



Universidade Federal de São Carlos
Centro de Ciências Exatas e Tecnologia
Departamento de Engenharia Química - DEQ
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química - PPG/EQ

**VALIDAÇÃO DA SIMULAÇÃO DINÂMICA DAS ETAPAS DE
EVAPORAÇÃO E CRISTALIZAÇÃO DA PRODUÇÃO DE
AÇÚCAR COM DADOS OBTIDOS EM PLANTAS INDUSTRIAIS**

Doutorando: Charles Dayan Farias de Jesus
Orientador: Prof. Dr. Paulo Ignácio Fonseca de Almeida

São Carlos – SP
Junho de 2004

**Universidade Federal de São Carlos
Centro de Ciências Exatas e Tecnologia
Departamento de Engenharia Química - DEQ
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química**

**VALIDAÇÃO DA SIMULAÇÃO DINÂMICA DAS ETAPAS DE
EVAPORAÇÃO E CRISTALIZAÇÃO DA PRODUÇÃO DE
AÇÚCAR COM DADOS OBTIDOS EM PLANTAS INDUSTRIAIS**

Doutorando: Charles Dayan Farias de Jesus

Orientador: Prof. Dr. Paulo Ignácio Fonseca de Almeida

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Química, área de concentração em Pesquisa e Desenvolvimento de Processos Químicos.

São Carlos - SP

Junho de 2004.

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

J58vs

Jesus, Charles Dayan Farias de.

Validação da simulação dinâmica das etapas de evaporação e cristalização da produção de açúcar com dados obtidos em plantas industriais / Charles Dayan Farias de Jesus. -- São Carlos : UFSCar, 2004.

155 p.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2004.

1. Evaporação. 2. Cristalização. 3. Simulação dinâmica.
4. Produção de açúcar. I. Título.

CDD: 660.28426 (20^a)

***"Os pequenos atos que se executam são melhores
do que todos aqueles que se planejam."***

George Marshall (1880-1959)

DEDICATÓRIA

***À minha esposa Célia, aos meus pais Sebastião e
Sonia, aos meus irmãos Sonia Carla e Wolff e à
Família Galvão por todo carinho, apoio e
incentivo durante todos esses anos.***

AGRADECIMENTOS

A Deus por tudo o que é e representa para mim.

Ao Prof. Dr. Paulo Ignácio pela paciência, solicitude e confiança, o meu muito obrigado.

Às Usinas Santa Adélia e São Martinho pela aceitação da importante parceria Indústria/Universidade, imprescindível para a realização deste trabalho.

Aos Srs. Roberto Avaloni, Silvio Pereira e Marco Carleto, da Usina Santa Adélia, e aos Srs. Agenor Pavan e Oscar Paulino, da Usina São Martinho, pelo acolhimento no ambiente industrial e total presteza no fornecimento de informações.

Ao Centro de Tecnologia Canavieira (CTC), nas pessoas dos Srs. Manoel Régis Lima Verde Leal, Jaime Figueirut e Alberto Shintaku pelos quatro anos de atenção dispensada.

Ao Prof. Dr. Marco Giulietti pelos importantes esclarecimentos sobre o processo de cristalização e pela disponibilização do analisador de partículas (Laboratório de Cristalização).

Aos professores do DEQ, que me foram de grande valia nas discussões.

Ao Oscar (Oficina Mecânica do DEQ) pela presteza com que sempre atendeu às solicitações do projeto.

À minha esposa Célia Maria, que sempre foi meu porto seguro onde eu encontrava apoio, conforto e amizade, sem a qual este período teria sido bem mais difícil.

Aos amigos do DEQ/UFSCar pelos momentos de descontração ao longo de todo este período.

À FAPESP pelo apoio financeiro concedido.

RESUMO

A região central do estado de São Paulo, onde se encontra localizada a cidade de São Carlos, é uma das maiores produtoras mundiais de açúcar e álcool. Conforme o mercado se torna mais competitivo, as empresas passam a buscar novas tecnologias e abordagens matemáticas mais rigorosas. Neste contexto, onde parcerias entre universidade e empresas são encorajadas, está inserido este trabalho.

As principais etapas do processo de produção de açúcar são a evaporação do caldo e a cristalização do açúcar. O estágio de evaporação tem grande influência no balanço energético das usinas, mas, apesar disso, a sua operação automática e otimizada não é completamente implementada na maioria das unidades produtoras. Por sua vez, a etapa de cristalização deve ser monitorada com atenção, pois é nesse estágio que se obtém o produto final, o que tornam críticos os assuntos relacionados à qualidade. Neste trabalho, o principal objetivo foi desenvolver modelos dinâmicos não-lineares dessas duas importantes operações.

Dados industriais coletados na Usina Santa Adélia (etapa de evaporação) e na Usina São Martinho (etapa de cristalização) foram utilizados para validar os modelos matemáticos. Os processos das duas fábricas foram acompanhados, analisados e amostrados. Um modelo de estado-estacionário e um modelo dinâmico foram desenvolvidos utilizando-se a abordagem clássica (balanços de material e energia). Ambos os modelos foram projetados de tal forma a necessitarem apenas de poucas considerações e das medidas disponíveis *on-line*. Os resultados obtidos com o modelo do estado estacionário caracterizaram completamente as correntes do evaporador de múltiplo efeito e permitiram a estimativa da vazão de vapor que é sangrada do equipamento. Com o modelo dinâmico foi possível calcular a concentração do xarope do último efeito. A comparação entre os valores preditos e os valores reais da planta industrial mostrou que o modelo gerou estimativas na mesma faixa de valores e reproduziu o comportamento da variável. A análise dos resultados indicou que maior número de medidas seria necessário para desenvolver um modelo confiável, no sentido do controle de processos, e demonstrou a dificuldade de se utilizar os dados industriais na forma que estes se encontram nos arquivos de histórico do sistema de supervisão. Para superar estes inconvenientes foi desenvolvida neste trabalho uma rede neural como *software* sensor para determinação do Brix do último efeito. Deve-se ressaltar, porém, que o pré processamento de todas as variáveis disponíveis consiste em um procedimento que demanda bastante esforço e é de fundamental importância, pois o desempenho das predições depende da qualidade do conjunto de dados de entrada. Diferentes topologias de redes foram testadas e os resultados das melhores foram bastante satisfatórios.

O modelo proposto para o cristalizador (cozedor) selecionado na etapa de cristalização era constituído de um sistema não linear de equações algébricas e diferenciais. Além dos balanços de massa e de energia, o modelo inclui também o balanço populacional, que permitiu o cálculo do diâmetro médio dos cristais e seu coeficiente de variação durante a batelada. Mesmo adotando severas considerações e com poucos dados de entrada, o modelo foi capaz de gerar boas predições para a trajetória das variáveis de estado do equipamento. A análise dos resultados também mostrou que alguns aspectos da operação automática afetam a estabilidade do processo.

Finalmente, pode-se dizer que as abordagens de princípios fundamentais e de redes neurais podem se tornar ferramentas poderosas, úteis e confiáveis na modelagem dos estágios de produção de açúcar se maior número de sensores for instalado no processo.

ABSTRACT

The central area of the State of São Paulo, Brazil, where the city of São Carlos is located, is one of the largest world producers of alcohol and granulated sugar from sugar cane. As the market become more competitive, the factories seek for new technologies and more rigorous mathematical approaches. This work is inserted in this context, where partnership between university and industry is encouraged.

The key steps in the sugar production process are the evaporation of the juice and the crystallization of sugar. The evaporation stage has great influence in the energy balance of the factories but, in spite of that, its automatic and optimized operation is not completely implemented in a large part of the producing units. By its turn, the crystallization step should be monitored very closely because is in this step that the final product is obtained, so quality issues are critical. In this work, the main aim was to develop non-linear dynamic models of these two important operations.

The models used industrial data collected from Usina Santa Adélia (evaporation stage) and Usina São Martinho (crystallization stage). The processes of the two factories were accompanied, analyzed and sampled. A steady-state and a dynamic models of the evaporation were developed using the classical approach – material and energy balances. Both models were designed in such way that they depend only on few assumptions and on measurements available on-line. The results obtained with the steady-state model fully characterized all streams of the multiple-effect evaporator and allowed to estimate the steam flow rate bled from the equipment. With the dynamic model it was possible to calculate the concentration of the syrup in the last effect. Comparison between the predicted values and the actual industrial data showed that the model generated estimates in the same range of values and reproduced the behavior of the variable. The analysis of the results suggested that more measurements would be necessary to develop a reliable model (in the process control sense) and demonstrated that it is difficult to use the industrial data in the format they are found in the historical data files. To overcome these inconveniences an artificial neural network was developed as a software sensor for the Brix in the last effect. Several topologies were tested and the results of the best ones were very good. Unfortunately, as the performance of the predictions depends on the quality of the training set, it was necessary a real effort to preprocess all available data.

The proposed model for the crystallizer (batch vacuum pan) select in the crystallization stage was constituted by a system of nonlinear algebraic and differential equations. Besides the energy and material balances, the model included the population balance, which allowed the calculation of the average crystal size and its coefficient of variation during the strike. Even with severe assumptions and few input data, the model was able to make good predictions of the trajectories of the state variables of the equipment. The analysis of the results also showed that some aspects of the automatic operation affect the stability of the process.

Finally, it could be said that the first principles and the neural network approaches could become powerful, useful and reliable tools to model the stages of sugar production if more sensors were installed in the process.

SUMÁRIO

	Pág.
Lista de Figuras.....	i
Lista de Tabelas.....	vi
Nomenclatura.....	vii
1. Introdução.....	1
1.1. Motivação.....	3
1.2. Objetivos.....	3
2. Pareceria Universidade-Empresa.....	4
2.1. Parceria DEQ-UFSCar / CTC-Copersucar / Usina Santa Adélia / Usina São Martinho.....	4
2.1.1. A Copersucar e as Usinas Envolvidas no Projeto.....	4
2.1.2. Centro de Tecnologia Canavieira (CTC).....	5
3. Revisão Bibliográfica.....	6
3.1. Literatura Relacionada ao Processo de Produção de Açúcar.....	6
3.1.1. A Cana de Açúcar.....	6
3.1.2. Etapa de Evaporação.....	8
3.1.2.1. Evaporador de Múltiplo Efeito.....	9
3.1.3. Etapa de Cristalização.....	11
3.1.3.1. Métodos de Esgotamento.....	13
3.1.4. Cristalização Industrial.....	16
3.2. Literatura de Simulação e Identificação de Processos.....	18
3.3. Redes Neurais.....	26
4. Metodologia de Trabalho.....	32
5. Etapa de Evaporação.....	35
5.1. Descrição das Condições na Planta Industrial da Usina Santa Adélia.....	35
5.2. Obtenção dos Dados de Processo.....	41
5.3. Atividades Relacionadas com a Seleção e a Análise dos Dados.....	44
5.4. Materiais e Métodos.....	46
5.4.1. Pontos de Amostragem.....	46
5.5. Modelagem do Processo.....	50
5.5.1. Modelo Matemático do Evaporador.....	51
5.5.1.1. Modelo do Estado Estacionário do EME.....	51
5.5.1.1.1. Resultados da Modelagem do Estado Estacionário.....	57
5.5.1.1.2. Implementação Gráfica.....	60

5.5.1.2. Modelo do Estado Transiente do EME.....	61
5.6. Utilização de Redes Neurais.....	68
5.6.1. Análise dos Dados de Entrada.....	69
5.7. Conclusões da Etapa de Evaporação.....	80
5.8. Sugestões para Trabalhos Futuros na Área de Evaporação.....	81
6. Etapa de Cristalização.....	83
6.1. Descrição das Condições na Planta Industrial da Usina São Martinho.....	83
6.2. Materiais e Métodos.....	93
6.2.1. Pontos de Amostragem.....	93
6.2.2. Obtenção do Mel e dos Cristais.....	94
6.2.3. Análise Granulométrica dos Cristais.....	97
6.2.4. Testes no Ambiente Industrial.....	101
6.3. Modelagem do Processo.....	103
6.3.1. Supersaturação.....	104
6.3.2. Modelo Matemático do Cristalizador.....	108
6.3.3. Adaptações do Modelo ao Ambiente Industrial.....	111
6.3.3.1. Vazão da Corrente de Alimentação de Xarope (F_F) e de Água (F_W).....	112
6.3.3.2. Temperatura da Corrente de Alimentação de Xarope (T_F).....	115
6.3.3.3. Volume de Massa Cozida (V_m).....	115
6.3.3.4. Taxa de Evaporação de Água (J_{vap}).....	117
6.3.4. Balanço Populacional	119
6.3.4.1. Fator de Forma Volumétrico (K_v).....	122
6.3.4.2. Velocidade de Crescimento Linear (G).....	123
6.3.4.3. Difusividade da Velocidade de Crescimento Linear (D_G).....	125
6.3.5. Condições Iniciais das Variáveis de Estado do Modelo	126
6.3.6. Concretização do Modelo Matemático	129
6.3.7. Ajuste dos Parâmetros.....	132
6.4. Resultados das Simulações.....	140
6.5. Implementação Visual do Modelo.....	147
6.6. Conclusões da Etapa de Cristalização.....	148
6.7. Sugestões para Trabalhos Futuros na Área de Cristalização.....	149
7. Conclusões.....	150
8. Referências Bibliográficas.....	152

ANEXOS

ANEXO A - Equações e Correlações das Propriedades Físicas

ANEXO B - Perfis das Variáveis de Entrada das Redes Neurais

ANEXO C - Distribuição do Tamanho de Cristais das Sementes

ANEXO D - Perfis das Variáveis Monitoradas ao Longo das Bateladas

ANEXO E - Compilação de todos os Resultados para todas as Bateladas

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
CAPÍTULO 3 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	
Figura 3.1: Representação esquemática de um evaporador de múltiplo efeito (EME)	10
Figura 3.2: Método de esgotamento de duas massas.....	14
Figura 3.3: Fatores que influenciam a velocidade de crescimento global dos cristais.	16
Figura 3.4: Interação dos fatores de cristalização com a DTC.....	17
 CAPÍTULO 5 - ETAPA DE EVAPORAÇÃO	
Figura 5.1: Representação da etapa de evaporação - tela da sala de controle.....	36
Figura 5.2: Representação esquemática da estratégia de controle do evaporador de múltiplo efeito.....	38
Figura 5.3: Representação esquemática de um evaporador.....	40
Figura 5.4: Arquivos de histórico representados na codificação hexadecimal.....	42
Figura 5.5.: Representação em números reais do código hexadecimal dos arquivos de histórico - Os círculos mostram locais onde podem ser vistos valores de variáveis do processo.....	43
Figura 5.6: O arquivo codificado é processado pelo programa desenvolvido pelo pesquisador e os dados são gravados diretamente na forma de uma planilha.....	44
Figura 5.7: Variação da concentração do xarope nos pontos de coleta ao longo do tempo de amostragem para o primeiro conjunto de amostras.....	48
Figura 5.8: Variação da concentração do xarope nos pontos de coleta ao longo do tempo de amostragem para o segundo conjunto de amostras.....	48
Figura 5.9: Variação da concentração do xarope nos pontos de coleta ao longo do tempo de amostragem para o terceiro conjunto de amostras.....	49
Figura 5.10: Variação da concentração do xarope nos pontos de coleta ao longo do tempo de amostragem para o quarto conjunto de amostras.....	49
Figura 5.11: Representação esquemática das correntes do EME.....	51
Figura 5.12: Modelo do evaporador considerado para o desenvolvimento do modelo matemático.....	54
Figura 5.13: Dados da pressão do primeiro efeito suavizados para posterior utilização na determinação da temperatura.....	57

Figura 5.14: Representação da pressão de entrada de todos os efeitos e do vapor de escape.....	58
Figura 5.15: Comportamento do Brix de entrada do terceiro efeito (última caixa).....	58
Figura 5.16: Representação do comportamento da vazão de entrada do EME.....	58
Figura 5.17: Valor final de $U_{(0)}$	59
Figura 5.18: Concentração da última caixa de evaporação e valores de concentração calculados para o pré-evaporador e para os dois primeiros efeitos.....	59
Figura 5.19: Percentual de vapor sangrado no pré-evaporador.....	60
Figura 5.20: Tela de entrada do programa que calcula o modelo estacionário do EME.....	61
Figura 5.21: Pressão de entrada de todos os efeitos e do vapor de escape.....	64
Figura 5.22: Vazão de alimentação utilizada como entrada do modelo.....	64
Figura 5.23: Nível do pré-evaporador (A) e da última caixa (B) utilizados no ajuste dos parâmetros.....	64
Figura 5.24: Comparação entre o valor $Brix_{(3)}$ calculado e o valor industrial na fase de ajuste.....	65
Figura 5.25: Comparação entre o valor $Brix_{(3)}$ calculado e o valor industrial.....	65
Figura 5.26: Representação do nível do pré-evaporador (A) e da última caixa (B).....	66
Figura 5.27: Estimativa de $Brix_{(3)}$ para cinco dias de operação.....	66
Figura 5.28: Extrato da Figura 5.27 entre os minutos 1000 e 3000.....	67
Figura 5.29: Comparação entre os valores de concentração calculados com o modelo estacionário e as estimativas do modelo dinâmico.....	67
Figura 5.30: Resultados da análise de correlação de certa variável utilizando (A) toda a base de dados e (B) por meio de janelas de dados.....	70
Figura 5.31: Exemplos da utilização da análise de correlação na aceitação ou rejeição de uma variável.....	71
Figura 5.32: Erro quadrático associado às topologias 11-5-1, 11-7-1 e 11-10-1 de redes <i>tansig-purelin</i>	73
Figura 5.33: Erro quadrático associado às topologias 11-2-1, 11-10-1 e 11-11-1 de redes <i>tansig-tansig</i>	74
Figura 5.34: Estimativa final da rede para os dados de entrada da Base 01.....	74

Figura 5.35: Estimativa final da rede para os dados de entrada da Base 02.....	75
Figura 5.36: Estimativas de $Brx_{(3)}$ geradas por uma rede 11-15-1 <i>tansig-tansig</i> para a etapa de treinamento da rede neural.....	76
Figura 5.37: Representação dos perfis das variáveis NN_7, NN_10 e NN_11 presentes na Base 01.....	77
Figura 5.38: Estimativas de $Brx_{(3)}$ geradas por uma rede 11-15-1 <i>tansig-tansig</i> para as etapas de treinamento e validação da rede neural para dados da Base 02.....	78
Figura 5.39: Perfis das variáveis NN_4 e NN_5 presentes na Base 02.....	78
Figura 5.40: Estimativas de $Brx_{(3)}$ para 10 minutos a frente do tempo atual, utilizando-se uma rede 11-15-1 <i>tansig-tansig</i> na etapa de validação para a Base 01....	79
Figura 5.41: Estimativas de $Brx_{(3)}$ para 10 minutos a frente do tempo atual, utilizando-se uma rede 11-15-1 <i>tansig-tansig</i> na etapa de validação para a Base 02....	80

CAPÍTULO 6 - ETAPA DE CRISTALIZAÇÃO

Figura 6.1: Cristalizadores de massa A - Setor de Cristalização da Usina São Martinho.....	84
Figura 6.2: Detalhes do ambiente de trabalho: (a) Garrafa de amostagem, (b) Parte frontal do cristalizador 10 e (c) Balcão utilizado para alocação das amostras coletadas.....	89
Figura 6.3: Representação esquemática do cristalizador 10.....	90
Figura 6.4: Tela de processo representando o monitoramento do cristalizador 10.....	91
Figura 6.5: Representação gráfica dos dados de Brix, nível e pressão obtidos em um dia de operação do cristalizador 10.....	92
Figura 6.6: Centrífuga de cesto e suas partes constitutivas.....	95
Figura 6.7: Imagem de cristais de açúcar adquirida com uma câmera acoplada a um microscópio.....	98
Figura 6.8: Distribuição granulométrica obtida com o analisador de partículas de duas amostras coletadas do cristalizador 10.....	99
Figura 6.9: (A) Curvas das DTC obtidas originalmente como resposta e (B) curvas extrapoladas das DTC.....	100
Figura 6.10: Representação das curvas no sistema de coordenadas $z-L$, com respectivos desvios da linearidade na sua parte final.....	101
Figura 6.11: Sonda de amostragem normalmente utilizada na usina.....	102
Figura 6.12: Desenho esquemático e foto da sonda de amostragem idealizada e construída para a retirada de amostra do cristalizador 10.....	103

Figura 6.13: Representação esquemática do cristalizador 10.....	108
Figura 6.14: Representação da fase de enchimento do cristalizador 10.....	111
Figura 6.15: Abertura da válvula de controle e fluidos transportados por ela.....	112
Figura 6.16: Representação esquemática da dependência do Brix com o nível da solução.....	113
Figura 6.17: Determinação da temperatura da corrente de alimentação.....	115
Figura 6.18: Relação entre o sinal do nível do cristalizador 10 e a altura da massa cozida.....	116
Figura 6.19: Representação da variação da massa de água presente no cristalizador 10 em cinco diferentes bateladas. Valores calculados durante a estimativa do coeficiente de troca térmica.....	119
Figura 6.20: DTC das duas amostras de sementes utilizadas no modelo matemático.	126
Figura 6.21: Efeito da dissolução de cristais nas DTC's de número e de volume.....	128
Figura 6.22: Representação da estrutura lógica do modelo matemático utilizado.....	129
Figura 6.23: Comportamento das principais medidas disponíveis na base de dados das bateladas II e III.....	131
Figura 6.24: Representação da rápida elevação do nível após a reabertura da válvula de controle.....	134
Figura 6.25: Influência da variação de U sobre o volume e o Brix Total.....	136
Figura 6.26: Influência da variação de K_W sobre o volume e o Brix Total.....	137
Figura 6.27: Influência da variação de K_X sobre o volume e o Brix Total.....	138
Figura 6.28: Influência da variação de K_G na estimativa do diâmetro médio dos cristais.....	138
Figura 6.29: Influência da variação de K_{DG} na estimativa do diâmetro médio dos cristais.....	138
Figura 6.30: Influência da variação de K_{VAP} na estimativa da temperatura da massa cozida.....	139
Figura 6.31: Evolução das estimativas de V_m e $BrxT$ para a Batelada VIII	140
Figura 6.32: Evolução das estimativas de V_m e $BrxT$ para a Batelada III.....	141
Figura 6.33: Evolução das estimativas de Brx e $BrxT$ para a Batelada I.....	141
Figura 6.34: Evolução de $ABVAX$ e da estimativa da supersaturação (%) da Batelada VIII.....	142
Figura 6.35: Evolução de $ABVAX$ e da estimativa da supersaturação (%) da Batelada II.....	143

Figura 6.36: Comparação dos valores industriais e calculados da temperatura, T, para a Batelada V.....	143
Figura 6.37: Estimativas do diâmetro médio dos cristais para a batelada III.....	144
Figura 6.38: Estimativas do diâmetro médio dos cristais para a batelada IV.....	144
Figura 6.39: Estimativas do CV dos cristais ao final de todas as bateladas.....	144
Figura 6.40: Estimativas da fração de cristais para a batelada III	145
Figura 6.41: Estimativas da fração de cristais para a batelada VIII.....	145
Figura 6.42: Correlação entre a ação de controle da válvula e a diferença entre o Brix medido e seu <i>setpoint</i>	146
Figura 6.43: Tela de entrada do programa que calcula o modelo dinâmico do cristalizador	147

