Model CentrifugaA

VARIABLES

beta as percent (Brief="Eficiência de separação"); #%

eta as percent (Brief="Manutenção dos cristais no açúcar final"); #%

EntAgua as CorrenteAgua (Brief="Entrada de Água");

in EntMassa as CorrenteMassa (Brief="Entrada de Massa");

out SaiAcucar as CorrenteMassa (Brief="Saída de Açúcar");

out SaiMel as CorrenteMassa (Brief="Saída de Mel");

EQUATIONS

"Massa de sacarose"

$$\begin{aligned} & \text{EntMassa.F} * \text{EntMassa.densm} * (1 - \\ & \text{EntMassa.Wc}/100) * \text{EntMassa.bx}/100 * \text{EntMassa.pur}/100 * \text{beta}/100 = \\ & \text{SaiMel.F} * \text{SaiMel.densm} * (1 - \text{SaiMel.Wc}/100) * \text{SaiMel.bx}/100 * \text{SaiMel.pur}/100; \text{ #kg/h} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \text{EntMassa.F} * \text{EntMassa.densm} * (1 - \\ & \text{EntMassa.Wc}/100) * \text{EntMassa.bx}/100 * \text{EntMassa.pur}/100 * (1 - \text{beta}/100) = \\ & \text{SaiAcucar.F} * \text{SaiAcucar.densm} * (1 - \\ & \text{SaiAcucar.Wc}/100) * \text{SaiAcucar.bx}/100 * \text{SaiAcucar.pur}/100; \text{ #kg/h} \end{aligned}$$

"Massa de impurezas"

$$\begin{aligned} & \text{EntMassa.F} * \text{EntMassa.densm} * (1 - \text{EntMassa.Wc}/100) * \text{EntMassa.bx}/100 * (1 - \\ & \text{EntMassa.pur}/100) * \text{beta}/100 = \text{SaiMel.F} * \text{SaiMel.densm} * (1 - \\ & \text{SaiMel.Wc}/100) * \text{SaiMel.bx}/100 * (1 - \text{SaiMel.pur}/100); \text{ #kg/h} \end{aligned}$$

$$\text{EntMassa.F*EntMassa.densm*(1-EntMassa.Wc/100)*EntMassa.bx/100*(1-EntMassa.pur/100)*(1-beta/100) = SaiAcucar.F*SaiAcucar.densm*(1-SaiAcucar.Wc/100)*SaiAcucar.bx/100*(1-SaiAcucar.pur/100); \#kg/h}$$

"Massa de água"

$$\text{EntMassa.F*EntMassa.densm*(1-EntMassa.Wc/100)*(1-EntMassa.bx/100)*beta/100 + EntAgua.F*EntAgua.dens = SaiMel.F*SaiMel.densm*(1-SaiMel.Wc/100)*(1-SaiMel.bx/100); \#kg/h}$$

$$\text{EntMassa.F*EntMassa.densm*(1-EntMassa.Wc/100)*(1-EntMassa.bx/100)*(1-beta/100) = SaiAcucar.F*SaiAcucar.densm*(1-SaiAcucar.Wc/100)*(1-SaiAcucar.bx/100); \#kg/h}$$

"Massa de cristais"

$$\text{EntMassa.F*EntMassa.densm*EntMassa.Wc*(1-eta/100) = SaiMel.F*SaiMel.densm*SaiMel.Wc; \#kg/h}$$

$$\text{EntMassa.F*EntMassa.densm*EntMassa.Wc*eta/100 = SaiAcucar.F*SaiAcucar.densm*SaiAcucar.Wc; \#kg/h}$$

"Balanço de energia"

$$\text{EntMassa.F*EntMassa.densm*(EntMassa.Wc/100*EntMassa.Hc+(1-EntMassa.Wc/100)*EntMassa.H) + EntAgua.F*EntAgua.dens*EntAgua.H = SaiAcucar.F*SaiAcucar.densm*(SaiAcucar.Wc/100*SaiAcucar.Hc+(1-SaiAcucar.Wc/100)*SaiAcucar.H) + SaiMel.F*SaiMel.densm*(SaiMel.Wc/100*SaiMel.Hc+(1-SaiMel.Wc/100)*SaiMel.H); \#kJ/h}$$