LISTA DE TABELAS

	Pág.
 CAPÍTULO 5 - ETAPA DE EVAPORAÇÃO	
Tabela 5.1: Medidas das principais características do EME da Usina Santa Adélia....	40
Tabela 5.2: Valores de importantes parâmetros usuais de operação.....	41
Tabela 5.3: Lista de variáveis relacionadas com a evaporação.....	45
Tabela 5.4: Valores médios das medidas de concentração nos equipamentos em °Brix.....	50
Tabela 5.5: Lista de variáveis selecionadas como entradas das redes neurais.....	72
 CAPÍTULO 6 - ETAPA DE CRISTALIZAÇÃO	
Tabela 6.1: Medidas das principais características dos cristalizadores da Usina São Martinho.....	90
Tabela 6.2: Valores de importantes parâmetros usuais de operação.....	91
Tabela 6.3: Indicação dos pontos de amostragem, tipo de amostra a ser coletada e algumas propriedades a serem medidas de acordo com as necessidades do modelo....	94
Tabela 6.4: Dados para o cálculo da estimativa do parâmetro K_X	114
Tabela 6.5: Valores ajustados dos parâmetros U , K_X e K_W	135
Tabela 6.6: Valores ajustados dos parâmetros K_{VAP} , K_G e K_{DG}	135
Tabela 6.7: Valores médios dos parâmetros U , K_X e K_W e seus respectivos desvios-padrão.....	135

NOMENCLATURA

A.....	Área de troca térmica – [m ²]
ABVAX.....	Valor da abertura da válvula de controle – [%]
AM.....	Diâmetro mássico médio – [µm]
A_T, B_T, C_T e D_T	Constantes referentes aos termos isolados do balanço de energia do cristalizador 10.
Brx.....	Brix da solução: Percentagem de sólidos dissolvidos (Brx=100Bx) – [°Brix]
Brx _{SAT}	Concentração de saturação para uma solução pura de sacarose – [°Brix]
Bx.....	Fração Mássica de Matéria Seca
BxT.....	Fração Mássica de Matéria Seca Total
Cp.....	Capacidade calorífica da solução – [kJ /kg °C]
CV.....	Coefficiente de variação – [%]
D _G	Difusividade da velocidade de crescimento linear – [m/s ²]
EPE _H	Elevação do ponto de ebulição pelo efeito da altura de material – [°C]
EPE _X	Elevação do ponto de ebulição pelo efeito da concentração – [°C]
F.....	Vazão mássica – [kg/h]
Fc.....	Fração de cristais – [%]
F _F	Vazão mássica caldo de alimentação – [kg/h]
F _V	Vazão mássica de vapor – [kg/h]
F _{V(0)}	Vazão mássica de vapor direcionado para o primeiro efeito – [kg/h]
F _{V(0_SANGRIA)}	Vazão mássica de vapor direcionado para a fábrica – [kg/h]
F _{V(0_TOTAL)}	Vazão mássica total de vapor gerado nos pré-evaporadores – [kg/h]
G.....	Velocidade de crescimento linear – [m/s]
H _L	Entalpia do líquido – [kJ/kg]
H _V	Entalpia do vapor – [kJ/kg]
H _{VAP}	Entalpia do vapor gerado no cristalizador – [kJ/kg]
J _{CRIST}	Taxa de cristalização – [kg/h] (no texto pode ser aparecer com [kg/min])
J _{VAP}	Taxa de evaporação – [kg/h] (no texto pode ser aparecer com [kg/min])
K _g	Parâmetro ajustável da Eq. 46 (Cap. Cristalização)
K _{DG}	Parâmetro ajustável da Eq. 47 (Cap. Cristalização)
K _{u(i)}	Constante usada no cálculo do coeficiente de troca térmica do efeito i
K _V	Fator de forma volumétrico do cristal

K_{VAP}	Parâmetro empírico ajustável da Eq 27 (Cap. Cristalização)
K_W	Constante ajustável da estimativa da vazão mássica de água – [m ³ /min]
K_X	Constante ajustável da estimativa da vazão mássica de xarope – [m ³ /min]
L	Comprimento característico – [m]
$M_{(i)}$	Massa de solução no efeito i – [kg]
M_A	Massa de sacarose dissolvida – [kg]
M_C	Massa de cristais – [kg]
M_I	Massa de impurezas – [kg]
M_t	Massa Total da Massa Cozida – [kg]
M_W	Massa de água – [kg]
P	Pureza: fração de sacarose nos sólidos dissolvidos na solução
P_{ST}	Pressão do vapor de escape – [bar]
P_v	Pressão do vapor – [bar]
Q	Calor trocado entre o vapor na calandra e o material no equipamento – [kJ/h]
R_{aw}	Razão entre a massa de sacarose e a massa de água
R_{iw}	Razão entre a massa de impurezas e a massa de água
S	Supersaturação
SC	Coefficiente de saturação
S_{LIM}	Supersaturação a partir da qual há formação espontânea de cristais
ST_W	estado de abertura da válvula <i>on/off</i> que permite a passagem da água
ST_X	Estado de abertura da válvula <i>on/off</i> que permite a passagem de xarope
T	Temperatura – [°C]
T_V	Temperatura do vapor – [°C]
T_{VAP}	Temperatura do vapor no interior do cristalizador – [°C]
U	Coefficiente global de troca térmica – [kJ /°C ² ·h·m ²]
V_c	Volume de cristais no cristalizador – [m ³]
V_m	Volume de massa cozida no cristalizador – [m ³]

Letras Gregas

ΔH_v	Calor latente de vaporização – [kJ/kg]
μ_j	Momento j da função densidade populacional - [m ^j]
ρ	Densidade – [kg/m ³]

Subscritos:

F = Alimentação

$i=0$ → Pré-evaporador $i=1,2,3$ → efeitos 1,2 e 3

I, A, W e C = Impureza, Sacarose, Água e Cristais, respectivamente

M = Massa cozida

SOL = Solução

ST = Vapor na calandra

VAP = Vapor gerado dentro do cristalizador

1. INTRODUÇÃO

A região central do Estado de São Paulo, Brasil, onde se localiza a cidade de São Carlos, é uma das maiores produtoras mundiais de álcool e açúcar cristal a partir da cana de açúcar. Porém, de modo geral, ainda hoje é visível a carência de conhecimento especializado nas usinas produtoras de álcool e açúcar, o que evidencia a necessidade de maiores investimentos em pesquisas e formação de pessoal possibilitando tanto o desenvolvimento como a aplicação mais adequada de novos estudos de engenharia e novas tecnologias disponíveis, do ponto de vista técnico e científico, tornando o processo industrial mais eficiente e capacitando o setor a enfrentar um mercado cada vez mais competitivo e globalizado.

Neste sentido, as indústrias do setor estão buscando uma nova visão de sua organização, objetivando uma modernização do processo de produção agro-industrial. Entre as melhorias operacionais o aumento da instrumentação e automatização do processo é de grande importância, uma vez que é essencial o desenvolvimento de sistemas de supervisão e monitoramento das plantas industriais para permitir o gerenciamento de perdas e o controle do processo. Vale ressaltar ainda que a simulação de processos representa uma poderosa ferramenta de diagnóstico e otimização por permitir que engenheiros e operadores tenham uma previsão do comportamento da produção frente a mudanças de variáveis do processo sem a necessidade de uma intervenção direta na planta. No entanto, a utilização de métodos mais sofisticados de modelagem e controle de processos ainda é incipiente no setor sucro-alcooleiro, mesmo reconhecendo-se sua importância.

Dentro do processo de produção de açúcar as duas etapas que reconhecidamente apresentam maiores dificuldades na validação dos modelos de simulação são a evaporação e a cristalização. A etapa de evaporação tem grande peso no balanço energético das usinas produtoras de açúcar, pois ao mesmo tempo que necessita de grande quantidade de vapor das caldeiras também gera muito vapor vegetal de baixa pressão, utilizado por outros equipamentos da usina. Quanto à cristalização sua maior importância recai sobre a influência que a operação dos cristalizadores pode ter na qualidade do produto final e na economia do processo produtivo. Nas palavras de Ziegler (1999):

"Açúcar para ser vendável precisa apenas ser doce e apresentar características aceitáveis como cor e pureza. Açúcar provindo de uma operação bem conduzida é vendido pelo mesmo preço de um produzido de maneira menos adequada. A recompensa de uma operação de cristalização bem feita recai no menor custo de produção".

Apesar de sua importância, a operação automática e otimizada desta etapa ainda não se encontra plenamente implementada na maioria das unidades produtoras da região pela falta de ferramentas computacionais adequadas ou pelo lento processo de modernização das unidades. Quanto à cristalização, sua maior importância recai sobre a influência que a operação dos cristalizadores pode ter na qualidade do produto final e na economia do processo produtivo.

Principalmente para estas duas etapas específicas do processo, a dificuldade em se mensurar as inúmeras variáveis de interesse e as propriedades da solução de açúcar não colabora no estabelecimento de estratégias otimizadas de controle do processo. Muitas vezes, os sensores podem estar comercialmente disponíveis, mas normalmente são muito caros ou pouco confiáveis (podendo apresentar baixa precisão ou necessidade de constante calibração e manutenção); outras vezes, não é possível realizar medidas diretas simplesmente. Segundo a literatura (Feyo de Azevedo e Chorão, 1993), em relação à cristalização, sabe-se que o grau de supersaturação não pode ser medido diretamente e a medida da distribuição de tamanho dos cristais apresenta dificuldades de ser obtida de forma precisa em regimes de operação industrial. Neste caso, como também no caso da evaporação, a principal preocupação é definir a forma de se monitorar o comportamento de variáveis internas do processo que definam o “estado do processo” e para as quais uma medição direta é difícil, não-disponível, cara e/ou imprecisa.

Os *softwares* sensores podem representar uma solução para tal tipo de problema, pois consistem na combinação de um número limitado de medidas disponíveis com o conhecimento a respeito do processo, de forma a tornar possível a inferência do estado do processo ou de variáveis não diretamente mensuráveis, resultando na obtenção de informações dos mecanismos envolvidos em tais operações.

1.1. Motivação

Os simuladores de processo vem sendo utilizados por diversos autores tanto em trabalhos desenvolvidos nas indústrias quanto em centros de pesquisa. Apenas há pouco mais de duas décadas é que os simuladores genéricos começaram a ser estendidos e adaptados para a simulação dinâmica e o desenvolvimento de computadores mais rápidos possibilitou a utilização de *softwares* sensores para o monitoramento *on-line* de processos, principalmente na indústria alimentícia e de biotecnologia. Apesar da importância desses temas ainda são poucos os trabalhos na literatura explorando a aplicação de simuladores dinâmicos e *software* sensores relacionados ao processo real de produção de açúcar, o que motivou o desenvolvimento pioneiro do presente trabalho.

Já existe no DEQ/UFSCar familiaridade com os conceitos e dificuldades envolvidas na modelagem das etapas do processo de fabricação de açúcar e com o desenvolvimento das interfaces gráficas que possibilitem uma visualização mais direta dos resultados de simulação (Ishikawa, 1997; Jesus, 2000). Desta forma, este estudo apoiou-se na parceria firmada entre o DEQ/UFSCar, a Copersucar - através do CTC, a Usina Santa Adélia e a Usina São Martinho, e baseou-se na perspectiva de futura utilização de modelos matemáticos do comportamento dinâmico do processo de produção de açúcar para o acompanhamento da produção nas usinas, auxiliando na previsão de algumas variáveis de processo e, conseqüentemente, no seu controle.

1.2. Objetivos

O objetivo principal deste trabalho foi o desenvolvimento de modelos dinâmicos das etapas de evaporação e de cristalização da produção de açúcar por meio de ajustes nos parâmetros dos modelos, de modo a gerar resultados condizentes com os observados durante o regime de produção da planta industrial. Os dados reais de operação dos equipamentos foram obtidos do processo da Usina Santa Adélia - Jaboticabal/SP - e da Usina São Martinho - Pradópolis/SP. Paralelamente, pretendeu-se gerar algoritmos que em conjunto com sensores físicos presentes na indústria pudessem compor os *software* sensores para o monitoramento de variáveis internas do processo para as quais uma medição direta fosse indisponível ou de difícil obtenção.

2. PARCERIA UNIVERSIDADE-EMPRESA

2.1. Parceria DEQ-UFSCar/CTC-Copersucar/Usina Santa Adélia/ Usina São Martinho

Uma breve descrição dos principais parceiros que tornaram viável a realização deste trabalho de doutoramento é apresentada nos próximos tópicos.

2.1.1. A Copersucar e as Usinas Envolvidas no Projeto

Fundada em 1º de julho de 1959, a Copersucar - Cooperativa dos Produtores de Cana, Açúcar e Álcool do Estado de São Paulo Ltda, vem tendo como objetivo central comercializar a produção de açúcar, álcool e demais produtos da cana-de-açúcar, além da prestação de assistência a todos os setores do sistema produtivo de seus associados.

A Copersucar teve ampla atuação na cadeia de produção de seus associados, indo desde a atividade agrícola de plantio da cana-de-açúcar até a colocação dos produtos finais nas gôndolas dos supermercados. Refina com exclusividade o açúcar e comercializa o álcool produzidos pelos associados, o que lhe propicia um faturamento bruto anual da ordem de R\$ 2,3 bilhões.

O elevado número de unidades produtoras, complementado pelas duas refinarias, as empacotadoras de açúcar e as engarrafadoras de álcool, confere à Copersucar a capacidade de atuar em diversas áreas do mercado.

As usinas e destilarias associadas a Copersucar processam anualmente um volume superior a 60 milhões de toneladas de cana, uma produção da ordem de 3,1 milhões de toneladas de açúcar e 3 bilhões de litros de álcool. Esses montantes permitem à cooperativa uma participação de, aproximadamente, 25% no mercado brasileiro de açúcar e álcool.

A Usina Santa Adélia é uma das mais desenvolvidas e automatizadas das usinas cooperadas e possui um dos mais altos índices de produtividade do setor, o que a capacita a ser pioneira nos estudos relacionados ao presente trabalho.

Já a Usina São Martinho é uma das maiores produtoras mundiais de açúcar e álcool. A produção de açúcar da safra de 2003 foi de aproximadamente 7,5 milhões de sacos de 50 quilos, com uma média de produção de aproximadamente 39.000sacos/dia.

2.1.2. Centro de Tecnologia Canavieira (CTC)

A atuação da Copersucar na área de pesquisa e desenvolvimento tecnológico teve início no final dos anos 60 com as atividades de laboratório e criação do programa de melhoramento de variedades de cana-de-açúcar. Em 1979, os laboratórios e as atividades de pesquisa, adaptação, desenvolvimento, incorporação e transferência de tecnologia, tanto no segmento agrícola quanto no industrial, foram consolidados no CTC, hoje Centro de Tecnologia Canavieira, sediado no município de Piracicaba/SP.

O CTC é composto por uma sede central, que abriga escritórios e laboratórios de análises e desenvolvimento, três estações experimentais e um campo de pesquisa. No conjunto, são 22,8 mil metros quadrados de área construída e 1,4 mil hectares dedicados exclusivamente ao desenvolvimento de pesquisas e de ensaios e experimentos.

Na condução e execução dos projetos de pesquisa e de desenvolvimento de tecnologia o CTC atua em parceria com os associados, principais usuários dos resultados de todo o trabalho. O CTC se vale, também, de consultores nacionais e internacionais, além de manter intercâmbio com várias instituições de ensino e centros de pesquisas nacionais e do exterior, através de convênios ou desenvolvimento de programas e projetos. A Copersucar detém quarenta patentes de processos, equipamentos e sistemas de *software*, e tem o registro de cerca de 300 projetos no CREA.

A parceria entre o Grupo de Pesquisa em Automação de Processos Químicos e Bioquímicos Industriais do DEQ/UFSCar, a Copersucar e as duas Usinas em questão viabilizou a execução e análise dos testes necessários para o refinamento e ajuste dos modelos matemáticos propostos neste estudo.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo os assuntos cobertos são divididos em três seções. A primeira apresenta uma descrição introdutória a respeito das etapas de evaporação e cristalização no processo de produção de açúcar. A segunda seção trata de trabalhos relacionados à modelagem e simulação de processos e a última seção discute de forma qualitativa o tema redes neurais, vista como uma ferramenta matemática que será utilizada no presente trabalho.

3.1. Literatura Relacionada ao Processo de Produção de Açúcar

3.1.1. A Cana de Açúcar

A cana de açúcar pertence à família das gramíneas, gênero *saccharum*. Do ponto de vista da indústria do açúcar, o colmo é a parte mais importante, sendo constituído pelos gomos, entre nós, internódios, nós e gemas (Parazzi, 1984).

Do ponto de vista tecnológico, a cana pode ser definida pelas seguintes equações:

$$\text{Cana} = \text{caldo extraído} + \text{bagaço} \quad (1)$$

$$\text{Cana} = \text{caldo absoluto} + \text{fibra} \quad (2)$$

Enquanto a primeira equação tem um caráter prático, a segunda é teórica, ou seja, o caldo absoluto seria todo o caldo que a cana possui, obtido numa moenda hipotética com extração total.

A seguir, o processo de produção de açúcar será descrito na sua totalidade, porém de forma sucinta, visando proporcionar maior percepção do processo e ressaltando a importância das etapas de evaporação e cristalização, que serão detalhadas a seguir. Como no Brasil as unidades sucro-alcooleiras não se diferenciam muito umas das outras, as descrições que se seguem podem ser consideradas gerais. Estas etapas de produção de açúcar são divididas e denominadas da seguinte maneira:

Recepção da matéria-prima: A colheita da cana de açúcar é feita manualmente, com facões, ou por cortadeiras mecânicas e, então, a cana é transportada às indústrias através de caminhões adaptados para o serviço. Na usina, a cana é descarregada em pátios de armazenagem ou diretamente nas mesas alimentadoras, para que seja feita a extração.

Extração da sacarose ou moagem: A cana é descarregada nas mesas alimentadoras, sofre uma lavagem e, logo após, é conduzida através de esteiras rolantes para os picadores e desfibradores; esta etapa é conhecida como 'preparo da cana'. A extração da sacarose é feita via esmagamento da cana pelos rolos das moendas que exercem uma forte pressão sobre a cana. Assim, extraem-se cerca de 96% do caldo da cana, que é utilizado para produzir açúcar. O bagaço produzido nesta etapa é usado como combustível nas caldeiras.

Tratamento do caldo misto: O caldo resultante da extração passa por algumas etapas de tratamento antes de ser usado na produção de açúcar. Este caldo é peneirado, para remoção das impurezas grossas; sulfitado com SO_2 para auxiliar na coagulação das matérias coloidais, na formação de precipitados (que farão o arraste de impurezas durante a sedimentação) e na desinfecção do caldo; e, finalmente, caleado com leite de cal ($\text{Ca}(\text{OH})_2$), para também coagular parte do material coloidal, precipitar certas impurezas e elevar o pH para valores neutros. A mistura é aquecida com vapor de água até temperaturas em torno de 105°C com dois objetivos: primeiro, diminuir viscosidade do fluido, facilitando a etapa de decantação, e segundo, promover a formação de uma quantidade maior de aglomerados coloidais, que precipitarão no decantador formando o lodo de sedimentação que será posteriormente filtrado. O caldo clarificado é enviado para o setor de evaporação.

Evaporação: Constitui o primeiro estágio de concentração do caldo proveniente do setor de tratamento. O caldo clarificado contém cerca de 85% de água, que é, então, evaporada até que se atinja cerca de 40% em água, tornando-se um xarope grosso e amarelado. Esta evaporação é feita em evaporadores em múltiplo efeito concorrente, isto é, o vapor gerado na caixa de evaporação precedente é utilizado como fonte de aquecimento para a caixa posterior.

Cristalização: O xarope produzido pela etapa de evaporação passa por uma etapa de “cozimento”, feito em cristalizadores, que em essência são evaporadores de simples efeito. Neste processo realizado em batelada, o xarope é concentrado sob vácuo até atingir um certo grau de supersaturação. Adicionam-se núcleos cristalinos de açúcar (sementes) e, pela adição de xarope e evaporação controlada, os cristais crescem até o tamanho desejado. A mistura de xarope e cristais (massa cozida) é, então, centrifugada para remoção do licor-mãe. Os cristais formam o açúcar cristal e o licor-mãe (agora chamado de mel) é reciclado para uma nova etapa de cristalização. O líquido residual desta etapa é conhecido como mel final e é utilizado pelas destilarias para formar o mosto de fermentação.

Secagem: Os cristais de açúcar seguem para a secagem em tambores rotativos levemente inclinados em relação a horizontal. Na Usina Santa Adélia, o secador utiliza tanto ar quente para secar o açúcar quanto ar frio, em contracorrente, para esfriá-lo antes de sair do equipamento; a saída de ar é comum para as duas correntes. Este açúcar pode ser comercializado desta forma, como açúcar cristal, ou então como matéria-prima a ser utilizada na fabricação de outros produtos como o açúcar invertido, açúcar refinado ou açúcar líquido.

3.1.2. Etapa de Evaporação

A evaporação, que constitui o primeiro estágio de concentração do caldo misto proveniente da seção de tratamento, tem o propósito de elevar a concentração da solução antes de enviá-la à etapa de cristalização.

O caldo que sai da etapa de extração e passa pela etapa de tratamento apresenta grande quantidade de água e concentração de 14 a 17 Brix (percentagem em peso de sólidos solúveis na solução). Na prática, pela evaporação da água poder-se-ia obter caldos com até 75 Brix sem que houvesse formação de cristais. Contudo, a concentração é elevada apenas até valores entre 50 e 70 Brix (Lopes e Parazzi, 1992).

O evaporador rotineiramente utilizado nas usinas de açúcar é o evaporador de tubos verticais, que trabalha de maneira contínua, com o movimento do líquido propulsionado pela convecção natural gerada por diferenças de temperatura na massa líquida em movimentação em seu interior. A superfície de aquecimento situa-se na parte inferior do corpo do aparelho e, entre duas chapas (espelhos), estão fixados os tubos

verticais (calandras) por onde circula o caldo em concentração. O vapor introduzido na calandra condensa-se entre os espelhos e externamente aos tubos cedendo energia ao líquido que se encontra no interior do equipamento.

Devido à intensa ebulição que ocorre na calandra do evaporador, muitas gotículas de caldo são atiradas ao corpo do evaporador. Uma fração dessas gotículas volta a cair sobre a calandra, enquanto que a outra, representada pelas gotículas menores, é arrastada pelos vapores ascendentes resultando numa perda significativa de açúcar. Quanto maior o vácuo existente no interior do aparelho, maior o perigo desse arraste ocorrer.

A fim de evitar essa perda, os evaporadores dispõem em sua parte superior de um dispositivo, separador de arraste, que utilizando a inércia das gotículas, faz com que estas, mediante uma súbita mudança na direção do vapor, separem-se dessa corrente e escurram novamente para o interior do corpo de evaporação.

3.1.2.1. Evaporador de Múltiplo Efeito

No evaporador de múltiplo efeito (EME) o vapor de um efeito precedente é utilizado para aquecer a caixa posterior. Após o primeiro efeito, os demais são colocados sob vácuo. A solução apresentada tem o inconveniente de exigir uma instalação para criar o vácuo necessário, porém possui duas grandes vantagens, a saber (Camargo, 1990):

→ Aumenta a diferença total de temperatura entre o vapor de uma caixa e a temperatura de ebulição do caldo da caixa seguinte; e

→ Permite continuar a evaporação com temperaturas menos prejudiciais sob o ponto de vista da qualidade do produto à medida que o caldo se torna mais concentrado e mais viscoso.

A Figura 3.1 mostra a representação de um evaporador de múltiplo efeito.

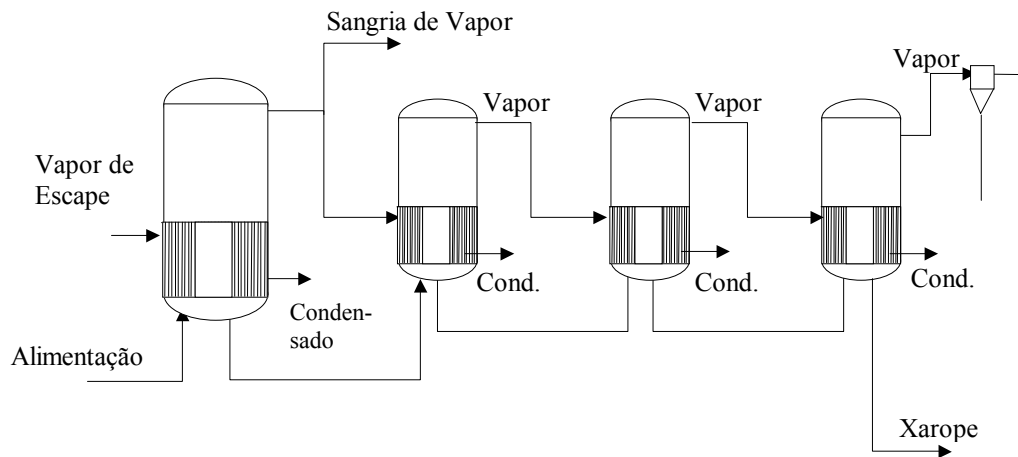


Figura 3.1: Representação esquemática de um evaporador de múltiplo efeito (EME).

Um fenômeno importante que ocorre na evaporação do caldo açucarado e em todas as soluções aquosas é a elevação do ponto de ebulição (EPE) (Camargo, 1990). A temperatura de ebulição de uma solução depende da pressão em que se encontra e da concentração de soluto que apresenta, neste caso, o Brix do caldo. Outra influência no valor da temperatura de ebulição é a pressão hidrostática, pois quando uma pressão é exercida sobre a superfície de um líquido, a pressão à qual são submetidas as moléculas do líquido que se encontram em uma certa profundidade na massa é igual a esta pressão acrescida do peso do líquido correspondente à sua profundidade.

De maneira geral, o sistema é constituído de três a cinco efeitos, onde o primeiro, denominado pré-evaporador, tem a sua superfície de troca térmica maior do que a dos efeitos seguintes. Parte dos efeitos trabalha com pressão abaixo da atmosférica, mantida por condensadores barométricos.

A maior área do pré-evaporador é proposital para que se tenha um excesso de vapor vegetal produzido (proveniente da evaporação do caldo), que pode ser extraído (sangrado) e utilizado em outras etapas do processo, como nos trocadores de calor e cristalizadores.

O vapor que alimenta o pré-evaporador é o vapor de escape com pressão em torno de $2,3\text{kgf/cm}^2$ abs ($2,26$ bar), proveniente das turbinas que trabalham a alta pressão (~ 22 bar). O coeficiente de troca térmica se relaciona diretamente com a extensão do calor trocado pelo sistema e pode ser usado para avaliar o desempenho do equipamento.

No que diz respeito aos extremos de temperatura possíveis para o caldo na evaporação, o limite superior é estabelecido pela caramelização do açúcar no caldo, enquanto que o limite inferior é dado pela qualidade do vácuo obtido no último efeito. Quanto ao controle do EME, este pode ser efetuado de várias maneiras (Jesus e Almeida, 1999), normalmente tendo como objetivo final o controle da concentração de saída do equipamento, porém poucas são as usinas que realmente o implementam de forma automatizada.

O vácuo é freqüentemente estabelecido da seguinte maneira: por meio de um ejetor se estabelece o vácuo em um recipiente fechado denominado condensador, que está em comunicação com os aparelhos nos quais se deseja gerar vácuo. Uma bomba leva água fria (que assegura a condensação do vapor vindo dos cozedores ou do EME) para este condensador, colocado a uma altura suficiente para que a água escorra por gravidade juntamente com o vapor condensado. A água é resfriada e reconduzida ao condensador como água fria, descrevendo um circuito fechado.

3.1.3. Etapa de Cristalização

Nesta etapa da produção do açúcar ocorre a cristalização da sacarose contida no xarope proveniente da seção de evaporação. A solução viscosa constituída de licor-mãe e cristais é agora denominada massa cozida.

Sua consistência não mais permite fervê-la em tubos estreitos e fazê-la circular facilmente de um corpo de evaporação a outro como no caso do EME. É utilizado então um cristalizador, que possui detalhes dimensionais melhor adaptados ao produto viscoso que deve ser concentrado. Este equipamento é geralmente denominado cozedor, cozedor à vácuo, tacho ou simplesmente vácuo.

A solubilidade da sacarose na água varia de acordo com a temperatura e aumenta rapidamente com esta. A 40°C, por exemplo, é possível dissolver 2,334 kg de açúcar puro em 1 kg de água; a 80°C, dissolvem-se 3,703 kg. Nestas condições a solução é dita saturada. Na prática, as soluções apresentam outras substâncias dissolvidas além do açúcar. Estas substâncias modificam a solubilidade do açúcar, reduzindo-a na mesma proporção que a pureza.

Na fase supersaturada, onde há mais açúcar dissolvido que no equilíbrio - a uma dada temperatura, distingue-se três zonas:

Zona metaestável: Esta é a mais próxima da saturação onde os cristais existentes aumentam de tamanho sem haver, porém, formação de novos cristais;

Zona intermediária: Nesta região, pode haver formação eventual de novos cristais desde que já existam cristais crescendo no meio; e

Zona lábil: Nesta fase, há simultaneamente crescimento e formação espontânea de novos cristais.

A separação entre as duas primeiras zonas é muito variável e controversa já que depende da pureza da massa e das condições de operação.

Durante o cozimento, é conveniente manter a supersaturação o mais próxima possível do limite superior da zona metaestável, pois a deposição de sacarose sobre os cristais é maior com uma supersaturação perto deste limite. Porém, a velocidade de cristalização depende também da viscosidade da massa cozida, da temperatura, da supersaturação e da pureza do licor-mãe.

Para se iniciar um cozimento, introduz-se um volume mínimo de xarope no cozedor, conhecido como volume de granagem ou “pé de cozimento”. Este volume inicial deve cobrir toda a calandra, do contrário, a ebulição lançaria o xarope sobre as partes metálicas aquecidas e ainda descobertas, provocando perdas por caramelização e alterações na coloração do açúcar.

No cozimento, a pressão hidrostática exerce uma influência ainda maior que na evaporação. À medida que o volume de cozimento vai aumentando, aumenta também a pressão hidrostática nas camadas inferiores da massa cozida. Isto pode fazer, em determinado momento, com que estas camadas não alcancem temperatura suficiente para entrar em ebulição. Prejudicando assim a boa circulação da massa cozida dentro do cozedor; fator muito importante durante esta etapa do processo.

As duas maneiras mais comuns de se iniciar a cristalização são:

Cristalização por espera - consiste em elevar a concentração do xarope de forma que a zona lábil seja atingida por um certo período de tempo sendo, a seguir, diluído a fim de trazer a supersaturação de volta à zona metaestável, onde os cristais crescerão.

Cristalização por semeadura verdadeira - consiste na elevação da concentração da solução até a zona metaestável, onde se introduz no cozedor uma certa quantidade de cristais de açúcar (sementes) que crescerão até o tamanho desejado. Atualmente, este é o método empregado pela maioria das usinas brasileiras e visa garantir uma maior homogeneidade granulométrica do açúcar.

3.1.3.1. Métodos de Esgotamento

Após o cozimento, os cristais formados são separados através de centrifugação e ficam retidos na peneira (cestas). Este açúcar é denominado açúcar de primeira e normalmente é comercializado. O licor-mãe separado na centrifugação é chamado mel de primeira.

O mel de primeira ainda possui uma grande proporção de açúcar cristalizável, porém de qualidade inferior. Este mel pode ser usado para formar uma massa cozida de segunda, que fornecerá mel de segunda e açúcar de segunda (Oliveira, 1964).

Esta operação pode ainda ser repetida, mas o número de massas cozidas é rapidamente limitado: o mel fica cada vez mais pobre em açúcar e nem todo açúcar contido no mel é cristalizável. Sua viscosidade vai aumentando, tornando-o de difícil operação. O último mel obtido é chamado de melaço ou de mel final e é utilizado pelas destilarias na produção de álcool etílico.

Existem vários métodos de esgotamento, porém todos são baseados na queda de pureza do mel. Um modo prático de se determinar a pureza é a relação entre percentagem em peso de sacarose aparente (Pol) e percentagem em peso dos sólidos solúveis em solução (Brix), ou seja:

$$\text{Pureza aparente \%} = 100 \text{ Pol} / \text{Brix}$$

Atualmente, o método de esgotamento mais utilizado no Brasil é o processo de duas massas cozidas ou variações deste. Nele, trabalha-se com uma massa cozida de primeira e outra de segunda. O mel final obtido ainda apresenta recurso esgotável, porém a maioria das indústrias de açúcar no país possui destilarias de álcool etílico anexas e o utilizam na sua produção. Esgotar muito este mel final aumentaria os custos da produção de açúcar e poderia provocar falta de matéria-prima para produção de álcool.

A Figura 3.2 esquematizada a seguir, ilustra o processo de cozimento de duas massas (Jesus, 2000). Apesar de estarem sendo mostrados apenas cristalizadores que operam em regime de batelada, é possível encontrar em umas poucas unidades industriais cristalizadores contínuos, substituindo principalmente os cristalizadores de segunda.

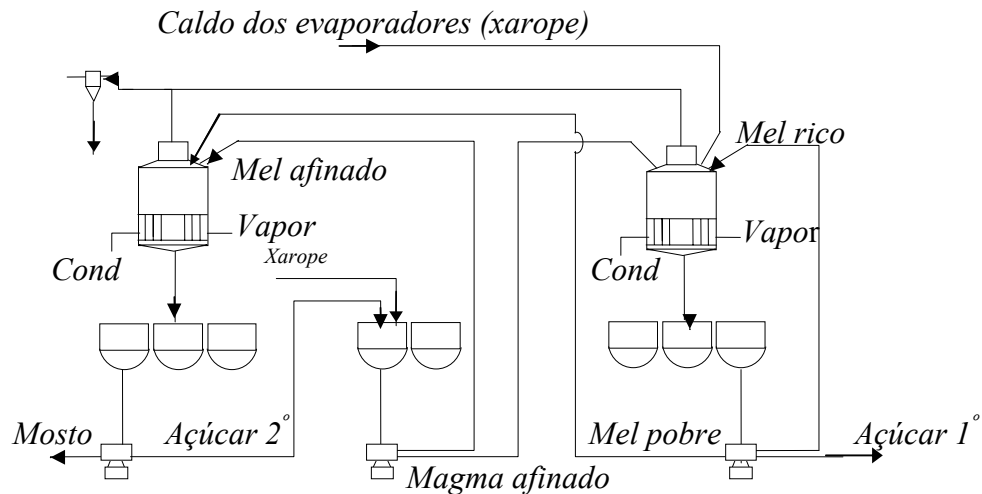


Figura 3.2: Método de esgotamento de duas massas.

A Figura 3.2 mostra uma massa cozida de primeira, com aproximadamente 75% de pureza, sendo obtida a partir de um "pé de cozimento" formado pelo magma (açúcar de segunda dissolvido) e pela alimentação de xarope puro com introduções de correntes de mel rico e, se necessário, de correntes de mel pobre. Na turbinagem (centrifugação) desta massa cozida obtém-se o açúcar de primeira, geralmente comercializado, e o mel pobre. A matéria açucarada que fica no cesto das centrífugas é dissolvida com vapor ou água e forma o mel rico.

A massa cozida de segunda, com pureza entre 60 e 70%, é obtida a partir da mistura de xarope e mel pobre. Esta massa cozida produz o mel final, que pode seguir para a destilaria, e o açúcar de segunda ou magma, que é utilizado para o cozimento de primeira e misturado com o xarope puro devido a sua pureza elevada (~90%).

O cozimento de duas massas pode apresentar algumas pequenas variações, como por exemplo, o sistema de duas massas com afinação. Este sistema é igual ao descrito acima, porém a modificação surge na turbinagem da massa de segunda. O açúcar de segunda ou magma é misturado com xarope e/ou água quente, formando uma nova massa que é turbinada, obtendo-se magma afinado, utilizado no cozimento de primeira, e mel afinado, utilizado no cozimento de segunda. Este recurso serve para aumentar a pureza do magma de 90% para 98% (pureza do magma afinado), pois o cozimento de primeira será melhor realizado quanto mais puras forem as matérias utilizadas.

Tão logo sejam formados os cristais de sacarose na quantidade e tamanho desejados, encerra-se a operação de cozimento. A suspensão é descarregada em um tanque intermediário onde a massa resfria, antes de seguir para as centrífugas que separam os cristais do mel. A razão para esta etapa intermediária é que a massa cozida, que sai do cozedor, apresenta uma supersaturação muito pronunciada. Deixando-a em repouso, o açúcar ainda contido no licor-mãe continua a depositar-se sobre os cristais. Esta massa é agitada constantemente visando mudar as posições relativas das porções de licor-mãe e dos cristais.

A massa é enviada para as centrífugas para que os cristais sejam separados. Os cristais são retidos pela tela do cesto onde inicialmente a massa está presente. O mel ultrapassa as perfurações desta tela e é recolhido em tanques.

É chamado de ciclo completo de turbinagem o tempo desde o carregamento da centrífuga até a descarga dos produtos finais. Sob o ponto de vista da turbinagem (centrifugação), pode-se distinguir três frações de mel:

- O excesso de mel, que é a porção acima da necessária para preencher os espaços entre os cristais. Este excesso é expulso facilmente;
- A porção necessária ao preenchimento dos espaços entre os cristais, é de remoção mais difícil que a primeira e sai com a centrifugação da massa;
- A película de mel que envolve os cristais. É a mais difícil de ser extraída, devido a sua alta viscosidade e aderência.

Por causa desta película, não é possível produzir açúcar comercial aceitável sem executar a lavagem dos cristais. Esta consiste na pulverização de água superaquecida ou vapor sobre a camada de açúcar, após a separação das primeiras porções de mel. A água lava a película e a arrasta, ao mesmo tempo em que dissolve um pouco de açúcar. Deste modo, a lavagem fornece um mel com uma pureza elevada ($\pm 81\%$), chamado de mel rico. Pode ser utilizado também vapor de baixa pressão no lugar de água, pois este dissolve menos o açúcar e aquece melhor a massa turbinada, melhorando, assim, sua fluidez.

O açúcar já centrifugado é descarregado em esteiras e segue para a secagem caso seja açúcar de primeira, ou retorna ao processo caso seja açúcar de segunda.

3.1.4. Cristalização Industrial

De modo geral, no processo de cristalização dois passos estão envolvidos na formação de cristais macroscópicos: surgimento de núcleos e o crescimento destes núcleos. A natureza complexa do fenômeno de crescimento de cristais vem de relações entre transferência de massa e resistência à integração superficial, necessitando-se algumas vezes de conhecimentos do comportamento hidrodinâmico dos sistemas (Randolph e Larson, 1988) - Figura 3.3.

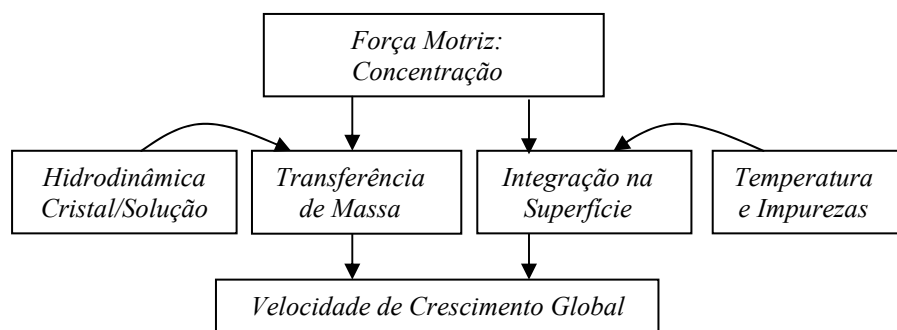


Figura 3.3: Fatores que influenciam a velocidade de crescimento global dos cristais.

Mesmo em experimentos bem controlados existe uma variação na velocidade de crescimento dos cristais. Este fenômeno é chamado de dispersão na velocidade de crescimento, e demonstra influência de fatores estocásticos no processo. Como não haverá duas partículas com exatamente o mesmo tamanho, a caracterização do material deve ser feita por meio da distribuição de tamanhos de partícula (DTP); no caso de cristais, distribuição de tamanho de cristais (DTC).

A DTC apresenta complexas interações com fatores que a influenciam. A Figura 3.4 mostra de forma simplificada tais interações:

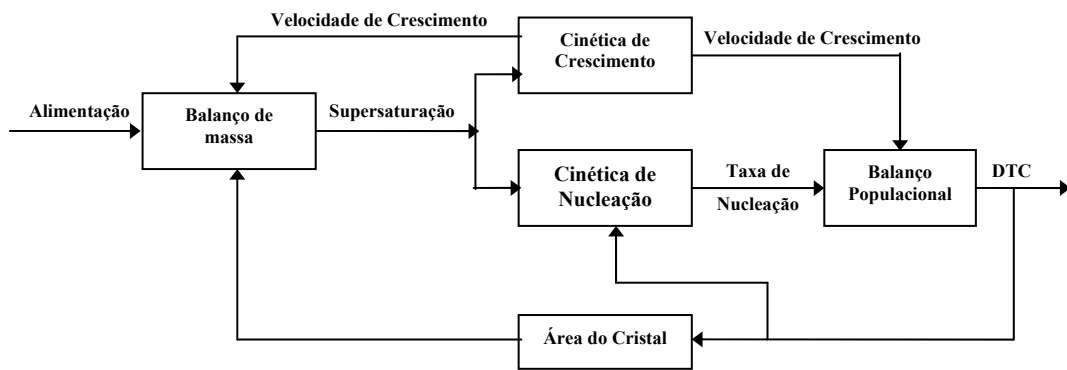


Figura 3.4: Interação dos fatores de cristalização com a DTC.

A amostragem de cristalizadores em escala industrial é seguida pela manipulação da amostra de modo a torná-la adequada ao método de análise a ser utilizado. Por exemplo, a extração de uma amostra representativa do conteúdo de um cristalizador operando a alta temperatura e baixa pressão. Neste caso quando exposta à temperatura e pressão ambiente, a amostra tende a sofrer uma expansão "flash". Em tais casos é aconselhável que se diminua o tempo de amostragem e de manejo e que seja efetuada a separação dos cristais do licor mãe de forma rápida e eficiente de modo a interromper o processo de cristalização.

Uma vez conseguida a amostra é comum se separar os cristais do licor mãe o mais rápido possível. Normalmente tal ação envolve a filtração, lavagem e secagem dos cristais. Entretanto cada uma destas ações pode afetar a distribuição de tamanho de cristal original, daí a necessidade de um estudo de situação para situação.

A complexidade da análise do tamanho de cristais já é reconhecido de longa data; a forma da partícula, sua densidade, área, irregularidade e a aglomeração são fatores que devem ser considerados. É impossível cobrir toda a faixa de tamanhos que ocorrem nos sistemas de cristalização. Se uma faixa mais ampla tiver que ser analisada, diferentes princípios físicos ou diferentes dimensões geométricas dos sensores devem ser utilizados (Randolph e Larson, 1988).

A contagem e medição do tamanho de partículas utilizando um microscópio é um trabalho tedioso e que toma um grande tempo, enquanto que o peneiramento é provavelmente o mais fácil e certamente o método mais popular, embora tenha certas restrições de aplicabilidade. Uma técnica apropriada para a análise de pequenos cristais é o princípio do contador Coulter. Já outra técnica que está ganhando cada vez mais espaço no auxílio da contagem e determinação do tamanho de partículas é a análise de imagens.

3.2. Literatura de Simulação e Identificação de Processos

Durante a revisão da literatura foram encontrados dois trabalhos abrangentes relacionados com a estimativa de propriedades de soluções de açúcar (Peacock, 1995; Bretschneider e Dandar, 1981). Estes trabalhos foram de grande valia para o pesquisador, pois apresentam uma compilação das correlações empíricas e semi-empíricas que estão disponíveis na literatura ou que são utilizadas de forma corrente nas indústrias. As propriedades encontradas nestes dois trabalhos são: elevação do ponto de ebulição, densidade do xarope, entalpia, capacidade térmica, solubilidade da sacarose, tensão superficial (apenas em Peacock, 1995), condutividade térmica, viscosidade e coeficiente de difusão da sacarose (apenas em Bretschneider e Dandar, 1981).

A simulação de uma fábrica de açúcar é relatada por Friedman e Perez de Alejo, 1979. Os módulos do processo são descritos e o fluxograma geral da simulação é apresentado. No trabalho, para a simulação, foi usado o programa GEMCS, que apresenta uma abordagem modular seqüencial de resolução do modelo. Interessante notar que o trabalho comparou um modelo básico simplificado com um modelo mais complexo ("Estado da Arte") e os resultados destes, para a grande maioria das variáveis calculadas, não diferiram mais que poucos pontos percentuais.

Um estudo sobre cristalização de açúcar em cristalizadores industriais foi feito por Gros e Nurmi, 1979. Neste trabalho, são mostrados os modelos determinísticos e de crescimento dos cristais de sacarose, o controle do cristalizador e o cálculo de propriedades da solução de modo a se efetuar a simulação dinâmica da operação do equipamento no computador.

Madsen, 1996, mostra um programa para cálculo de balanços de energia em indústrias de açúcar, dando ênfase à evaporação. No seu trabalho, a comparação dos resultados foi feita com os evaporadores de várias indústrias, chegando-se a conclusões sobre o benefício do uso de evaporadores de filme descendente.

Bolmstedt, 1977, delinea em seu trabalho o modelo de um evaporador múltiplo efeito genérico, usando o conceito de célula unitária. Na verdade, este módulo abriga o evaporador e alguns equipamentos secundários. O programa apresentado usa uma abordagem modular-sequencial para efetuar as simulações no regime estacionário e no regime dinâmico.

A forma para se efetuar o cálculo de algumas propriedades físico-químicas de soluções de sacarose, a saber: densidade, solubilidade, elevação do ponto de ebulição, viscosidade, entalpia, calor específico, entre outras, são apresentadas por Kadlec e Dandar, 1981, na forma de um programa de computador escrito na linguagem FORTRAN. O código do programa é apresentado no trabalho assim como os fluxogramas dos algoritmos utilizados, o que facilita a programação em outras linguagens.

O trabalho de Georgieva, 2003, descreve o desenvolvimento de um modelo híbrido de um cristalizador de açúcar de escala industrial. A autora afirma que os modelos fenomenológicos da cristalização não predizem de maneira satisfatória o tamanho médio dos cristais e o coeficiente de variação, principalmente devido à complexidade das inter-relações entre as variáveis. O trabalho sugere a utilização de redes neurais na inferência de parâmetros cinéticos que seriam utilizados nas equações de balanço do sistema. Foi relatado que os dados obtidos naquele trabalho se mostraram mais representativos que aqueles que utilizaram correlações para prever os parâmetros cinéticos.