$$\text{SaiAcucar.T = SaiMel.T; \#K}$$

$$\text{SaiAcucar.mi0 = 5.30371e6;}$$

$$\text{SaiAcucar.mi1 = 2.52459e3;}$$

$$\text{SaiAcucar.mi2 = 1.32266;}$$

$$\text{SaiAcucar.mi3 = 7.66089e-4;}$$

$$\text{SaiAcucar.mi4} = 4.89193\text{e-}7;$$

$$\text{SaiAcucar.mi5} = 3.41582\text{e-}10;$$

$$\text{SaiMel.mi0} = 7.45382\text{e}8;$$

$$\text{SaiMel.mi1} = 1.19964\text{e}4;$$

$$\text{SaiMel.mi2} = 5.61574\text{e-}1;$$

$$\text{SaiMel.mi3} = 7.77925\text{e-}5;$$

$$\text{SaiMel.mi4} = 1.56426\text{e-}8;$$

$$\text{SaiMel.mi5} = 3.54930\text{e-}12;$$

end

Modelo Tanque de Mel

using "types";

using "CorrenteMel";

using "CorrenteMassa";

Model TanqueMel

VARIABLES

h as length (Brief="Altura do tanque de mel", Upper=7.0); #m

Ab as area (Brief="Área da base do tanque de mel"); #m²

D as length (Brief="Diâmetro da base do tanque de mel"); #m

in EntMel as CorrenteMassa;

out SaiMel as CorrenteMel;

EQUATIONS

"Área da base"

$$Ab=3.1415*D^2/4; \#m^2$$

"Balanço de massa"

$$\text{diff}(h)=(\text{EntMel.F}-\text{SaiMel.F})/(Ab); \#m$$

"Tanque de mel como diluidor de cristais"

$$\text{SaiMel.T}=338.15*\text{K}'; \#K$$

$$\text{SaiMel.bx}=\text{EntMel.bx}/100*(100-\text{EntMel.Wc})+\text{EntMel.Wc}; \\#\%$$

$$\text{SaiMel.pur}=(\text{EntMel.pur}*\text{EntMel.bx}/100*(100-\text{EntMel.Wc})/100+\text{EntMel.Wc})/\text{SaiMel.bx}*100; \\#\%$$

end

Flowsheet Cozimento

using "ModeloCozimentoB";

using "ModeloCristalizadorB";

using "ModeloCentrifugaB";

using "ModeloSementeira";

using "ModeloCozimentoA";

using "ModeloCristalizadorA";

using "ModeloCentrifugaA";

using "ModeloTanqueMel";

FlowSheet Coz

OPTIONS

Dynamic=true;

TimeStep=10;

TimeStart=0;

TimeEnd=20220; #tf=20220

TimeUnit='s';

NLASolver(File="sundials", RelativeAccuracy=1e-3, AbsoluteAccuracy=1e-6,
MaxIterations=1000);

DAESolver(File="dassl", RelativeAccuracy=1e-3, AbsoluteAccuracy=1e-6,
EventAccuracy=1e-2);

DEVICES

CozedorB as CozimentoB;

CristalizadorB as CristalizadorB;

CentrifugaB as CentrifugaB;

Sementeira as Sementeira;

CozedorA as CozimentoA;

CristalizadorA as CristalizadorA;

CentrifugaA as CentrifugaA;

TanqueMel as TanqueMel;

CONNECTIONS

CozedorB.SaiMassa to CristalizadorB.EntMassa;

CristalizadorB.SaiMassa to CentrifugaB.EntMassa;

CentrifugaB.SaiMagma to Sementeira.EntMagma;

Sementeira.SaiMagma to CozedorA.EntMagma;

CozedorA.SaiMassa to CristalizadorA.EntMassa;

CristalizadorA.SaiMassa to CentrifugaA.EntMassa;

CentrifugaA.SaiMel to TanqueMel.EntMel;

SPECIFY

CozedorB.Pbar=0.23; #bar

CozedorB.EntVapor.Pbar=1.7; #bar

CozedorB.EntVapor.T=388.15*'K'; #K

CozedorB.EntAgua.T=363.15*'K'; #K

CozedorB.EntMel.bx=TanqueMel.SaiMel.bx; #Reciclo do mel A

CozedorB.EntMel.pur=TanqueMel.SaiMel.pur; #Reciclo do mel A

CozedorB.EntMel.T=TanqueMel.SaiMel.T; #Reciclo do mel A

CozedorB.Kvap=108; #kg/(hK)

CozedorB.EntVapor.alpha=1.02; #adimensional

CozedorB.EntVapor.Fmax=8.8*'kg/s'; #kg/s

CozedorB.densc=1580*'kg/m^3'; #kg/m³

CozedorB.Kdg=5e-5;

CozedorB.Kg=887;

CozedorB.Kv=0.75;

CozedorB.Kno=1.15e-4;

CozedorB.C=22.10;