Feyo de Azevedo e colaboradores, 1997, discutiram as vantagens da utilização de redes neurais híbridas na modelagem de bioprocessos. Foram utilizados dois grupos de experimentos e a conclusão qualitativa do estudo mostrou que o modelo determinístico dos experimentos, usando reações com cinéticas disponíveis na literatura e bem ajustadas por métodos clássicos de regressão, não foram capazes de representar satisfatoriamente os dados reais. Já a rede neural gerou boas previsões dos dados de treinamento, mas mostrou uma habilidade limitada em gerar extrapolações para dados de entrada com valores fora do domínio do treinamento. Devido ao modelo híbrido ter conseguido um desempenho melhor que estes últimos e por outras vantagens citadas no trabalho, os autores encorajam o estudo do uso de redes neurais híbridas em identificação e controle de processos biotecnológicos.

Nevière *at al*, 1994, relatam detalhadamente as etapas de construção de um simulador inteligente específico para a simulação dinâmica da operação de uma fábrica de vinho. As etapas de idealização seqüencial do simulador são mostradas em quatro níveis de abstração ou complexidade. O modelo foi estruturado hierarquicamente e implementado na linguagem C++, em um ambiente de programação orientado a objetos. Técnicas de inteligência artificial e lógica nebulosa (*fuzzy*) foram citadas como possibilidades para otimizar o processamento diário da planta.

Hussain (1999) apresenta uma extensiva revisão das várias aplicações da técnica de redes neurais para o controle de processos químicos, tanto na simulação quanto na implementação em linha. Os assuntos foram categorizados dentro dos três maiores esquemas de controle, a saber, controle preditivo, controle baseado no modelo inverso e métodos adaptativos de controle. O autor atribui a "explosão" no número de aplicações de redes neurais a cinco principais fatores: (1) os grandes avanços na tecnologia digital e nos equipamentos na última década, (2) a capacidade das redes tem se mostrado superior às tradicionais técnicas e aos sistemas especialistas na classificação de padrões, (3) as redes neurais se apresentam como uma alternativa simples e eficiente em aplicações onde ocorrem não linearidades severas ou desconhecidas, como as que são normalmente encontradas nos processos químicos, (4) a facilidade em ser apenas "usuário" da técnica, em contra ponto com a dificuldade em se desenvolver modelos determinísticos de processos complexos ou pouco conhecidos, e (5) a possibilidade de se acoplar os modelos teóricos na estrutura das redes neurais, ou vice-versa, de modo a gerar modelos "caixa cinza", que além de gerarem valores provindos de relações entrada-saída, podem também ajudar no entendimento do processo em um sentido mais rigoroso.

Qin (1996) mostrou de forma bastante didática e modular os passos que devem ser levados em consideração na implementação da identificação de processo com uma rede neural. Foram focados na metodologia as características, a coleta e o pré-processamento dos dados e a seleção das variáveis representativas do processo. Foram também discutidas a influência do efeito de colinearidade dos dados de entrada na etapa de treinamento e a integração de redes neurais com métodos estatísticos.

Em seu trabalho Sha *et al.* (2001) sugeriram uma metodologia para o desenvolvimento de uma rede neural híbrida que fosse de aplicação geral na simulação de cristalizadores não-ideais e também flexível o bastante para ser utilizada com várias espécies químicas. A intenção da rede gerada no trabalho foi representar e projetar processos de cristalização que se encontrem no estado estacionário. Os resultados obtidos pela rede foram verificados por equações teóricas e dados experimentais. A precisão da saída da rede mostrou-se dependente dos parâmetros do modelo da taxa de nucleação e do parâmetro de Rosin-Rammler, que está relacionado com a distribuição dos tamanhos dos cristais.

Nos trabalhos de Meleiro e Maciel Filho (2000) e Meleiro *et al.* (2001) os autores utilizam as redes neurais no processo industrial de produção de álcool a partir da

cana de açúcar. O primeiro trata da implementação de um controlador de ajuste autoadaptativo aplicado para o controle da quantidade total de açúcares redutores (ART) na última dorna de fermentação do processo manipulando-se a vazão de entrada do processo. A rede neural foi utilizada como *software* sensor relacionando a entrada do processo com a ART, a concentração de etanol e a concentração de biomassa na última dorna. No segundo trabalho os autores acoplaram a rede neural com lógica nebulosa (*fuzzy*) para gerar sistemas hierárquicos neural-*fuzzy* capazes de lidar com situações de larga escala. A idéia foi utilizar uma estrutura hierárquica de subsistemas neural-*fuzzy* conectados em cascata ao invés de utilizar apenas um sistema de grande dimensão. As predições geradas pelo sistema hierárquico desenvolvido se ajustaram muito bem aos valores reais da planta, corroborando a idéia inicial do trabalho.

A técnica de redes neurais artificiais foi utilizada na modelagem da evaporação do xarope de cana e na cristalização de açúcar nos trabalhos de Benne *et al.* (1999a e 1999b). A abordagem escolhida foi gerar um modelo totalmente "caixa-preta" dos equipamentos. O processo de evaporação é composto, na planta em questão, de cinco blocos funcionais idênticos conectados em série. A rede utilizada tinha uma topologia 2-4-1, onde as entradas correspondiam à concentração de entrada e à pressão do vapor de aquecimento e a saída à concentração de saída. Os resultados foram muito animadores, uma vez que mesmo com a concentração do xarope do último efeito variando 25 Brix, o erro absoluto da rede foi de aproximadamente 0,4 Brix. Uma versão recorrente da rede neural foi desenvolvida, porém não obteve a mesma capacidade de ajuste. Um resultado similar foi obtido na modelagem da etapa de cristalização. As quatro entradas da rede neural foram a vazão de entrada de xarope, o nível da solução no equipamento, a temperatura do líquido e o vácuo no equipamento. A variável predita, a condutividade da massa, se ajustou muito bem aos dados reais, fortalecendo a idéia que esta técnica apresenta características positivas para a utilização na identificação de sistemas na área de produção de açúcar.

Molga e Cherbanski (1999) checaram a habilidade de uma rede neural multicamadas modelar simultaneamente a transferência de massa e a reação química ocorrendo em solução. A reação em questão foi a hidrólise do anidrido propiônico a ácido propiônico, que foi desenvolvida em um reator CSTR para os casos batelada e semi-batelada. As equações diferenciais do balanço dos componentes foram acopladas à rede neural e concluiu-se que apesar da flexibilidade da rede e dos resultados reduzirem

significativamente os esforços experimentais, a precisão dos valores preditos era muito dependente do grupo de dados utilizados na fase de aprendizagem da rede.

Aguiar e Maciel Filho (2001) utilizaram três abordagens (modelo determinístico puro, rede neural pura e uma rede neural híbrida) para a estimativa do parâmetro Kappa no processo de produção de papel. Este parâmetro representa o grau de delignificação da polpa, ou seja, a quantidade remanescente de lignina, material que mantém as fibras da madeira juntas, na polpa. A rede utilizada possuía nove neurônios na camada de entrada, duas camadas intermediárias (com 12 e 10 neurônios, respectivamente) e apenas um neurônio na camada de saída, ou seja, rede com topologia 9-12-10-1. A rede pura conseguiu reproduzir os valores experimentais satisfatoriamente depois de otimizada e da filtragem dos dados de treinamento. A inclusão do conhecimento teórico na estrutura da rede reduziu o tempo de treinamento e fez com que a esta fizesse melhores predições.

Milanic e colaboradores (1997) focaram um processo de hidrólise onde o objetivo da rede neural foi gerar um modelo do processo que pudesse ser utilizado para o controle do processo, mais especificamente para diminuir a flutuação da qualidade dos produtos e tornar mais constante a duração de cada batelada. Foram utilizados "dados de treinamento ampliados", onde há uma complementação de um pequeno número de dados experimentais com valores gerados por um modelo semi-empírico, não necessariamente muito preciso. Três tipos de modelos foram utilizados e parcialmente validados: um modelo semi-empírico, um modelo neural de pesos de ativação aleatórios (*random activation weight network*) onde os valores dos pesos da camada oculta são regularizados em função dos sinais de entrada; e uma rede OMN (*Ontogenic Least Square Multilayer Network*), que durante o treinamento aumenta o número de neurônios na camada oculta conforme se faz necessário. Apesar das limitações impostas pelos poucos dados de treinamento e validação os autores concluíram que, apesar do modelo semi-empírico ter se mostrado o que melhor se ajustou aos dados, os modelos neurais mostraram um potencial que deve ser explorado em trabalhos futuros.

Uma outra rede neural híbrida foi desenvolvida no trabalho de Guo *et al.* (1997), nele a rede foi treinada para gerar parâmetros para o modelo determinístico da gaseificação de carvão. Foram utilizados dois grupos de valores de treinamento para duas variedades de carvão. A rede era do tipo *feedforward* padrão, porém suas saídas não eram conhecidas *a priori*, visto que eram desejados os parâmetros do modelo determinístico. Desta forma ao invés de utilizar o algoritmo de retropropagação foi

adotado o algoritmo de busca direta aleatória, onde, como já explicado, os pesos eram ajustados através de pequenos incrementos aleatórios. Um aspecto que torna este trabalho um pouco diferente dos demais é que para a estimativa de cada parâmetro havia uma rede neural, ou seja, várias redes eram utilizadas em paralelo, antes de serem introduzidos os valores no modelo determinístico.

Linko e colaboradores (1997) demonstraram que uma rede neural bem treinada pode ser empregada como *software* sensor na estimação e predição em linha de parâmetros de processo na produção de enzimas (glucoamilase fúngica e lipase de fermento). São descritos os passos seguidos no desenvolvimento da rede neural, como por exemplo, a escolha de sua topologia e o estudo do melhor número de neurônios na camada escondida.

A pesquisa de Fu e Barford (1996), também na área de biotecnologia, é centrada na utilização de redes neurais híbridas na modelagem do metabolismo celular para a utilização em estudos de simulação e controle de processos. A rede foi projetada para ajustar os parâmetros do modelo com um esquema de aprendizado reforçado, uma vez que a o vetor de saída da rede, ou os parâmetros mais apropriados, eram desconhecidos. A rede híbrida, quando comparada com suas abordagens formadoras, obteve resultados claramente superiores na predição de consumo de substrato, acúmulo tóxico de subprodutos, crescimento celular, composição celular e formação de produtos metabólicos. O modelo foi testado no processo de produção de anticorpos por células animais.

Nascimento e colaboradores (2000) sugerem o uso de redes neurais na otimização de processos químicos. Embora a otimização sem um modelo seja possível (utilizando técnicas como planejamento de experimentos), o custo e os esforços experimentais envolvidos podem ser significativos, em especial quando o número de variáveis envolvidas é grande. É sugerido pelos autores que os modelos sejam aproximados por modelos de redes neurais, por ser um importante pré-requisito na otimização de processos e também porque, algumas vezes, estes são difíceis de serem desenvolvidos através dos princípios fundamentais. A idéia principal do trabalho é implementar uma detalhada busca seguindo uma malha da região de interesse através de um mapeamento completo da função objetivo no espaço de decisão das variáveis. A técnica sugerida foi utilizada com os dados de dois processos industriais e mostrou-se eficiente.

Um reator de leito fixo foi modelado no trabalho de Qi *et al.* (1999) através de uma rede neural híbrida. Foram acopladas à rede as equações do balanço de massa e energia para o desenvolvimento de dois modelos híbridos, um do estado estacionário e um do dinâmico, para um reator de leito fixo no qual ocorria a oxidação do benzeno, em ar, para a formação de anidrido maléico. A rede utilizada tinha três camadas, tendo como variáveis de entradas a vazão de benzeno, a temperatura do líquido de resfriamento, e a vazão de ar, e como variável de saída o coeficiente global de troca térmica. Normalmente, segundo os autores, para reatores de leito fixo onde ocorrem reações altamente exotérmicas, os modelos unidimensionais são insuficientes para modelar o reator. Porém os resultados gerados pela rede neural híbrida se mostraram tão precisos quanto aqueles gerados por modelos bidimensionais que levam em conta o gradiente radial de temperatura.

Durante processos biotecnológicos, tais como a fermentação, muitas variáveis, por exemplo a concentração, são determinadas em análises *off-line*, fazendo com estas tenham uma utilidade limitada no controle do processo. O trabalho de Assis e Maciel Filho (2000) sugere a estimação *on-line* de variáveis de estado de bioreatores através do uso de *software* sensores. Neste trabalho são apresentadas breves revisões de técnicas como estimativa através de balanços, observadores adaptativos, técnicas de filtragem de dados (filtro de Kalman e filtro de Kalman estendido) e redes neurais. Também é citada como promissora a técnica de algoritmos genéticos (AG), onde múltiplos pontos do espaço de soluções são calculados simultaneamente, fazendo assim com que haja uma maior probabilidade do erro convergir para o mínimo global.

Fontaine e Germain (2001) utilizaram uma rede neural híbrida no modelamento de uma reação em série ($A \rightarrow B \rightarrow C$). Os resultados "experimentais" foram gerados a partir de um modelo determinístico e o algoritmo de treinamento permitia que o número de neurônios na camada oculta variasse, de modo a obter um melhor desempenho.

No estudo de Wang *et al.* (1998) são apresentadas estratégias para a modelagem e controle de processos não lineares, nos quais este último foi modelado utilizando redes neurais. Foi constatado que o aumento do número de entradas não necessariamente aumenta a capacidade de generalização da rede, podendo provocar até mesmo o surgimento de problemas de convergência, aumento da complexidade e aumento do esforço computacional. Como caso de estudo, foi utilizado o problema do controle de pH, e os resultados reproduziram bem o sistema real.

No trabalho desenvolvido por Valentin *et al.* (1999) uma rede neural foi utilizada com o intuito de controlar a quantidade de coagulante no processo de uma planta de tratamento de água, de capacidade de 120.000 m³ por dia. A taxa de dosagem de coagulante estava correlacionada de forma não linear a com parâmetros como turbidez, condutividade, pH, temperatura, etc. Antes de utilizar os dados oriundos da planta, foi desenvolvida pelos autores uma metodologia para a validação dos dados de entrada, através de duas maneiras, uma associava à medida um "valor de confiança" que a tornava aceitável ou não por meio de uma faixa de valores escolhidos, e a outra utilizava mapas auto-organizados (*self-organizing map*, SOM) para a validação e reconstrução dos dados. A base de dados disponível era formada por 1600 medidas de cada variável, sendo que 70% dos dados foram utilizados para o treinamento da rede. A rede treinada, além de estimar a taxa de dosagem do coagulante também foi empregada na detecção de falhas de sensores, mostrando bons resultados em ambos os casos.

Xu e colaboradores (2001) utilizaram redes neurais puras para a detecção de falhas nos sensores de uma usina de geração de energia a partir da queima de combustível fóssil. Um diferencial do sistema apresentado neste trabalho, quando comparado com as metodologias já citadas, foi a capacidade da rede se auto ajustar. Com o passar do tempo, mudanças de equipamento, mudanças cíclicas no processo, ou uma reconfiguração do mesmo, podem gerar desvios residuais nos sensores fazendo com que a rede já treinada não seja mais apropriada e deva ser novamente treinada. Para mudanças não muito grandes a rede foi ajustada por meio de um algoritmo de regressão linear - Decomposição Truncada de Valores Singulares (*Truncated Singular Value Decomposition*, TSVD) - que alterava apenas a camada de saída. Promover um novo treinamento em linha de uma rede mal ajustada não é recomendável pois o método de aprendizado pode "ficar preso" em um mínimo local, não conseguindo melhorar o desempenho da rede.

O trabalho de Tuner *et al.* (1996) relatou o desenvolvimento de uma rede neural dinâmica que foi aplicada no esquema de controle baseado em modelo de uma coluna de destilação com comportamento altamente não linear. Foi efetuada uma análise de correlação cruzada nos dados de entrada para identificar tempos mortos, constantes de tempo do processo, etc. A validação do modelo da rede foi realizada mediante comparação com um modelo representativo e já utilizado, desenvolvido no módulo *Speedup* simulador de processos *Aspen*. A última etapa foi a implementação e teste do controle preditivo baseado no modelo da rede neural que, para dados apresentados,

obtiveram um desempenho muito superior ao controlador PI e o controlador preditivo baseado em um modelo linear.

Pode-se notar por este conjunto de trabalhos que, apesar das aplicações relatadas referirem-se a implementações de redes neurais em sistemas reais, poucas delas referem-se a sistemas de porte médio ou grande. Contudo, este número tende a crescer, pois ainda há muito por fazer tanto no terreno teórico quanto nos diversos campos da engenharia em escala industrial.

3.3. Redes Neurais

A matemática envolvida na teoria das redes neurais não será abordada no momento. As redes serão, então, apresentadas de maneira geral preferindo-se abordá-las como uma ferramenta da identificação de sistemas.

As redes neurais surgiram por volta dos anos 50 e a idéia inicial era simular a atividade neuronal humana, definindo componentes lógicos similares aos neurônios naturais. O neurobiologista McCulloch e o estatístico Pitts foram os primeiros a propor o conceito de um neurônio como sendo uma unidade de processamento que recebia vários estímulos de entrada e gerava um sinal baseado no resultado do somatório destes estímulos.

Na década de 60, Marvin Minsky, um dos expoentes da Inteligência Artificial, conseguiu provar que as redes neurais eram incapazes de simular certas funções. Somente na década de 80, com a descoberta de novas técnicas de aprendizado que definiam uma nova estrutura para as redes, na qual os cálculos de Minsky não se aplicavam, é que o campo tomou novo impulso. Daí o porquê de muitos historiadores desconsiderarem a existência de pesquisa nessa área nos anos 60 e 70, apontando uma retomada das pesquisas com a publicação dos trabalhos do físico e biólogo Hopfield em 1982.

Uma das primeiras aplicações das redes neurais foi no desenvolvimento de *software* de reconhecimento de caracteres (*Optical Character Recognition*, OCR). Na indústria, as redes neurais começam a ser muito utilizadas em aplicações para controle de processos industriais, pois estas lidam com parâmetros variáveis no tempo e são muito flexíveis se comparadas com as abordagens tradicionais.

Um modelo baseado em Redes Neurais é, essencialmente, um modelo empírico, diferentemente de modelos construídos utilizando-se princípios básicos (equações de balanço em processos químicos ou físicos). Por isso, as redes neurais necessitam de muitos dados para resolver problemas complexos propostos.

Em linhas gerais, uma rede neural é uma estrutura composta de nós, associados a pesos. Os nós são conectados uns aos outros e qualquer sinal se propaga por todos eles de forma a alterar-lhes os pesos. Em teoria, a rede terá tantos nós quanto mais precisa for a resposta desejada a um estímulo externo. A rede deve ser treinada sobre o problema em questão e para isso lhe serão fornecidos dados de entrada e implementadas propagações de forma que a alteração dos pesos ao longo da rede forneça uma saída compatível com a resposta conhecida àquele estímulo pré-determinado. Desta forma, os pesos são balanceados, ou otimizados, até obter um padrão de respostas aos estímulos, compatível com aquele que se conhece. Sendo que este processo de aprendizado é essencialmente empírico.

Genericamente, pode-se subdividir as redes neurais em duas categorias básicas, em função de como são dispostos os neurônios e de como é efetuado seu treinamento. Em função do fluxo de dados estes podem ser propagados unidirecionalmente, apenas para frente (*feedforward networks*) ou nos dois sentidos (redes recorrentes). Em função do tipo de treinamento estas podem ter o treinamento supervisionado ou não.

Todo o "conhecimento" de uma rede neural está armazenado em suas sinapses, ou seja, nos pesos relativos às conexões entre os neurônios. Ele é adquirido por um processo de treinamento, que consiste na apresentação de seqüência de dados conhecidos à rede neural, gerando um processo de ajuste dos pesos das sinapses de forma a ajustar as saídas das redes à um comportamento esperado. Como já foi dito o treinamento pode ser supervisionado ou não. No primeiro caso, é incluída no processo de treinamento uma etapa de verificação dos resultados calculados pela rede neural em treinamento. O erro observado a partir da comparação de resultados reais com os calculados pode ser utilizado para ajustar os pesos das sinapses de forma a aumentar a precisão da resposta da rede.

Nas redes neurais onde o treinamento não é supervisionado ocorre um processo interno de organização dos dados que leva a um grau ótimo de ajuste. Essas redes auto-organizadas podem, por exemplo, dividir dados fornecidos em categorias, em função do grau de similaridade entre eles, de forma totalmente automática.

De modo geral, o uso de redes neurais apresenta as seguintes vantagens:

- Há menor necessidade de se determinar *a priori* quais são os fatores determinantes sobre o modelo que está sendo desenvolvido;
- É permitida a interferência de múltiplos fatores de entrada (ou seja, múltiplas variáveis), permitindo um inter-relacionamento mais complexo entre elas;
- Alta tolerância a falhas, uma vez que é permitida a entrada de grande número de parâmetros;
- Modelamento direto do problema, sem a necessidade de se seguir um modelo preestabelecido, como no caso da regressão estatística;
- Paralelismo inerente: cada sinapse na rede neural pode ser seu próprio processador.

Os passos necessários para o desenvolvimento de aplicações utilizando redes neurais artificiais podem ser resumidos como segue:

1 e 2. Coleta de dados e separação em conjuntos

Os dois primeiros passos do processo de desenvolvimento de redes neurais artificiais são a coleta de dados relativos ao problema e a sua separação em um conjunto de treinamento e um conjunto de testes. Esta tarefa requer uma análise cuidadosa sobre o problema para minimizar ambigüidades e erros nos dados. Além disso, os dados coletados devem ser significativos e cobrir amplamente o domínio do problema; não devem cobrir apenas as operações normais ou rotineiras, mas também as exceções e as condições nos limites do domínio do problema.

Normalmente, os dados coletados são separados em duas categorias: dados de treinamento, que serão utilizados para o treinamento da rede e dados de teste, que serão utilizados para verificar seu desempenho sob condições reais de utilização. Além dessa divisão, pode-se usar também uma subdivisão do conjunto de treinamento, criando um conjunto de validação, utilizado para verificar a eficiência da rede quanto a sua capacidade de generalização durante o treinamento, e podendo ser empregado como critério de parada do treinamento.

Depois de determinados estes conjuntos, eles são geralmente colocados em ordem aleatória para prevenção de tendências associadas à ordem de apresentação dos dados. Além disso, pode ser necessário pré-processar estes dados, através de normalizações, escalonamentos e conversões de formato para torná-los mais apropriados à sua utilização na rede.

3. Configuração da rede

O terceiro passo é a definição da configuração da rede, que pode ser dividida em três etapas:

- a) Seleção o tipo de rede neural apropriada à aplicação;
- b) Determinação da topologia da rede a ser utilizada - o número de camadas, o número de unidades em cada camada, etc;
- c) Determinação de parâmetros do algoritmo de treinamento e funções de ativação. Este passo tem um grande impacto no desempenho do sistema resultante.

Toda rede neural toma uma entrada numérica e produz uma saída numérica. A função de ativação de um neurônio é escolhida de tal forma a aceitar qualquer faixa de entradas e produzir uma saída limitada, ou saturada. Devido a esta saturação o neurônio é sensível apenas em uma faixa limitada de valores. Dentre as funções de ativação mais utilizadas tem-se a função sigmoidal, que apresenta a forma de S. As funções normalmente também são suaves e diferenciáveis, fatos que são críticos para a operação do algoritmo de treinamento, sendo esta a razão para que na prática a função degrau não seja muito utilizada. Como exemplo de outras funções de ativação poder ser citadas: a log-sigmoidal, a linear, a de base radial, tangente-sigmoidal, entre outras.

Assim como há muitas funções de ativação também há muitos métodos de otimização utilizados para o ajuste dos pesos das redes neurais. Por exemplo: o método de retropropagação (*backpropagation*) e suas modificações (retropropagação resiliente, *quick propagation* e o Delta-Bar-Delta), métodos baseados no gradiente descendente, métodos de Quase-Newton e o Levenberg-Marquardt.

A definição da configuração de redes neurais ainda pode ser considerada uma "arte", pois requer grande experiência do usuário.

4. Treinamento

O quarto passo é o treinamento da rede. Nesta fase, seguindo o algoritmo de treinamento escolhido, serão ajustados os pesos das conexões. É importante considerar, nesta fase, alguns aspectos tais como a inicialização da rede, o modo de treinamento e o tempo de treinamento.

Uma boa escolha dos valores iniciais dos pesos da rede pode diminuir o tempo necessário para o treinamento. Normalmente, os valores iniciais dos pesos da rede são números aleatórios uniformemente distribuídos, em um intervalo definido. A escolha errada destes pesos pode levar a uma saturação prematura.

Quanto ao tempo de treinamento, vários fatores podem influenciar a sua duração, porém sempre será necessário utilizar algum critério de parada. O critério de parada do algoritmo *backpropagation* não é bem definido, e geralmente é utilizado um número máximo de ciclos. Mas, devem ser consideradas a taxa de decréscimo do erro médio por ciclo, e a capacidade de generalização da rede. Pode ocorrer que em um determinado instante do treinamento a generalização comece a degenerar, causando o problema de *over-training*, ou seja a rede se especializa no conjunto de dados do treinamento e perde a capacidade de generalização.

O treinamento deve ser interrompido quando a rede apresentar uma boa capacidade de generalização e quando a taxa de erro for pequena e o erro seja suficientemente menor que um erro admissível. Assim, deve-se encontrar um ponto ótimo de parada com erro mínimo e capacidade de generalização máxima.

5. Teste

O quinto passo é o teste da rede. Durante esta fase o conjunto de teste é utilizado para determinar o desempenho da rede com dados que não foram previamente utilizados. O desempenho da rede, medida nesta fase, é uma boa indicação de seu desempenho real.

Devem ser considerados ainda outros testes como análise do comportamento da rede utilizando entradas especiais e análise dos pesos atuais da rede, pois se existirem valores muito pequenos, as conexões associadas podem ser consideradas insignificantes e assim serem eliminadas (*pruning*). De modo inverso, valores substantivamente maiores que os outros poderiam indicar que houve *sobretreinamento* da rede.

6. Implementação

Finalmente, com a rede treinada e avaliada, ela pode ser integrada em um sistema do ambiente operacional da aplicação. Para maior eficiência da solução, este sistema deverá conter facilidades de utilização como interface conveniente e facilidades de aquisição de dados através de planilhas eletrônicas, interfaces com unidades de processamento de sinais, ou arquivos padronizados. Uma boa documentação do sistema e o treinamento de usuários são necessários para o sucesso do mesmo.

Além disso, o sistema deve periodicamente monitorar seu desempenho e fazer a manutenção da rede quando for necessário ou indicar aos projetistas a

necessidade de re-treinamento. Outras melhorias podem ainda ser sugeridas na medida em que os usuários forem se tornando mais familiares com o sistema.

Pelo que foi exposto, uma das características mais importantes das redes neurais é sua capacidade de aprendizado, ou seja, a possibilidade de estabelecer, de forma precisa, relações complexas entre diversas variáveis numéricas, sem que seja imposto qualquer modelo preconcebido. Na área industrial, destacam-se as utilizadas na prevenção de desvios de processo e em sistemas híbridos, associados a técnicas de lógica difusa e sistemas especialistas, para a detecção de problemas de manutenção. Trata-se normalmente de problemas onde as abordagens tradicionais seriam difíceis, ineficazes ou impossíveis. Desta forma, no ritmo em que se faz intensa pesquisa sobre o assunto, as aplicações das redes neurais vêm se disseminando amplamente em um prazo relativamente curto.

4. METODOLOGIA DE TRABALHO

Este trabalho foi idealizado para ser desenvolvido em quatro etapas que, apesar de interligadas, poderiam ser efetuadas de modo flexível e não necessariamente de forma seqüencial, a saber: a etapa de diagnóstico, a etapa de desenvolvimento dos modelos matemáticos, a etapa de ajuste de parâmetros e, finalmente, a etapa de análise dos resultados. Primeiramente, foi realizada uma fase de “diagnóstico das condições de produção” nas instalações industriais. Na Usina Santa Adélia o objetivo foi caracterizar a etapa de evaporação do processo de produção de açúcar. Já na Usina São Martinho o foco foi a etapa de cristalização do açúcar. Através de pesquisas bibliográficas foram desenvolvidos modelos do regime transiente dos processos unitários de evaporação e cristalização. Era de se esperar que estes não fossem necessariamente iguais aos arranjos encontrados nas usinas, visto que possíveis particularidades do processo industrial certamente não estariam sendo consideradas no modelo teórico. Deste modo, foram realizadas visitas às usinas, tanto nos períodos de safra quanto nos de entressafra. Neste ponto, objetivava-se primeiramente caracterizar os processos utilizados pelas usinas. As atividades abaixo relacionadas foram englobadas nesta *primeira etapa* do projeto:

- Detalhamento dos equipamentos quanto à sua disposição, entradas e saídas de material, dimensões, capacidade e regime de trabalho;
- Observação da estratégia de controle utilizada na usina, de modo a implementá-la nos modelos, se possível;
- Verificação da instrumentação associada aos equipamentos para confirmar a viabilidade de acesso a variáveis importantes na simulação como, por exemplo, vazões, concentrações, etc;
- Verificação da presença de sensores físicos disponíveis (sensores de temperatura, concentração, pressão, etc.), visando direcionar o desenvolvimento dos algoritmos que iriam estimar as variáveis e propriedades físicas não diretamente mensuráveis;
- Coleta de dados gerados pelo sistema supervisório da planta para um desenvolvimento preliminar das rotinas do programa de simulação.

Para alcançar os objetivos desta etapa foram utilizadas, quando disponíveis, as plantas de projeto do processo, fotos dos equipamentos, descrições dos operadores, material impresso fornecido pelas usinas (cartas de produção e saídas do sistema

supervisório da planta) e também acompanhamento *in loco* da produção. Esses dados permitiram balizar a adaptação dos modelos matemáticos já existentes desenvolvidos durante o mestrado do autor (Jesus, 2000).

Na *segunda etapa* do trabalho, visava-se desenvolver as rotinas matemáticas e implementá-las conforme necessário, recaindo, em princípio, em duas categorias: (1) modelos das propriedades físicas da solução de açúcar (densidade, viscosidade, saturação, etc) e (2) resolução de equações diferenciais ordinárias que surgem na resolução do regime dinâmico.

Todos os modelos matemáticos foram codificados e testados no ambiente do aplicativo Matlab 5.3 (e *toolboxes* adequados), devido à facilidade de implementação e de verificação visual das respostas do sistema de equações diferenciais. Depois de verificados, partes dos códigos foram reprogramados em linguagem FORTRAN, de modo a se construir as DLL's (*bibliotecas de conexão dinâmica*) que iriam se comunicar com o programa principal. Os protocolos de comunicação entre as DLL's e o programa principal encontram-se descritos no trabalho de Jesus (2000).

A interface gráfica do programa principal, ou seja, as telas representando as etapas de evaporação e cristalização do açúcar, foi desenvolvida no ambiente de programação do aplicativo Microsoft Visual Basic 6[®], porém, sempre que possível, buscou-se a utilização das rotinas matemáticas implementadas na linguagem FORTRAN. Tal utilização foi possível porque as rotinas foram chamadas a partir do programa base na forma de DLL's, que agem como se fossem subrotinas do programa, mas lhe são externas. Desta forma, o *software* ganhou em velocidade, uma vez que as rotinas já se encontravam na forma compilada (não tendo que ser interpretadas pelo Visual Basic), e também na utilização de memória, dado que as DLL's são, em essência, pequenos programas executáveis desvinculados do simulador. A forma com que o processo foi organizado e representado nas telas baseou-se no arranjo industrial e, desta forma, manteve a correspondência com o processo real.

A *terceira etapa* do projeto previa o acompanhamento do regime de produção das usinas durante a época da safra para que fossem efetuados os ajustes nos parâmetros dos modelos e a implementação dos algoritmos desenvolvidos para a geração de respostas que se ajustassem aos dados do processo real armazenados no sistema supervisório. Nesta etapa, fatores como a elevação do ponto de ebulição da solução, coeficiente de troca térmica dos equipamentos e perdas de calor para o ambiente foram avaliados quanto à sua relevância na descrição do balanço de energia do

sistema. Quando necessário, o acompanhamento do processo incluiu a retirada de amostras do material que se encontrava no interior dos equipamentos. No entanto, devido às dificuldades inerentes a esta atividade foram desenvolvidos, no DEQ-UFSCar, instrumentos que possibilitaram a retirada de uma quantidade de amostra compatível com aquela requerida nas análises pretendidas.

Na *quarta* e última etapa, já com os modelos ajustados ao sistema, dados reais obtidos do sistema supervisorio das usinas permitiram análises qualitativas e quantitativas do processo em relação às etapas-alvo do presente estudo.

Os resultados obtidos foram avaliados, em primeira instância, através da comparação direta dos dados gerados pelo simulador e pelos *softwares* sensores com dados do sistema supervisorio e valores oriundos das análises laboratoriais de amostras de material ao longo do processo.

A aplicação dos modelos em diferentes condições de operação das plantas foi fundamental para a validação destes, uma vez que as alterações nas variáveis de entrada possibilitaram checar o ajuste do modelo em relação ao comportamento real da planta.

As estratégias de operação para o cumprimento dos objetivos desta tese de doutoramento foram balizadas pela metodologia de trabalho anteriormente descrita, mas para torná-las adequadas à realidade de cada uma das usinas aqui envolvidas, o modo e a seqüência com que se deu sua implementação foram flexibilizados à medida que as atividades progrediam.

5. ETAPA DE EVAPORAÇÃO

Neste capítulo serão apresentados os modelos matemáticos desenvolvidos para o evaporador de múltiplo efeito presente na etapa de evaporação da Usina Santa Adélia. Como já anteriormente comentado, a evaporação é o primeiro estágio de concentração do caldo proveniente do setor de tratamento e tem o propósito de elevar a concentração deste de modo a torná-lo adequado para ser enviado para o setor de cristalização. Uma vez que a etapa de evaporação tem uma grande importância no balanço energético da fábrica e devido ao impacto que a qualidade do xarope exerce no desempenho e no consumo de energia das etapas posteriores, o principal objetivo dos modelos foi estimar a concentração do xarope gerado ao final do processo de evaporação.

5.1. Descrição das Condições na Planta Industrial da Usina Santa Adélia

Em um primeiro momento, as atividades de pesquisa concentraram-se na *fase de diagnóstico* das condições de produção da Usina Santa Adélia, a fim de se obter uma descrição detalhada e operacional do processo. Este procedimento visou conciliar as restrições impostas pela realidade industrial (principalmente no que tange à carência de dados) com o ferramental matemático adequado para a modelagem dinâmica do processo.

A execução da fase de diagnóstico das condições de produção foi realizada através de visitas durante o período de safra. Em tais visitas, fez-se o levantamento das características da etapa de evaporação e constatou-se que o processo utilizado pela Usina Santa Adélia, comparado a outras unidades produtoras de açúcar, é bem instrumentado. Toda a evaporação é acompanhada e/ou controlada por um sistema de controladores lógicos programáveis (CLPs) e supervisionada por computadores. Por este motivo, o acompanhamento destas etapas foi feito, em grande parte, através dos monitores da sala de controle.

Três monitores permitem que os operadores observem todo o processo de produção de açúcar, desde a moagem até a secagem. A disposição dos equipamentos da planta nas telas dos monitores apresentava uma razoável correspondência com o sistema real.

De acordo com a Figura 5.1, observa-se que a etapa de evaporação da Usina Santa Adélia possui três pré-evaporadores e dois conjuntos (A e B) de três evaporadores (caixas de evaporação ou efeitos). Durante a operação, o evaporador de múltiplo efeito (EME) é formado por dois pré-evaporadores e por um conjunto de três efeitos em série, pois sempre há um pré-evaporador e um conjunto de evaporadores sendo submetidos a limpeza.

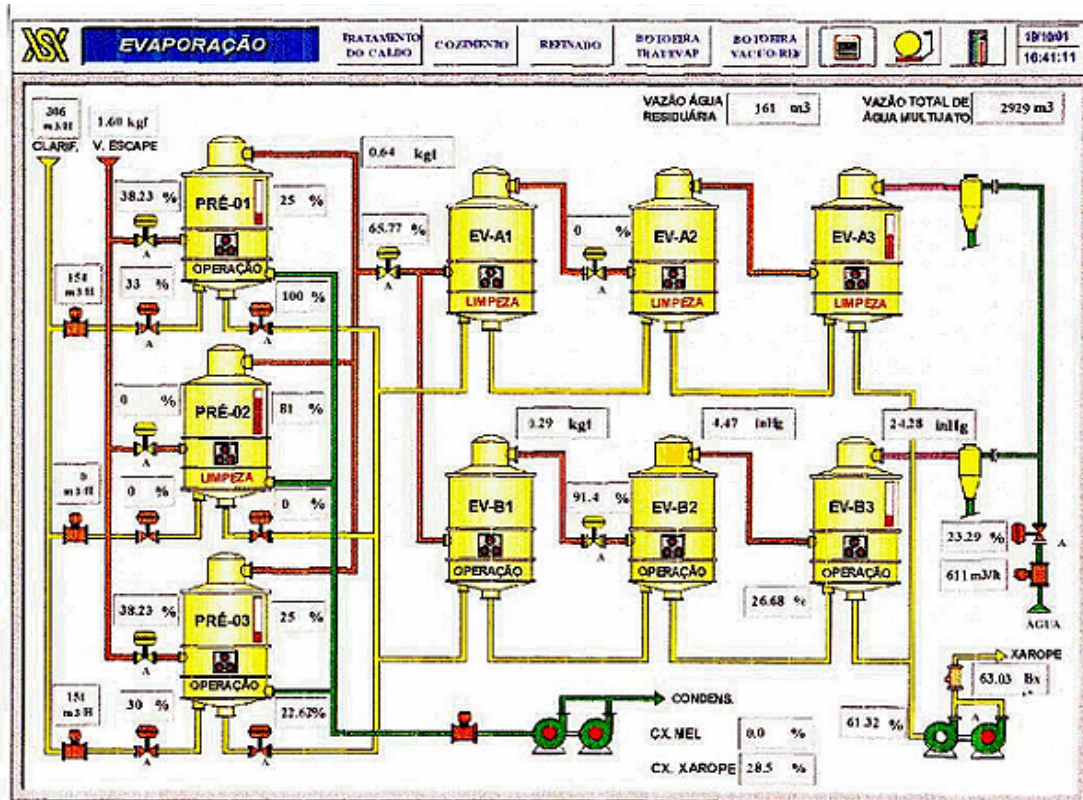


Figura 5.1: Representação da etapa de evaporação - tela da sala de controle.

Embora não esteja sendo mostrado nesta representação, há um tanque pulmão imediatamente antes dos pré-evaporadores com capacidade para aproximadamente 80m^3 de caldo tratado (suficiente para pouco mais de 15 minutos de operação), o que faz com que pequenas perturbações na concentração ou alguma parada momentânea da etapa de tratamento sejam minimizadas ou mesmo eliminadas.

Poucos são os pontos na planta que permitem manipulação diretamente a partir dos computadores, pois a maioria dos dados apresentados aos operadores é proveniente de indicadores dos valores das grandezas medidas. O setor de evaporação é acompanhado da sala de controle através das seguintes leituras:

- ▶ Pressão de cada caixa de evaporação;
- ▶ Nível dos pré-evaporadores;
- ▶ Nível da última caixa de evaporação (aqui referenciada como terceiro efeito);
- ▶ Porcentagem de abertura das válvulas de vapor de cada efeito;
- ▶ Porcentagem de abertura da válvula de água para o multijato, que gera o vácuo;
- ▶ Vazão de caldo clarificado que alimenta os pré-evaporadores; e
- ▶ Concentração, em °Brix, do xarope do último efeito (terceiro efeito).

O sensor de concentração (modelo DT-301, da SMAR) é utilizado pelos dois conjuntos de evaporadores e está instalado na saída de xarope do último efeito, em uma parte da linha de saída que lhes é comum. Já os sensores de nível presentes nos equipamentos são do tipo capacitivo (célula capacitiva).

Vale ressaltar que foram constatadas divergências, menores que 15%, entre os valores mostrados pelos indicadores de pressão e temperatura presentes nos equipamentos e os valores armazenados nos computadores. Tal diferença foi justificada como sendo devida ao fato de as calibrações de todos os indicadores serem feitas no início das safras e, uma vez iniciada a operação da planta, dificilmente estes são recalibrados, de modo que no fim do período suas leituras se tornam pouco exatas. Foi informado, porém, que os valores presentes nos computadores eram os mais confiáveis, pois vinham de sensores mais novos e modernos.

O sistema supervisório, formado por vários CLPs, grava as leituras das variáveis e pode exibi-las, se requisitado pelos operadores, na forma de gráficos que mostram o comportamento de certa variável ao longo de qualquer intervalo de produção escolhido. Este banco de dados possibilita o acesso às informações de toda a safra e é armazenado por mais de um ano.

O controle automático é implementado ao processo com controladores PI (Proporcional - Integral). No entanto, se necessário, os operadores podem além de ajustar os *setpoints* das variáveis, desativar o controle automático, passando a controlar o processo manualmente a partir do *software* de supervisão. Nos pontos do processo onde não há controle automático, mas há possibilidade de manipulação de válvulas ou bombas pelos operadores da sala de operação, o controle é feito através de solicitações dos encarregados das áreas via rádio.

A Figura 5.2 representa a estratégia de controle utilizada na etapa de evaporação. Vale enfatizar novamente que apesar de haver, na prática, quatro efeitos de

evaporação, a nomenclatura utilizada ao longo do texto irá, para manter congruência com a denominação utilizada na usina, citar explicitamente os pré-evaporadores e se referir às três caixas de evaporação como efeitos. Desta forma, por exemplo, a última caixa de evaporação será o terceiro efeito.

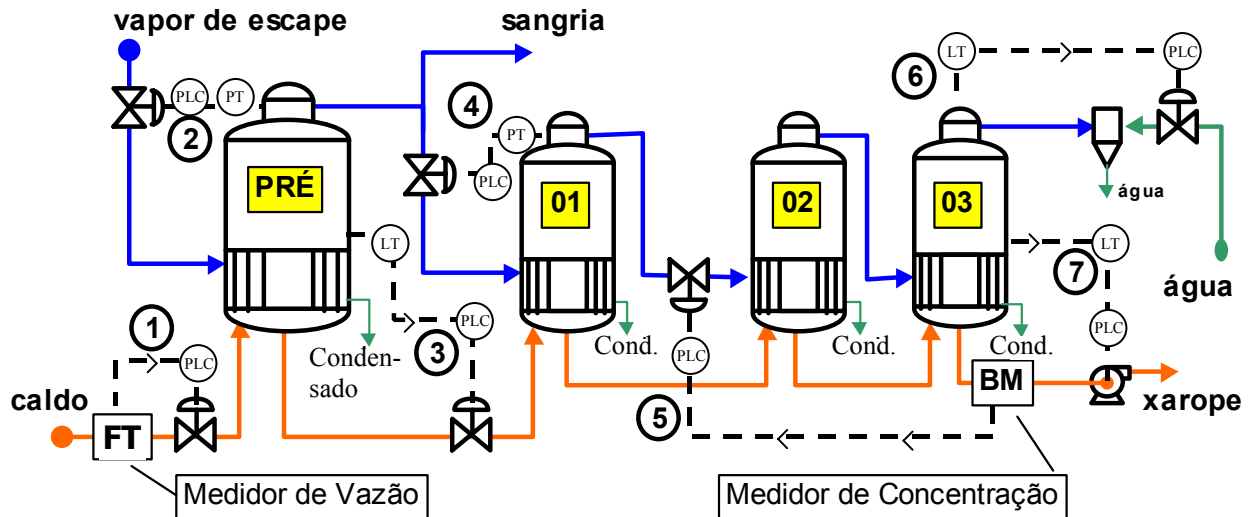


Figura 5.2: Representação esquemática da estratégia de controle do evaporador de múltiplo efeito.

Na Figura 5.2 os números representam as seguintes ações de controle:

- 1- Controle da vazão de caldo clarificado através da manipulação da abertura da válvula da corrente de entrada;
- 2- Controle da pressão dos pré-evaporadores através da manipulação da entrada de vapor de escape;
- 3- Controle do nível dos pré-evaporadores via manipulação da vazão de saída pela atuação das válvulas de controle, tipo borboleta;
- 4- Controle da pressão do primeiro efeito através da manipulação da vazão de vapor proveniente do pré-evaporador;
- 5- Manipulação da vazão de vapor que entra no segundo efeito para controle da concentração de saída do terceiro efeito;
- 6- Controle da pressão do terceiro efeito através da quantidade de água enviada para o condensador barométrico;
- 7- Controle de nível do terceiro efeito de acordo com a manipulação da vazão de saída através de modificação na rotação da bomba.

A medida de concentração comumente utilizada nas usinas de açúcar é o Brix, que se refere à porcentagem mássica de material dissolvido no caldo ou xarope.

Durante o período em que foi desenvolvido este trabalho, houve momentos em que o sensor de concentração da última caixa de evaporação não se encontrava operante e, desta forma, o controle direto da concentração não foi possível. Nestas situações, a válvula de vapor, localizada entre o primeiro e segundo efeitos, era manipulada para controlar a pressão deste último. Esperava-se que com as pressões estáveis e com uma pequena variação na concentração de entrada, a concentração de saída se mantivesse dentro de uma faixa aceitável. Porém, a operação nestas condições torna o controle dependente do “sentimento” do operador sobre o processo, o que pode gerar ações diferentes a cada intervenção corretiva.

Um argumento semelhante é utilizado para justificar a falta de necessidade de controle no nível do primeiro e segundo efeitos: espera-se que, pelo princípio dos vasos comunicantes, o nível destes equipamentos não varie muito se o nível dos pré-evaporadores e da última caixa forem bem controlados.

Com o funcionamento adequado do sensor de Brix e com condições de operação propícias, a estratégia de controle é modificada: a válvula de vapor que se encontra entre o primeiro e o segundo efeitos controla a pressão deste último. Todavia, mediante a adoção de uma estrutura de controle em cascata, o *setpoint* de pressão do segundo efeito é ajustado automaticamente em função da concentração de saída do último efeito que, neste caso, é controlada indiretamente.

A modelagem dinâmica do processo é, muitas vezes, dificultada por algumas características encontradas na planta industrial. Por exemplo, a menos da corrente de entrada dos pré-evaporadores, as vazões de caldo que circulam entre os efeitos não são medidas. Outra variável carente de informação é a temperatura do xarope em cada efeito, que está disponível apenas nos sensores instalados nos próprios equipamentos, mas não tem seu sinal enviado para o sistema supervisório. Por fim, é difícil estimar a quantidade de xarope que se encontra nos corpos de evaporação, uma vez que apenas o pré-evaporador e o terceiro efeito possuem indicadores de nível.

A Figura 5.3 mostra uma representação esquemática de um evaporador e a Tabela 5.1 lista suas características físicas.