CozedorB.SaiMassa.densc=1580*'kg/m^3'; #kg/m³

CristalizadorB.Comp=12.4*'m'; #m

CristalizadorB.Larg=7.62*'m'; #m

CristalizadorB.SaiMassa.densc=1580*'kg/m^3'; #kg/m³

CentrifugaB.beta=90; #%

CentrifugaB.eta=82.3; #%

CentrifugaB.EntAgua.F=8*'m^3/h'; #m³/h

CentrifugaB.EntAgua.T=363.15*'K'; #K

CentrifugaB.SaiMagma.densc=1580*'kg/m^3'; #kg/m³

CentrifugaB.SaiMel.densc=1580*'kg/m^3'; #kg/m³

Sementeira.Comp=15.24*'m'; #m

Sementeira.Larg=2.54*'m'; #m

Sementeira.EntAgua.T=363.15*'K'; #K

Sementeira.densc=1580*'kg/m^3'; #kg/m³

Sementeira.SaiMagma.densc=1580*'kg/m^3'; #kg/m³

CozedorA.Pbar=0.23; #bar

CozedorA.EntVapor.Pbar=1.7; #bar

CozedorA.EntVapor.T=388.15*'K'; #K

CozedorA.EntAgua.T=363.15*'K'; #K

CozedorA.EntXarope.bx=58.27; #%

CozedorA.EntXarope.pur=85.92; #%

CozedorA.EntXarope.T=338.15*'K'; #K

CozedorA.Kvap=108; #kg/h/K

CozedorA.EntVapor.alpha=1.02; #adimensional

CozedorA.EntVapor.Fmax=8.8*'kg/s'; #kg/s

CozedorA.densc=1580*'kg/m^3'; #kg/m³

CozedorA.Kdg=5e-5;

CozedorA.Kg=887;

CozedorA.Kv=0.75;

CozedorA.Kno=1.15e-4;

CozedorA.C=22.10;

CozedorA.SaiMassa.densc=1580*'kg/m^3'; #kg/m³

CristalizadorA.Comp=10.4*'m'; #m

CristalizadorA.Larg=7.62*'m'; #m

CristalizadorA.SaiMassa.densc=1580*'kg/m^3'; #kg/m³

CentrifugaA.beta=95; #%

CentrifugaA.eta=90.8; #%

CentrifugaA.EntAgua.F=0.72*'m^3/h'; #m³/h

CentrifugaA.EntAgua.T=363.15*'K'; #K

CentrifugaA.SaiAcucar.densc=1580*'kg/m^3'; #kg/m³

CentrifugaA.SaiMel.densc=1580*'kg/m^3'; #kg/m³

TanqueMel.D=6*'m'; #m

TanqueMel.SaiMel.F=CozedorB.EntMel.F; #Reciclo do mel A

INITIAL

CozedorB.T=338.15*'K'; #K

CozedorB.Msac=0.0000000001*'kg'; #kg

CozedorB.Mimp=0.0000000001*'kg'; #kg

CozedorB.Mw=0.000000000064166*'kg'; #kg

CozedorB.Mc=1*'kg'; #kg

CozedorB.mi0=8.337e10;

CozedorB.mi1=9.039e5;

CozedorB.mi2=10.15;

CozedorB.mi3=1.180e-4;

CozedorB.mi4=1.421e-9;

CozedorB.mi5=1.766e-14;

CristalizadorB.h=3.29*'m'; #m

Sementeira.h=0*'m'; #m

Sementeira.T=338.15*'K'; #K

Sementeira.Msac=0.0000000001*'kg'; #kg

Sementeira.Mimp=0.0000000001*'kg'; #kg

Sementeira.Mw=0.0000000001*'kg'; #kg

Sementeira.Mc=0.0000000001*'kg'; #kg

CozedorA.T=338.15*'K'; #K

CozedorA.Msac=0.0000000001*'kg'; #kg

CozedorA.Mimp=0.0000000001*'kg'; #kg

CozedorA.Mw=0.000000001*'kg'; #kg

CozedorA.Mc=0.0000000001*'kg'; #kg

CozedorA.mi0=Sementeira.SaiMagma.mi0;

CozedorA.mi1=Sementeira.SaiMagma.mi1;

CozedorA.mi2=Sementeira.SaiMagma.mi2;

CozedorA.mi3=Sementeira.SaiMagma.mi3;

CozedorA.mi4=Sementeira.SaiMagma.mi4;

CozedorA.mi5=Sementeira.SaiMagma.mi5;

CristalizadorA.h=2.69*'m'; #m

TanqueMel.h=6.9*'m'; #m

end