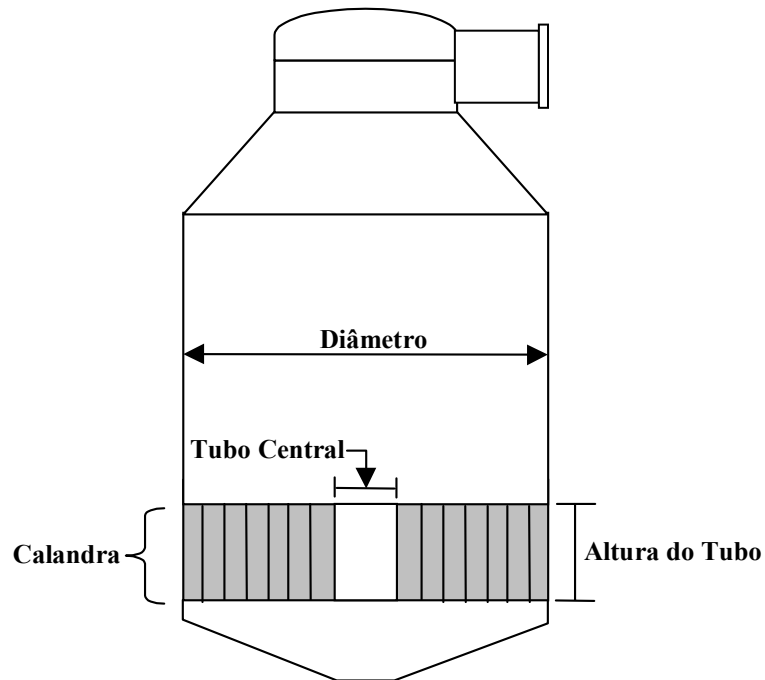


Figura 5.3: Representação esquemática de um evaporador.

Tabela 5.1: Medidas das principais características do EME da Usina Santa Adélia.

PRÉ-EVAPORADOR		PRIMEIRO EFEITO	
Característica	Valor	Característica	Valor
Diâmetro	5,054 m	Diâmetro	5,054 m
Volume Total (a 1/3 do comprimento do tubo da calandra)	16,41 m ³	Volume Total (a 1/3 do comprimento do tubo da calandra)	16,20 m ³
Número de Tubos na Calandra	7554	Número de Tubos na Calandra	7575
Diâmetro Interno dos Tubos	33,1 mm	Diâmetro Interno dos Tubos	33,1 mm
Comprimento dos Tubos	2810 mm	Comprimento dos Tubos	2540 mm
Diâmetro do Tubo Central	920 mm	Diâmetro do Tubo Central	940 mm
Área de Aquecimento Total	2200 m ²	Área de Aquecimento Total	2000 m ²

SEGUNDO EFEITO		TERCEIRO EFEITO	
Característica	Valor	Característica	Valor
Diâmetro	3,886 m	Diâmetro	4,343 m
Volume Total (a 1/3 do comprimento do tubo da calandra)	7,88 m ³	Volume Total (a 1/3 do comprimento do tubo da calandra)	9,16 m ³
Número de Tubos na Calandra	4008	Número de Tubos na Calandra	5315
Diâmetro Interno dos Tubos	33,1 mm	Diâmetro Interno dos Tubos	33,1 mm
Comprimento dos Tubos	2510 mm	Comprimento dos Tubos	2510 mm
Diâmetro do Tubo Central	630 mm	Diâmetro do Tubo Central	640 mm
Área de Aquecimento Total	1000 m ²	Área de Aquecimento Total	1450 m ²

A Tabela 5.2 apresenta os valores médios de alguns parâmetros da operação da evaporação.

Tabela 5.2: Valores de importantes parâmetros usuais de operação.

Parâmetro de Operação	Valor
Vazão de Alimentação	300 m ³ /h
Brix do Caldo de Alimentação	18°Brix
Pressão do Vapor de Escape	2,7 bar abs
Pressão do Pré-Evaporador	1,7 bar abs
Pressão do Primeiro Efeito	1,2 bar abs
Pressão do Segundo Efeito	0,6 bar abs
Pressão do Terceiro Efeito	0,2 bar abs
Brix do Xarope Final	66°Brix
Pureza do Xarope Final	90%

5.2. Obtenção dos Dados de Processo

Na Usina Santa Adélia, os dados do processo são gravados durante toda a safra e, se necessário, podem ser recuperados. O *software* de supervisão utilizado é o Ifix, da *Intellution*, na versão 2.5. Com ele é possível acessar a base de dados e decodificá-la.

Para que o pesquisador pudesse tratar os dados fora do ambiente da usina era necessário que os arquivos fossem transformados do formato codificado para um formato de texto de livre acesso. Uma vez que o formato original dos arquivos só podia ser lido com um componente do Ifix, os primeiros arquivos foram decodificados nos computadores da usina. No entanto, o tempo requerido para esta operação era demasiadamente longo, pois as variáveis de interesse se encontravam dispersas em três arquivos diferentes e o acesso a estes se dava pela rede interna de comunicação e não diretamente nos computadores que os armazenava.

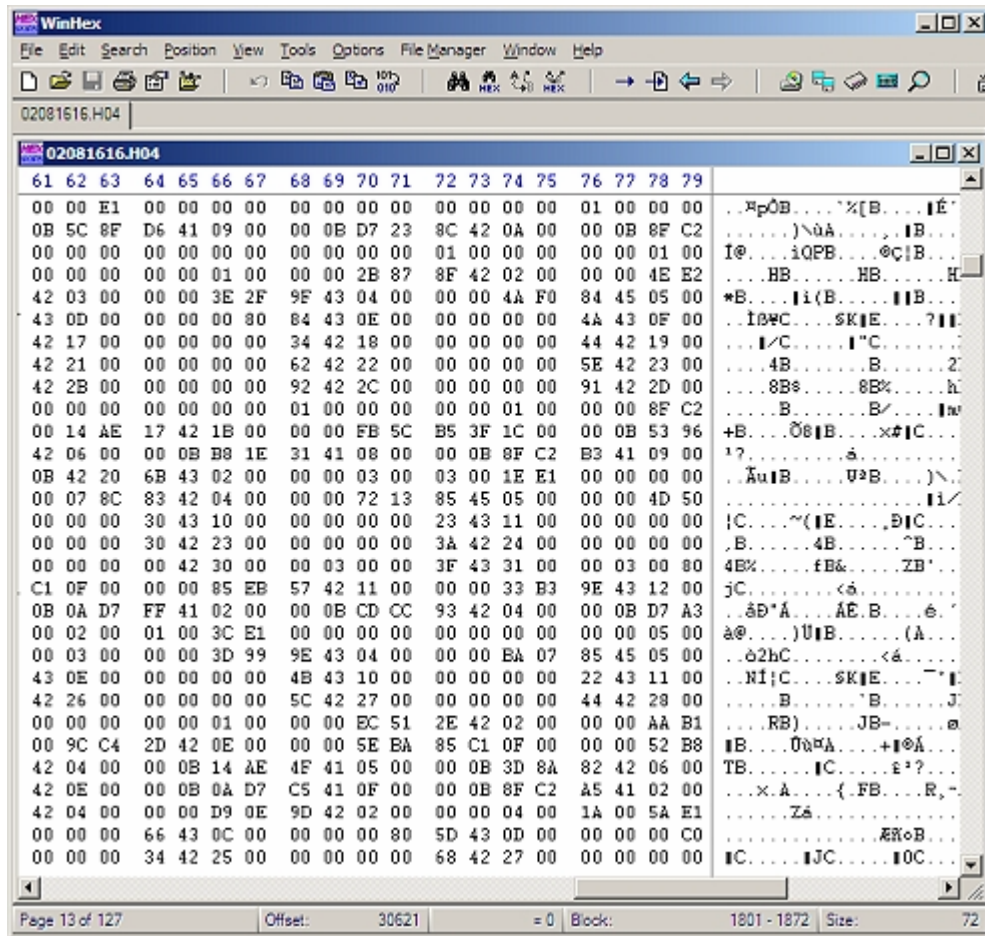


Figura 5.4: Arquivos de histórico representados na codificação hexadecimal.

A solução para tal situação foi gerar um programa que decodificasse os arquivos de histórico que eram armazenados na base de dados da usina ao final de cada dia. Alguns destes arquivos foram cedidos pela usina e foram analisados quanto à sua organização interna de dados. A metodologia empregada consistia em carregar os arquivos em um editor hexadecimal (WinHex 10.45 SR6 e BinView, modificado pelo pesquisador), observar e procurar por padrões nas codificações hexadecimal, decimal, inteira, longa, real e alfanumérica. As Figuras 5.4 e 5.5, ilustradas a seguir, mostram como um arquivo era visto na forma hexadecimal (WinHex) e na sua codificação em números reais (BinView modificado).

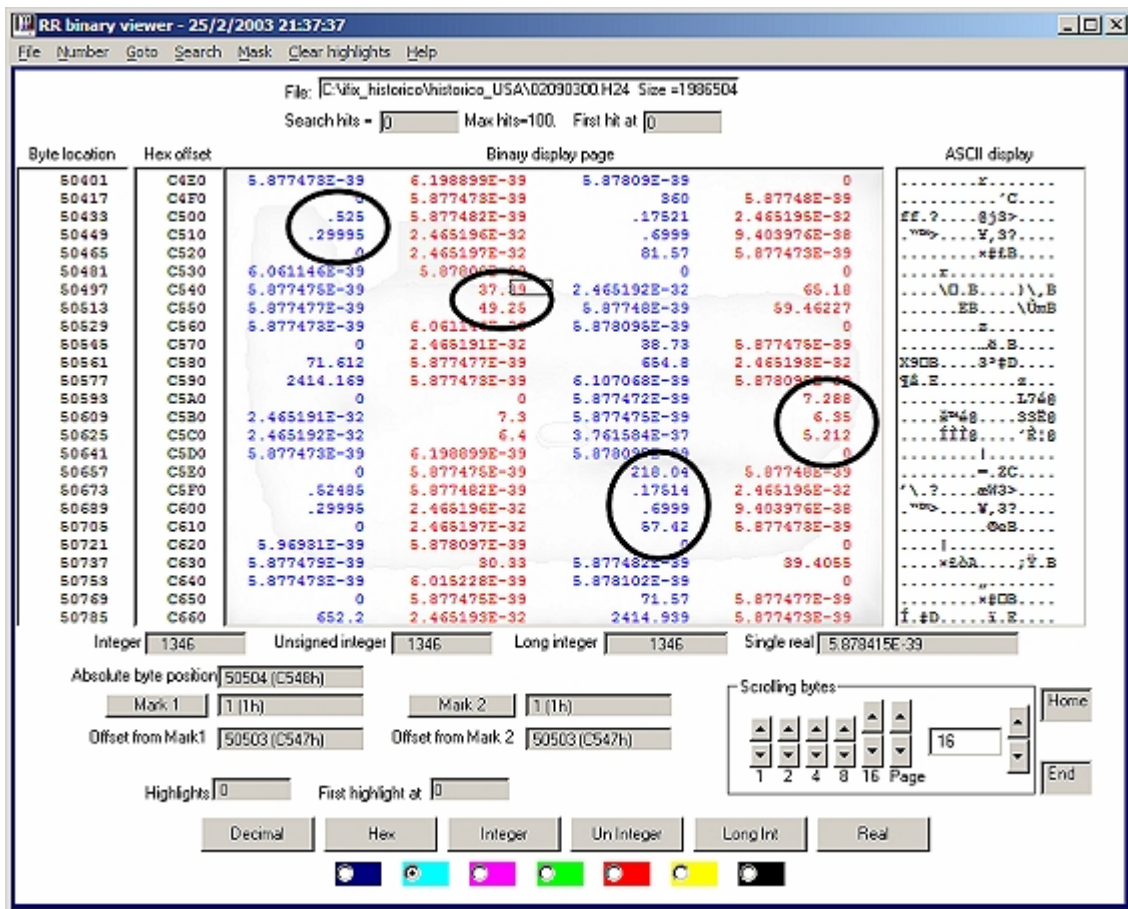


Figura 5.5.: Representação em números reais do código hexadecimal dos arquivos de histórico - Os círculos mostram locais onde podem ser vistos valores de variáveis do processo.

A análise da estrutura dos arquivos se mostrou um processo laborioso, uma vez que não havia qualquer documentação a respeito. Porém, ao final deste processo, pôde-se observar que os dados são gravados seguindo uma organização que é controlada por indicadores (*flags*) - que ditam a ordem com que os grupos de variáveis serão gravados, quais destes estão ativos, a faixa de variação acima da qual o valor das variáveis será gravado e o atraso que será associado a certos grupos de variáveis no momento da gravação. O motivo para tal procedimento é evitar que todas as variáveis sejam gravadas ao mesmo tempo, o que poderia sobrecarregar o sistema. Em alguns casos, o valor de certas variáveis não é atualizado até que este sofra alteração além de um mínimo valor percentual estipulado. Isto impede, por exemplo, que valores de *setpoint* sejam gravados a cada poucos segundos sem que haja mudanças nestes.

Como resultado da extensiva análise dos arquivos de histórico, chegou-se a um programa, desenvolvido em Visual Basic 6.0, que decodifica os dados dos arquivos de histórico e grava os valores diretamente em uma planilha eletrônica. A função de

certos *flags* não foi completamente elucidada, mas o programa gerado é plenamente funcional e tornou possível carregar os dados na usina e tratá-los adequadamente na universidade.

A Figura 5.6 mostra o processo de decodificação dos dados obtidos na usina.

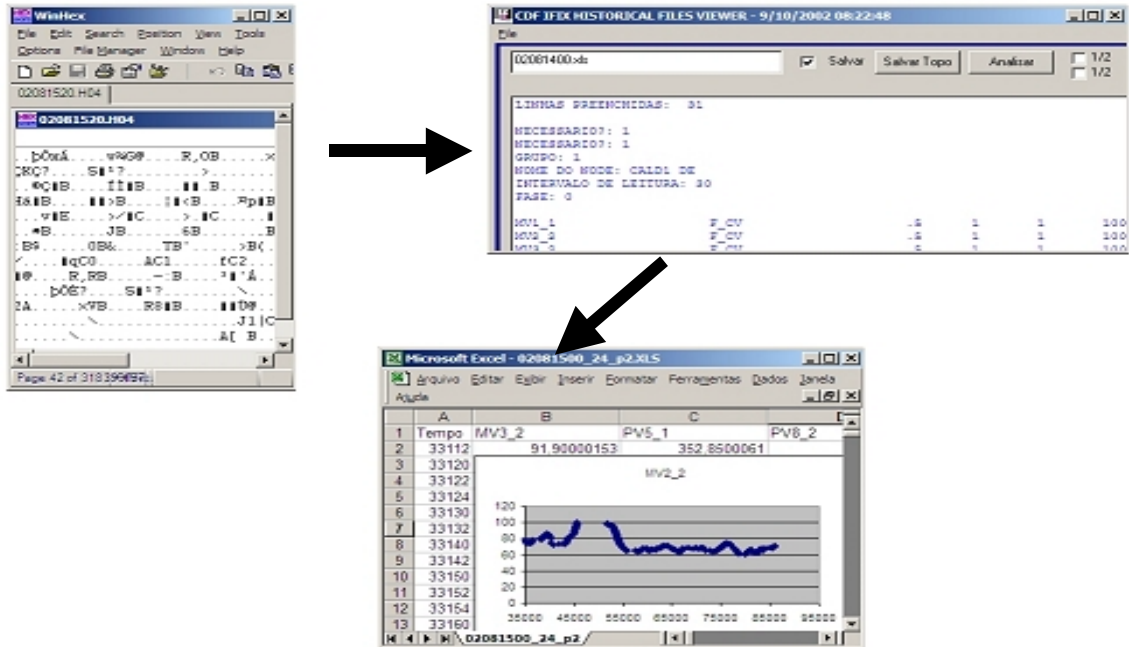


Figura 5.6: O arquivo codificado é processado pelo programa desenvolvido pelo pesquisador e os dados são gravados diretamente na forma de uma planilha.

5.3. Atividades Relacionadas com a Seleção e Análise dos Dados

As bases de dados armazenadas pelo sistema supervisorio consistiam de um grande número de variáveis gravadas em conjunto ao final de um período pré-estabelecido. No caso da usina, existiam três bases de dados que cobriam, entre outras, as variáveis relacionadas com a evaporação e a cristalização. O período de gravação da base de dados principal (onde se encontrava a maioria das variáveis de interesse) era de 24 horas.

Depois de decodificadas pelo programa desenvolvido, as variáveis eram gravadas na forma de uma planilha de texto, o que tornava todos os valores acessíveis, apesar do arquivo gerado poder atingir um tamanho de até 5 *megabytes*. Tal dimensão era atingida em decorrência do número de variáveis (uma das bases possuía 303 entradas), do intervalo de aquisição dos valores de processo (normalmente 10 ou 30 segundos) e do modo como as variáveis eram gravadas (algumas eram gravadas mesmo que seu valor fosse o mesmo da leitura anterior). O fato dos arquivos decodificados

serem intrinsecamente esparsos também contribuía para tornar o arquivo maior e representava um problema, uma vez que os valores deveriam alimentar as rotinas matemáticas do Matlab e do Fortran. Por este motivo foram construídas várias rotinas que se encarregavam de adequar os dados através do preenchimento dos valores faltosos, tornando os arquivos densos (com valores de todas as variáveis para cada tempo) e da eliminação de linhas vazias e atrasos entre as variáveis.

Após a adequação dos arquivos foram selecionadas as variáveis de interesse entre as mais de quinhentas gravadas. Nos arquivos, a referência que se tinha era os rótulos (*tags*) das variáveis, o que apenas permitia, em princípio, diferenciar entre uma variável de processo, uma variável manipulada ou um *setpoint*. Um levantamento preliminar mostrou que aproximadamente cinquenta variáveis apresentam alguma relação com a evaporação - Tabela 5.3.

Tabela 5.3: Lista de variáveis relacionadas com a evaporação.

Vazão de caldo entrada pré 01	Brix do xarope
Vazão de caldo entrada pré 02	Nível do pré-evaporador 03
Vazão de caldo entrada pré 03	Nível do evaporador A3
Vazão de xarope	Pressão do vapor vegetal
Nível tanque caldo clarificado	Pressão da caixa 03
Nível caixa de xarope	Vazão de caldo misto
Out Válv. Vapor Caixa A2	Nível do pré-evaporador 01
Out Válv. Vapor Caixa B2	Vazão condensado dos pres
Out Válv. Vapor Pre 01	Pressão caixa 02
Out Válv. Vapor Pre 02	Nível evaporador B3
Out Válv. Vapor Pre 03	Pressão do vapor de escape
MV ¹ pressão caixa 01	Vazão de água multijato evap.
MV ¹ Temperatura Caldo Fábrica	SP ² pressão caixa 01
MV ¹ Nível Pre Evaporador 02	SP ² Temperatura Caldo Fábrica
MV ¹ Nível Pre Evaporador 03	SP ² Nível Pre Evaporador 02
MV ¹ Nível Caixa 03	SP ² Brix do Xarope
MV ¹ Pressão Vapor Vegetal	SP ² Nível Pre Evaporador 03
MV ¹ Leitura Vazão Caldo Fábrica	SP ² Nível Caixa 03
MV ¹ Nível Pre Evaporador 01	SP ² Pressão Vapor Vegetal
MV ¹ Pressão Caixa 02	SP ² Pressão Caixa 03
MV ¹ Vz Agua Multijato Evap.	Set Point Vazão Caldo Fábrica
Nível da caixa 03	SP ² Nível Pre Evaporador 01
Pressão caixa 01	SP ² Pressão Caixa 02
Temperatura Caldo Fábrica	SP ² Vazão Agua Multijato Evap.
Nível do pré-evaporador 02	Vazão de caldo para Pres

¹Variáveis manipuladas.

²Setpoint.

A busca pelos valores das variáveis nas bases de dados mostrou que algumas entradas não estavam sendo medidas e que as variáveis se encontravam distribuídas entre as três bases de dados. No final deste processo, concluiu-se que apenas trinta e cinco das cinquenta variáveis eram de interesse.

O processo (decodificação das três bases de dados e o tratamento adequado dos valores) de construção de uma planilha contendo os valores das 35 variáveis era bastante lento, levando em média 1,5 horas, mas, ainda assim, era mais rápido e cômodo do que obter os dados na usina.

Devido à dificuldade de visualização de tamanha quantidade de informação (uma variável gerava aproximadamente 9000 valores em um dia) foram desenvolvidas, no Excel e no Matlab, rotinas de visualização que permitiriam que vários tipos de gráficos das variáveis fossem gerados de forma automatizada. Inicialmente, os gráficos foram comparados com telas do sistema supervisor da usina, de modo a validar não só o programa de decodificação de arquivos de histórico, mas também a metodologia de visualização.

Em uma primeira análise, observou-se a presença de algumas variáveis muito ruidosas, em especial as MVs – Variáveis Manipuladas, e, por esse motivo, várias rotinas para a filtragem dos valores foram testadas. Optou-se, por fim, pela utilização do algoritmo sugerido por Eilers (2003), pois a velocidade com que este filtrava as bases de dados era satisfatória e sua implementação bastante simples no ambiente do Matlab. Para futura utilização *on-line*, sugere-se emprego de uma rotina de média móvel para filtrar os dados, principalmente pelo pouco esforço computacional requerido.

5.4. Materiais e Métodos

Para auxiliar na estimativa de parâmetros e para fornecer dados da operação da etapa de evaporação foram coletadas amostras do material do EME.

5.4.1. Pontos de Amostragem

Uma vez que a saída do EME é o único ponto onde se realiza a medida da concentração do xarope, decidiu-se retirar amostras do material contido em cada um dos

efeitos, de modo a se poder efetuar estimativas de parâmetros - como o coeficiente de troca térmica, e das propriedades do material - como a sua densidade.

Os pontos de coleta localizavam-se na saída do tanque pulmão de caldo tratado, nas saídas dos pré-evaporadores e nas saídas dos três efeitos. A menos do tanque pulmão, as amostras foram retiradas na parte mais baixa da tubulação de saída dos equipamentos, que ficava a aproximadamente 9 metros abaixo dos mesmos, formando uma coluna de líquido que possibilitava a retirada de amostra dos últimos efeitos, que se encontravam sob vácuo.

O tempo total de amostragem foi de 5 horas, tendo sido constatada a necessidade de um intervalo de 20 minutos entre a coleta das amostras, para que estas pudessem ser devidamente recolhidas, apropriadamente armazenadas e tivessem seus tempos de amostragem anotados. Cada um dos seis pontos de coleta gerou, ao longo das 5 horas, 16 amostras, perfazendo um total de 96 amostras. A necessidade de armazenamento e o fato de que a medida da concentração de cada amostra seria realizada em triplicata fizeram com que o material coletado fosse analisado nos laboratórios da universidade, utilizando-se um refratômetro digital manual com faixa de aplicação de 0 a 45°Brix (modelo Q_107D142, da Quimis). Para que não houvesse dúvidas em relação às medidas, as doze primeiras amostras (referentes ao tempo inicial e à primeira coleta realizada aos 20 minutos) foram analisadas no laboratório de controle de qualidade da usina e estes valores foram posteriormente comparados com aqueles obtidos na universidade.

As amostras eram coletadas dos equipamentos com temperaturas variando de 110 a 65°C a depender do ponto de coleta. Aproximadamente um litro de xarope era descartado em local apropriado antes que aproximadamente 50ml de xarope fossem coletados. No DEQ-UFSCar, todas as amostras, acondicionadas em uma bandeja de isopor, eram armazenadas em uma câmara fria mantida a 6°C. Antes das análises, esperava-se que as mesmas atingissem temperatura ambiente.

Devido ao fato do limite superior da faixa de aplicação do refratômetro (45°Brix) ser inferior ao valor de concentração do xarope normalmente encontrados nos dois últimos efeitos (aproximadamente 45 e 65°Brix, respectivamente) foi necessário diluir as amostras coletadas nestes equipamentos. Para que fosse mantido um padrão com o procedimento seguido pela usina, utilizou-se um fator de diluição 1:5. As medidas foram realizadas em triplicata, aceitando-se uma variação de 0,2°Brix. Para a análise, utilizava-se apenas algumas gotas do xarope. Os resultados obtidos mostraram

que a metodologia empregada era válida, pois os valores gerados eram comparáveis com os valores lidos no refratômetro de bancada da usina (ATAGO, modelo Rx 5000a).

As Figuras 5.7, 5.8, 5.9 e 5.10 representam a variação da concentração do xarope nos pontos de coleta ao longo do tempo de amostragem em quatro ocasiões onde a operação foi acompanhada por meio de amostragem. No caso dos pré- evaporadores, o valor mostrado é o valor médio das medidas dos dois equipamentos. Os pontos se referem à média dos valores das triplicatas. Outros dois conjuntos de amostras foram coletados, mas seus resultados não serão apresentados em consequência da contaminação bacteriana de parte das amostras.

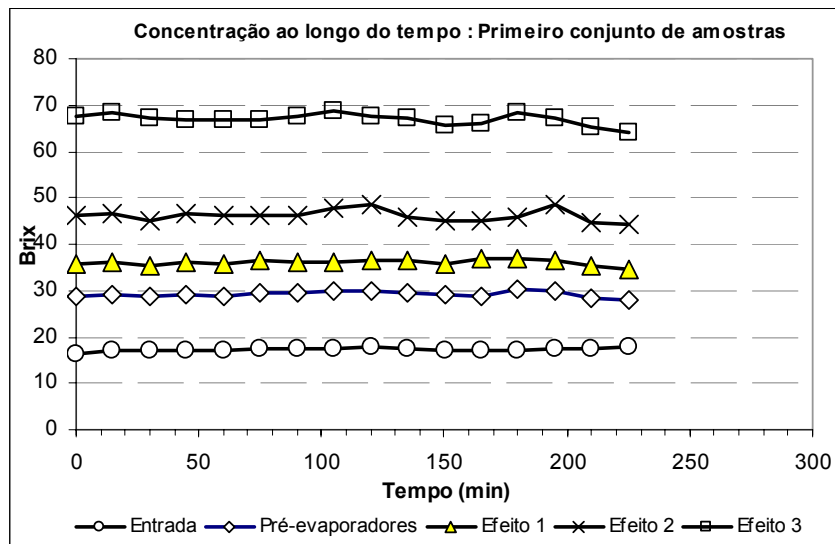


Figura 5.7: Variação da concentração do xarope nos pontos de coleta ao longo do tempo de amostragem para o primeiro conjunto de amostras.

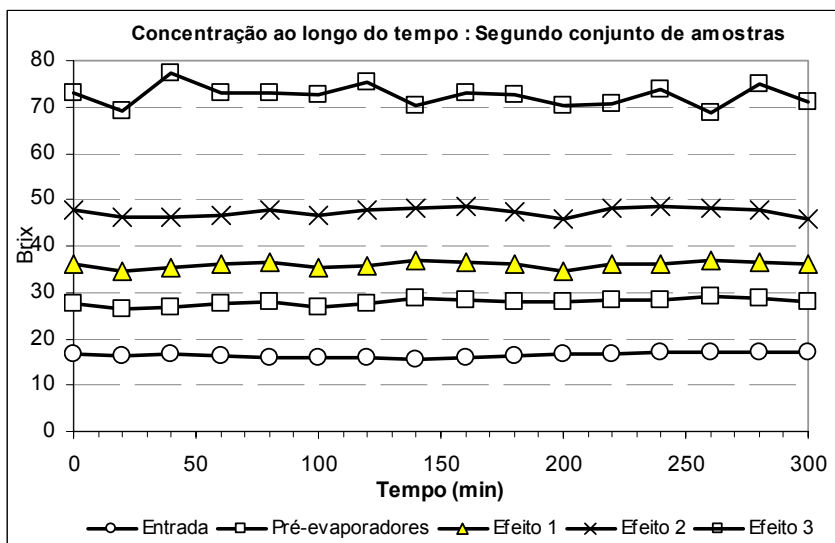


Figura 5.8: Variação da concentração do xarope nos pontos de coleta ao longo do tempo de amostragem para o segundo conjunto de amostras.

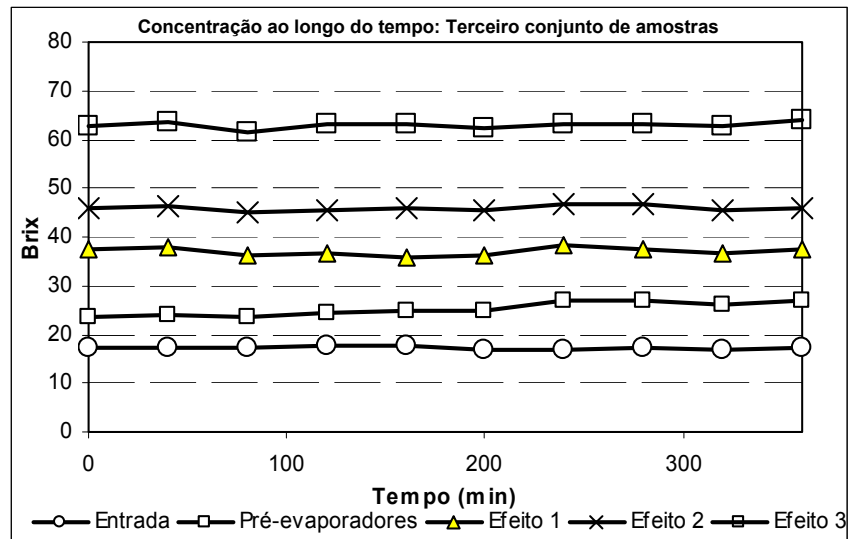


Figura 5.9: Variação da concentração do xarope nos pontos de coleta ao longo do tempo de amostragem para o terceiro conjunto de amostras.

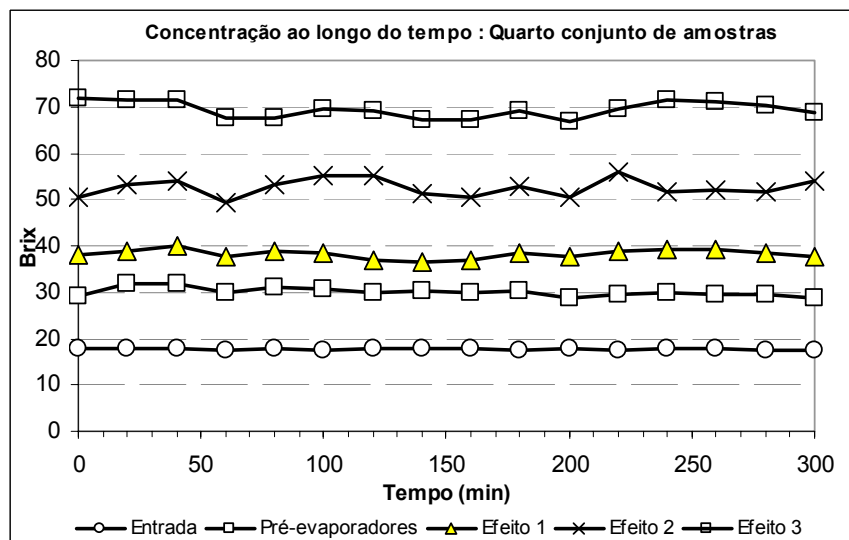


Figura 5.10: Variação da concentração do xarope nos pontos de coleta ao longo do tempo de amostragem para o quarto conjunto de amostras.

Analisando-se estas figuras, pode-se notar que não houve mudanças significativas nos valores, justificando sua utilização como valores médios de concentração no cálculo de propriedades médias do material de cada equipamento. A Tabela 5.4 resume as informações dos gráficos mostrando os valores médios das medidas.

Tabela 5.4: Valores médios das medidas de concentração nos equipamentos em °Brix.

	Entrada (°Brix)	Pré-Evaporadores (°Brix)	1º Efeito (°Brix)	2º Efeito (°Brix)	3º Efeito (°Brix)
1º Conjunto	17,3	29,2	36,1	46,2	67,0
2º Conjunto	16,4	27,9	36,0	47,4	72,4
3º Conjunto	17,7	30,1	38,2	52,6	69,3
4º Conjunto	17,2	28,4	38,0	47,6	63,4
<i>Média</i>	<i>17,15</i>	<i>28,90</i>	<i>37,07</i>	<i>48,45</i>	<i>68,03</i>

Vale a pena observar que durante o período abrangido pelas bases de dados utilizadas, a média do valor da concentração do caldo de alimentação medida pelo laboratório da usina foi de $18,9 \pm 0,7^\circ\text{Brix}$, e este foi o valor utilizado nos cálculos que serão mostrados adiante.

5.5. Modelagem do Processo

Nesta seção, detalhar-se-á a abordagem adotada para o desenvolvimento do modelo matemático do EME. Como já anteriormente comentado, a variável que se deseja inferir é a concentração do último efeito. Há vários motivos para a escolha desta variável: (1) ela é determinante no processo industrial, já que seu valor deve ser bem controlado para que não comprometa o desempenho das etapas seguintes; (2) de modo geral, sua medição na planta nem sempre é confiável, o que impede que seu sinal seja utilizado nas malhas de controle; (3) seu valor é necessário para guiar várias decisões tomadas pelos operadores, que na falta do sinal do sensor se baseiam apenas nas medidas do laboratório da usina, que são disponibilizadas em intervalos de horas; (4) é uma variável crucial para o acompanhamento do desempenho do EME e para a modelagem matemática, uma vez que é a principal medida relacionada com o balanço de soluto.

5.5.1. Modelo Matemático do Evaporador

Os modelos matemáticos do EME foram desenvolvidos de modo a permitir a utilização dos valores das variáveis presentes na base de dados do sistema supervisório. Deste modo, foi inicialmente desenvolvido o modelo do estado estacionário do equipamento e, em um segundo momento, o modelo dinâmico. A seguir, estão detalhados os passos necessários para a execução desta etapa do trabalho.

5.5.1.1. Modelo do Estado Estacionário do EME

A razão para o desenvolvimento de um modelo estacionário para o EME consiste na necessidade de se obter valores médios de operação e estimativas de parâmetros que possam ser utilizados no modelo transiente. Porém, estes devem ser analisados com ressalvas, já que o equipamento na verdade não se mantém neste estado.

Para efeito de modelagem matemática, os dois pré-evaporadores foram considerados como apenas um equipamento com o dobro da área de troca térmica. Antes da análise dos balanços de massa e energia propriamente ditos, vale observar o EME e comentar sobre a disponibilidade das variáveis e as considerações assumidas. A Figura 5.11 irá auxiliar na compreensão dos comentários que se seguem.

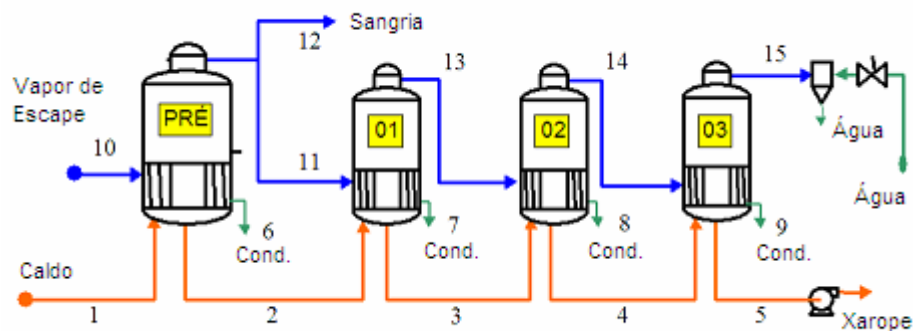


Figura 5.11: Representação esquemática das correntes do EME.

O EME representado na Figura 5.11 possui 15 correntes de material. Em princípio, pode-se considerar que todas possuem três grandezas de interesse, a saber: temperatura, T ; concentração, Bx , e vazão mássica, F . Desta forma, faz-se necessário determinar 45 variáveis.

A primeira consideração a ser feita é que as correntes de vapor, em azul, e as correntes de condensado, em verde, não apresentam sacarose, ou seja, têm concentração igual a zero, o que leva o número de variáveis para 35.

Outra consideração razoável é assumir que a temperatura e a vazão das correntes de condensado sejam iguais às das correntes de vapor que entram nas calandras dos respectivos efeitos, isto é, $T_{\text{cond}} = T_{\text{vapor}}$ e $F_{\text{cond}} = F_{\text{vapor}}$ para as correntes 6, 7, 8 e 9. Assim, o número de variáveis reduz para 27.

Considerando-se que o vapor das correntes 10, 11, 12, 13, 14 e 15 se encontra saturado, é possível calcular as temperaturas destas correntes, dado que o sinal de pressão dos efeitos está disponível para todas as caixas de evaporação. Deste modo, o número de variáveis cai para 21.

Estendendo-se a consideração acima e assumindo-se que a temperatura do caldo contido nas caixa de evaporação guardam relação com a temperatura do vapor, o número de variáveis reduz para 17.

Há duas variáveis presentes na base de dados: a vazão de entrada dos pré-evaporadores e a concentração da última caixa. Além disso, a temperatura de entrada do caldo clarificado e a sua concentração podem ser estimadas pelos valores do laboratório. Estas últimas considerações reduzem o número de variáveis a serem determinadas para 13.

Como existem quatro equipamentos, há 12 equações provenientes dos balanços de energia, de massa total e de soluto de cada um deles. Ainda assim, observa-se que uma consideração ou medida a mais é necessária.

A abordagem aqui adotada considera que o calor trocado no pré-evaporador pode ser calculado através da seguinte equação:

$$Q = F_{V_10} * \Delta H_{VST} = U_{PRE} * A_{PRE} * (T_{V_10} - T_{PRE}) \quad (01)$$

Deste modo, a vazão da corrente 10 relaciona-se com valores conhecidos, ficando por determinar apenas o coeficiente de troca térmica do pré-evaporador, já que a área de troca é conhecida.

A partir dos valores médios experimentais de concentração obtidos das amostras coletadas, da vazão de entrada e dos valores médios de pressão do pré-evaporador é possível fazer uma primeira estimativa de U_{PRE} .

Pressão do vapor de escape (média)	→ 2,36 bar abs (~125,5 °C)
Pressão do vapor no evaporador (média)	→ 1,72 bar abs (~115,5 °C)
Vazão do caldo que alimenta o pré-evaporador	→ 325800 kg/h
Valor médio da concentração de entrada (exp.)	→ 17,15 °Brix
Valor médio da concentração de saída (exp.)	→ 28,90 °Brix
Área de troca térmica	→ 4400 m ²
Entalpia de vaporização para pressão de 1,72 bar	→ 2214 kJ/kg
Temperatura média da corrente de alimentação	→ 100 °C

Com os valores acima relacionados, calcula-se a massa de água evaporada e a quantidade equivalente de energia, chegando-se a $U = 6665 \text{ kJ/m}^2/\text{h}^\circ\text{C}$.

No site www.sugartech.com, especializado em tecnologia do açúcar, é sugerida a seguinte equação para estimar o coeficiente de troca térmica de evaporadores (Van der Poel e colaboradores, Cap. 11 - 1ª Edição):

$$U = 0,465 \frac{T_{\text{caldo}}}{\text{Brx}_{\text{caldo}}} \quad ; \quad [\text{kW/m}^2 \text{ } ^\circ\text{C}] \quad (02)$$

Convertendo as unidades para aquelas empregadas neste trabalho, tem-se:

$$U = 1674 \frac{T_{\text{caldo}}}{\text{Brx}_{\text{caldo}}} \quad ; \quad [\text{kJ/m}^2 \text{ h } ^\circ\text{C}] \quad (03)$$

A estimativa de U utilizando-se a equação (03) resulta em $U=6690 \text{ kJ/m}^2/\text{h}^\circ\text{C}$. Apesar da grande concordância com o valor calculado, esta equação deve ser utilizada com cautela, visto que o procedimento mais adequado seria verificar o comportamento de U para várias situações de processo e ajustar adequadamente a constante. Ciente destas considerações, esta equação será utilizada para estimar U no modelo desenvolvido.

A Figura 5.12, ilustrada a seguir, representa esquematicamente o evaporador considerado para o desenvolvimento do modelo matemático. Os cálculos que se seguem foram efetuados para todos os instantes da base de dados.

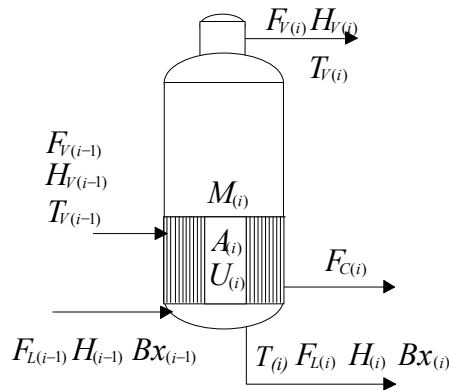


Figura 5.12: Modelo do evaporador considerado para o desenvolvimento do modelo matemático.

Onde :

$F(i)$ = Vazão de caldo na corrente i
 $Hl(i)$ = Entalpia da corrente i
 $T(i)$ = Temperatura do caldo no evaporador i
 $Bx(i)$ = Brix da corrente i
 $Fv(i)$ = Vazão de vapor no evaporador corrente i
 $Hv(i)$ = Entalpia do vapor da corrente i
 $Tv(i)$ = Temperatura do vapor da corrente i
 $A(i)$ = Área de troca térmica do evaporador i
 $U(i)$ = Coeficiente global de troca térmica

$i=0 \rightarrow$ Pré-evaporador $i=1,2,3 \rightarrow$ efeitos 1,2 e 3

Os principais objetivos desta etapa do trabalho eram:

- Calcular vazões e concentrações do caldo na saída dos efeitos intermediários;
- Calcular o consumo de vapor de escape; e
- Calcular a quantidade de vapor que sai do sistema na forma de "sangria".

No desenvolvimento do modelo foram feitas as seguintes considerações:

- Os dois pré-evaporadores foram considerados como um único com área equivalente;
- Apesar do multijato ser parte integrante do EME, este não foi considerado no modelo;
- Não foram consideradas perdas de calor para o ambiente;
- O vapor de cada efeito se encontrava saturado;
- Temperatura do líquido numericamente igual à do vapor, acrescido da elevação do ponto de ebulição devido ao efeito da concentração (correlação para EPEX - Anexo A);
- O vapor de escape que alimenta a calandra do pré-evaporador foi considerado saturado.
- Durante a operação não há perda de sacarose no equipamento.

Para o início do cálculo do estado estacionário, o sistema de equações foi alimentado com as seguintes variáveis e parâmetros:

$A_{(i)}$ → Área de troca térmica de cada efeito

$P_{v(i)}$ → Pressão do vapor em cada efeito

P_{st} → Pressão do vapor de escape que aquece o pré-evaporador

T_F, Bx_F, F_F → Temperatura, Brix e Vazão do caldo que alimenta o pré-evaporador

$Brx_{(0)} = 100 Bx_{(0)}$ → Brix do caldo que sai do pré-evaporador

$Brx_{(3)} = 100 Bx_{(3)}$ → Brix do caldo que sai do terceiro efeito

O conjunto de equações provenientes dos balanços de massa e energia foi resolvido de acordo com a seguinte seqüência:

1- Com os valores das pressões do vapor de escape e de cada evaporador foram calculadas as respectivas temperaturas, utilizando-se as correlações adequadas que se encontram no Anexo A:

$$T_{v_{ST}} = f(P_{ST})$$

$$T_{v(i)} = f(P_{v(i)}) \quad \text{para } i = 0 \text{ a } 3$$

2- Com os valores das temperaturas do vapor e com as concentrações médias dos efeitos foram calculadas:

$$\text{Entalpia do vapor dos efeitos} \rightarrow H_{v(i)} = H_{v(i)}(T_{v(i)}),$$

$$\text{Temperatura da fase líquida} \rightarrow T_{(i)} = T_{v(i)} + EPE_X(T_{v(i)}, Brx_{(i)})$$

$$\text{Entalpia do vapor dos efeitos} \rightarrow H_{l(i)} = H_{l(i)}(T_{v(i)}, Brx_{(i)})$$

$$\text{Coeficiente de troca térmica} \rightarrow U_{(0)} = 1674 T_{(0)} / Brx_{(0)}$$

3- A vazão de caldo que sai do efeito 3 foi calculada utilizando-se a equação (04):

$$F_{(3)} = \frac{F_F * Bx_F}{Bx_{(3)}} \quad (04)$$

4- Uma estimativa inicial do valor da vazão de vapor que sai do efeito 3 ($F_{v(3)}$) foi feita. Daí, o cálculo da vazão de caldo que sai do efeito 2 foi efetuado através da equação (05):

$$F_{(2)} = F_{(3)} + F_{v(3)} \quad (05)$$

5- A concentração do caldo que sai do efeito 2 foi calculada com a equação (06):

$$Bx_{(2)} = \frac{F_F * Bx_F}{F_{(2)}} \quad (06)$$

Neste ponto, a vazão de vapor que sai do efeito 2 era calculada levando-se em consideração a hipótese de que todo o vapor que sai do efeito 2 era enviado para a calandra do efeito 3 e lá, condensava-se cedendo calor.

$$Fv_{(2)} = \frac{F_{(3)} * Hl_{(3)} + Fv_{(3)} * Hv_{(3)} - F_{(2)} * Hl_{(2)}}{\Delta Hv_{(2)}} \quad (07)$$

Onde: Hl e Hv são as entalpias do líquido e do vapor, respectivamente, e $\Delta Hv_{(2)}$ é a entalpia de condensação do vapor do efeito 2.

Os cálculos referentes aos efeito 1 e ao pré-evaporador não serão mostrados, pois seguem a mesma ordem que foi usada para o efeito 2. O valor da vazão $Fv_{(0)}$ que resulta dos cálculos, refere-se apenas àquela parcela do vapor total gerado no pré-evaporador e que foi enviada para o primeiro efeito. A quantidade total de vapor pôde ser calculada de acordo com a equação (08):

$$Fv_{(0_TOTAL)} = F_F - F_{(0)} \quad (08)$$

Constatou-se que efetuando-se estes cálculos três vezes, mas recalculando as propriedades com os novos valores das concentrações, os resultados convergiam para um valor constante.

Em seguida, o calor cedido pelo vapor de escape era calculado com:

$$Q_{(0)} = U_{(0)} * A_{(0)} * (T_{ST} - T_{(0)}) \quad (09)$$

No passo seguinte, os cálculos foram refeitos ajustando-se de forma iterativa o valor estimado de $Fv_{(3)}$ (método de Newton-Secante), até que a igualdade seguinte fosse atingida, dentro de uma tolerância ε .

$$Q_{(0)} = F_{(0)} * Hl_{(0)} + Fv_{(0_TOTAL)} * Hv_{(0)} - F_F * Hl_F \quad (10)$$

A quantidade de vapor retirada do EME (sangria) resulta então:

$$Fv_{(0_SANGRIA)} = Fv_{(0_TOTAL)} - Fv_{(0)} \quad (11)$$

Caso seja necessário, os valores dos coeficientes globais de troca térmica dos efeitos ($U_{(i)}$) podem ser estimados assumindo-se que o calor requerido pelos efeitos vem da condensação do vapor nas calandras e que este segue a seguinte equação:

$$Fv_{(i-1)} * \Delta H_{v(i-1)} = U_{(i)} * A_{(i)} * (T_{v(i-1)} - T_{(i)}) \quad \text{para } i = 1, 2 \text{ e } 3 \quad (12)$$

5.5.1.1.1. Resultados da Modelagem do Estado Estacionário

A seguir serão mostrados os resultados gerados com os dados armazenados de dois dias de operação (2880 minutos). Vale observar que os valores das pressões foram filtrados com o algoritmo de Eilers (2003) antes de serem alimentados no modelo para determinação da temperatura nos efeitos. O efeito desta suavização do sinal pode ser observado na Figura 5.13:

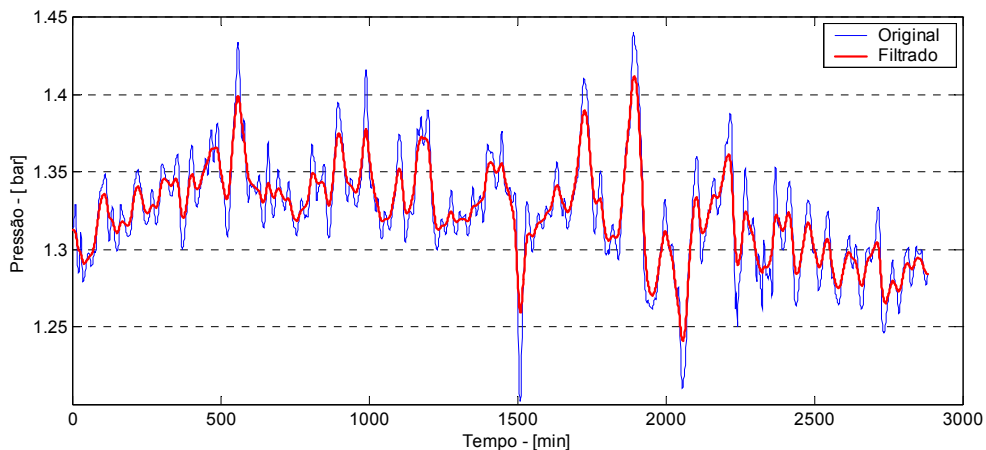


Figura 5.13: Dados da pressão do primeiro efeito suavizados para posterior utilização na determinação da temperatura.

As Figuras 5.14, 5.15 e 5.16 apresentam os valores de pressão do vapor de escape e dos efeitos, o Brix da última caixa e a vazão de entrada do EME, respectivamente. As variações encontradas nos valores ocorrem devido a mudanças no regime de produção, às complexas interações entre as variáveis de processo e por

variações nas condições do caldo misto gerado nas moendas. Considerou-se aqui que a temperatura de entrada da alimentação era de 100°C e que o Brix era de 18,9°Brix. A suposição de Bx_F apresentar pouca variação também é reforçada pela presença do tanque pulmão imediatamente antes do conjunto de evaporadores.

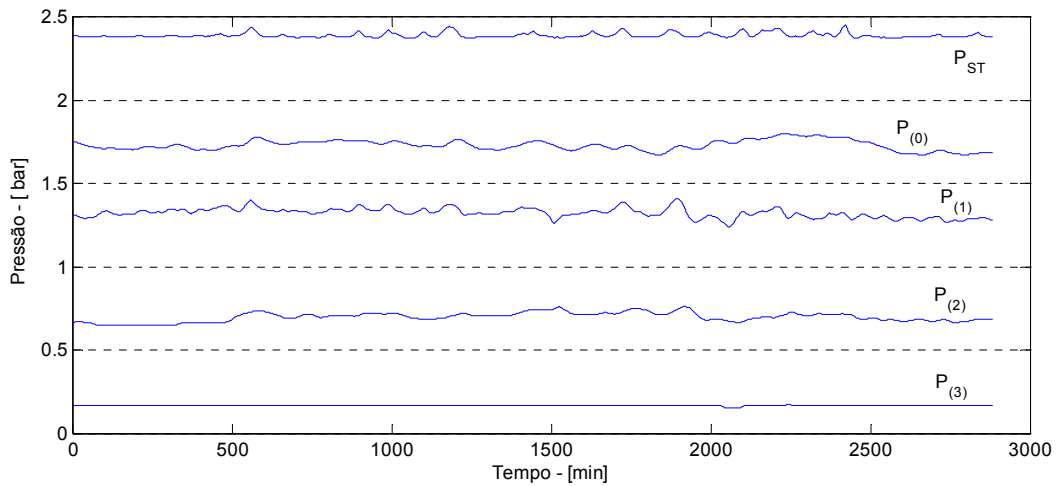


Figura 5.14: Representação da pressão de todos os efeitos e do vapor de escape.

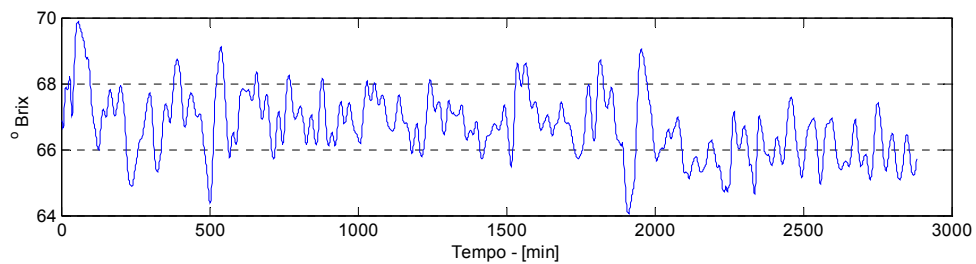


Figura 5.15: Comportamento do Brix do terceiro efeito (última caixa).

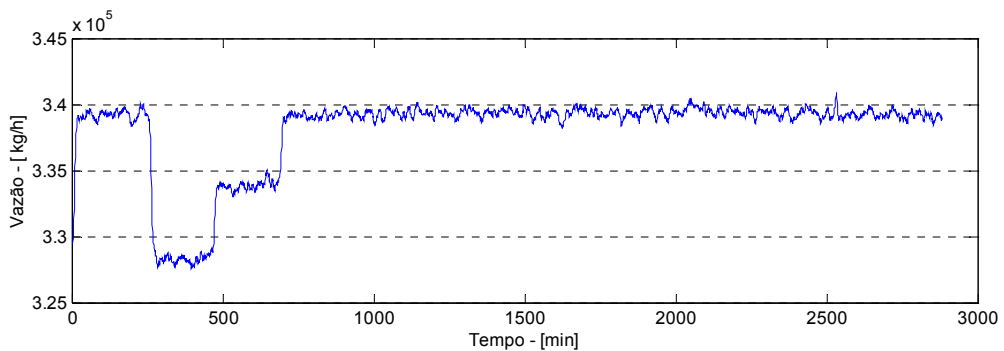


Figura 5.16: Representação do comportamento da vazão de entrada do EME.

A Figura 5.17 apresenta o valor final de $U_{(t)}$ calculado para cada instante:

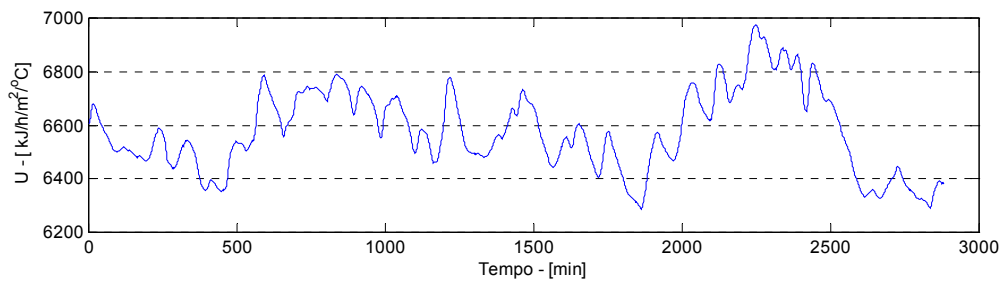


Figura 5.17: Valor final de $U_{(t)}$.

Por sua vez, a Figura 5.18 representa a concentração da última caixa de evaporação e mostra os valores de concentração calculados para o pré-evaporador e para os dois primeiros efeitos. Pode-se observar que os valores se mantêm dentro da faixa de valores usuais dos respectivos efeitos.

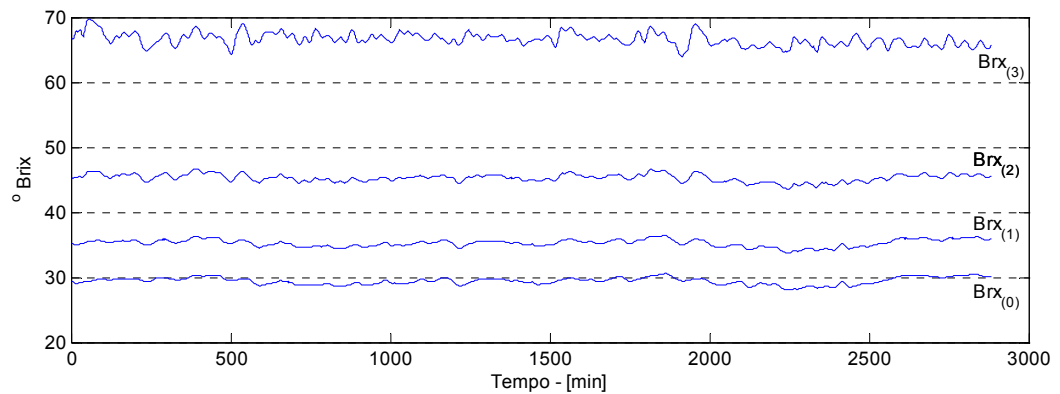


Figura 5.18: Concentração da última caixa de evaporação e valores de concentração calculados para o pré-evaporador e para os dois primeiros efeitos.

Finalmente, apresenta-se na Figura 5.19 a porcentagem de vapor sangrado, ou seja, o percentual do vapor que é gerado no pré-evaporador e que é direcionado para outros fins na planta industrial.

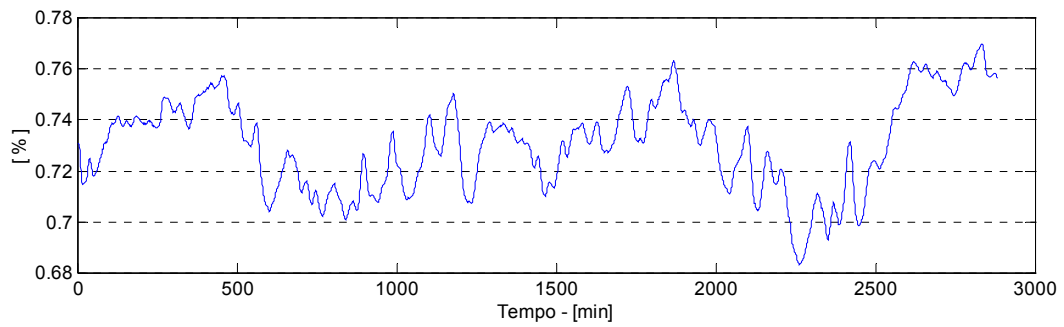


Figura 5.19: Percentual de vapor sangrado no pré-evaporador.

Pode-se observar, em média e para este período específico, que do vapor gerado nos pré-evaporadores ($F_{V(0_TOTAL)}$) 73% são "sangrados" para a fábrica, enquanto que os 27% restantes fornecem a energia necessária para a concentração do xarope. Estes valores mostram a importância da etapa de evaporação no balanço energético da planta e são, em si, resultados relevantes já que são estimativas que não se encontravam disponíveis na usina.

Por fim, as perdas de calor para o ambiente foram estimadas considerando-se, para o caso dos pré-evaporadores, os equipamentos aproximados por cilindros de 5 metros de diâmetro e 7 metros de altura com superfície a 100°C. A temperatura do ambiente utilizada foi de 35°C e o coeficiente de transferência por convecção natural foi de 126 kJ/m² h°C (o maior valor típico citado por Braga Filho, 2004). Uma vez que o calor perdido calculado representa apenas 0,3% do calor recebido pelo equipamento, a desconsideração desta perda foi perfeitamente adequada.

5.5.1.1.2. Implementação Gráfica

A interface do programa de cálculo da evaporação foi desenvolvida de modo a apresentar os valores das variáveis na tela e alimentá-los nas funções que calculavam o estado estacionário. Os valores presentes nas bases de dados, as estimativas das variáveis e os resultados dos cálculos do estado estacionário são apresentados na tela de forma similar àquela observada no processo industrial. Todavia, o usuário pode ajustar a representação do tempo de operação de modo que, por exemplo, cada hora do processo seja equivalente a dez segundos de simulação. Interessante notar que mesmo com tal compressão do tempo, um dia de operação é equivalente a 4 minutos de simulação.

O programa calcula a vazão de vapor gerada nos pré- evaporadores, as concentrações, as temperaturas e as vazões de saída de cada efeito intermediário. Além disso, o usuário também tem acesso aos valores calculados das propriedades físicas. Os resultados podem ser visualizados numericamente ou em forma de gráficos, que podem ser salvos como figuras ou exportados para editores de texto.

A Figura 5.20, ilustrada a seguir, mostra a tela de apresentação do programa:

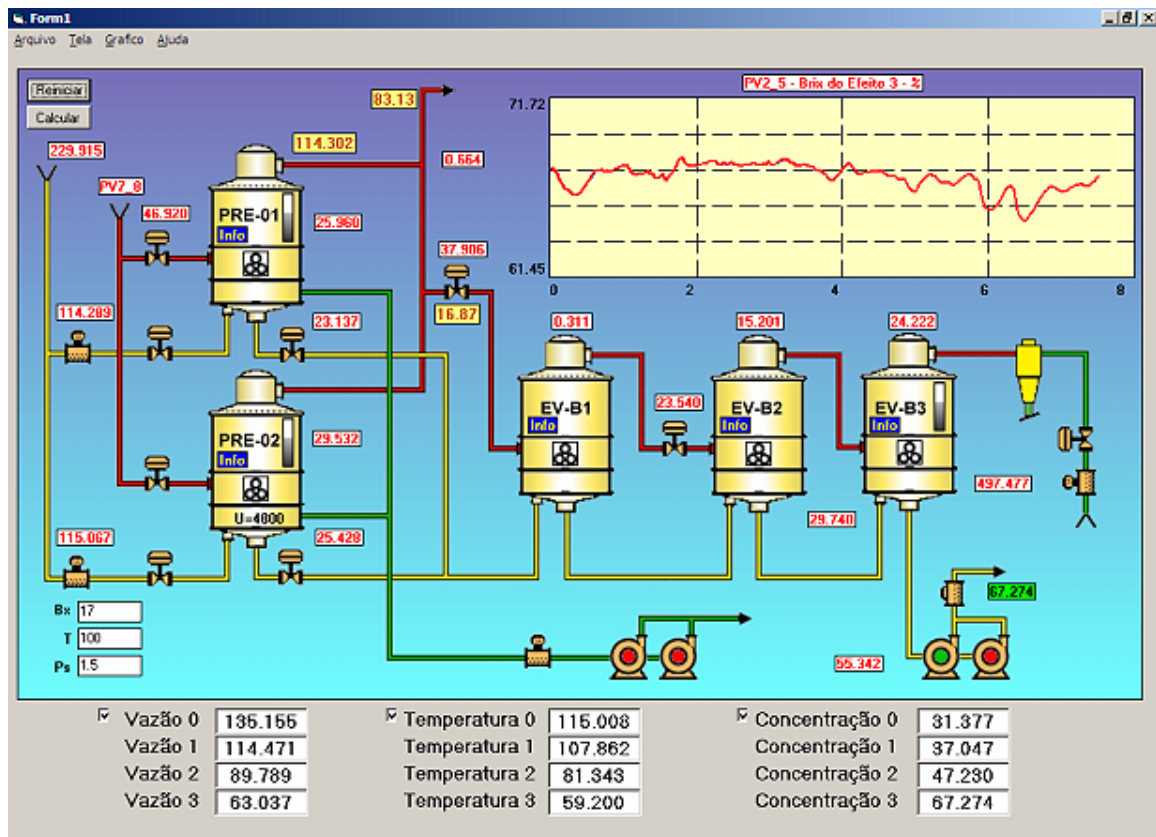


Figura 5.20: Tela de entrada do programa que calcula o modelo estacionário do EME.

5.5.1.2. Modelo do Estado Transiente do EME

A abordagem para o desenvolvimento do modelo dinâmico do EME foi diferente daquela descrita para o modelo estacionário. No caso da modelagem do estado estacionário foram utilizadas todas as informações disponíveis no processo industrial, de modo a permitir a construção do equacionamento. Desta forma, não era possível comparar diretamente os resultados. Já no caso do modelo dinâmico o objetivo é estimar o valor da concentração do último efeito ao longo da operação do EME e compará-lo com o valor industrial.

As considerações simplificadoras adotadas no modelo estacionário foram estendidas para o modelo dinâmico. No entanto, novas considerações foram necessárias em virtude da ausência dos valores de vazão entre efeitos intermediários e a não utilização do valor de $Bx_{(3)}$ impedirem a resolução do sistema de equações de balanço da forma habitual.

Diante de tal situação, a primeira simplificação realizada foi aproximar a derivada da temperatura pela razão entre a diferença de dois sinais medidos e o intervalo de tempo entre estas medidas: foi estabelecido o intervalo de um minuto entre as medidas (período aproximadamente seis vezes menor que o tempo de residência dos equipamentos), e, desta forma, a derivada da temperatura foi aproximada pela diferença entre duas medidas consecutivas. O mesmo enfoque foi dado na aproximação das derivadas da massa total contida no pré-evaporador e na última caixa de evaporação, porém, neste caso, utilizou-se a diferença do sinal do nível presente na base de dados. Nos primeiro e segundo efeitos, onde não havia medida do nível, assumiu-se variação nula da massa contida nestes efeitos, o que eliminou as respectivas derivadas do equacionamento.

O modo como foram arranjadas as equações do modelo está mostrado a seguir:

$$Fv_{(0_TOTAL)} = \frac{-Cp_{(0)} * M_{(0)} * \frac{dT_{(0)}}{dt} + U_{(0)} * A_{(0)} * (T_{(S)} - T_{(0)}) + F_F * (Cp_{(F)} * T_{(F)} - Cp_{(0)} * T_{(0)})}{Hv_{(0)} - Cp_{(0)} * T_{(0)}} \quad (13)$$

$$F_{(0)} = F_F - Fv_{(0)} - \frac{dM_{(0)}}{dt} \quad (14)$$

$$Fv_{(1)} = \frac{-Cp_{(1)} * M_{(1)} * \frac{dT_{(1)}}{dt} + U_{(1)} * A_{(1)} * (T_{(0)} - T_{(1)}) + F_{(0)} * (Cp_{(0)} * T_{(0)} - Cp_{(1)} * T_{(1)})}{Hv_{(1)} - Cp_{(1)} * T_{(1)}} \quad (15)$$

$$F_{(1)} = F_{(0)} - Fv_{(1)} \quad (16)$$

$$Fv_{(2)} = \frac{-Cp_{(2)} * M_{(2)} * \frac{dT_{(2)}}{dt} + U_{(2)} * A_{(2)} * (T_{(1)} - T_{(2)}) + F_{(1)} * (Cp_{(1)} * T_{(1)} - Cp_{(2)} * T_{(2)})}{Hv_{(2)} - Cp_{(2)} * T_{(2)}} \quad (17)$$

$$F_{(2)} = F_{(1)} - Fv_{(2)} \quad (18)$$

$$Fv_{(3)} = \frac{-Cp_{(3)} * M_{(3)} * \frac{dT_{(3)}}{dt} + U_{(3)} * A_{(3)} * (T_{(2)} - T_{(3)}) + F_{(2)} * (Cp_{(2)} * T_{(2)} - Cp_{(3)} * T_{(3)})}{Hv_{(3)} - Cp_{(3)} * T_{(3)}} \quad (19)$$

$$F_{(3)} = F_{(2)} - Fv_{(3)} - \frac{dM_{(3)}}{dt} \quad (20)$$

$$\frac{dBx_{(0)}}{dt} = \frac{F_F * Bx_F - F_{(0)} * Bx_{(0)} - Bx_{(0)} * \frac{dM_{(0)}}{dt}}{M_{(0)}} \quad (21)$$

$$\frac{dBx_{(1)}}{dt} = \frac{F_{(0)} * Bx_{(0)} - F_{(1)} * Bx_{(1)}}{M_{(1)}} \quad (22)$$

$$\frac{dBx_{(2)}}{dt} = \frac{F_{(1)} * Bx_{(1)} - F_{(2)} * Bx_{(2)}}{M_{(2)}} \quad (23)$$

$$\frac{dBx_{(3)}}{dt} = \frac{F_{(2)} * Bx_{(2)} - F_{(3)} * Bx_{(3)} - \frac{dM_{(3)}}{dt}}{M_{(3)}} \quad (24)$$

Os valores iniciais de concentração utilizados na resolução do sistema de equações foram os valores médios provenientes do estado estacionário. Em relação à massa inicial contida em cada um dos efeitos, estas foram calculadas através da equação da densidade. Já os valores iniciais das temperaturas foram obtidos por meio do sinal de pressão.

Analisando-se as equações anteriormente apresentadas, observa-se que foram introduzidos os coeficientes de troca térmica para as caixas de evaporação. A representação destes parâmetros seguiu a equação (25):

$$U_{(i)} = Ku_{(i)} \frac{T_{(i)}}{Bx_{(i)}} \quad \text{para } i=[0;3] \quad (25)$$

Onde $Ku_{(i)}$ são constantes que tiveram seu valor ajustado.

O ajuste das constantes $Ku_{(i)}$ foi efetuado com dados de um dia de operação (1440 minutos) de modo a diminuir a diferença entre o valor calculado de $Bx_{(3)}$ e aquele oriundo da base de dados. As Figuras 5.21, 5.22 e 5.23 mostram as variáveis que foram utilizadas como entradas do modelo:

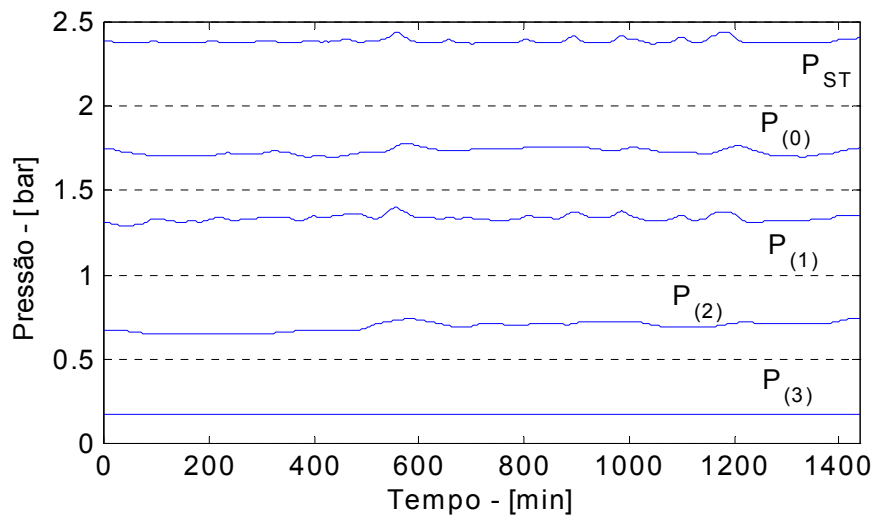


Figura 5.21: Pressão de entrada de todos os efeitos e do vapor de escape.

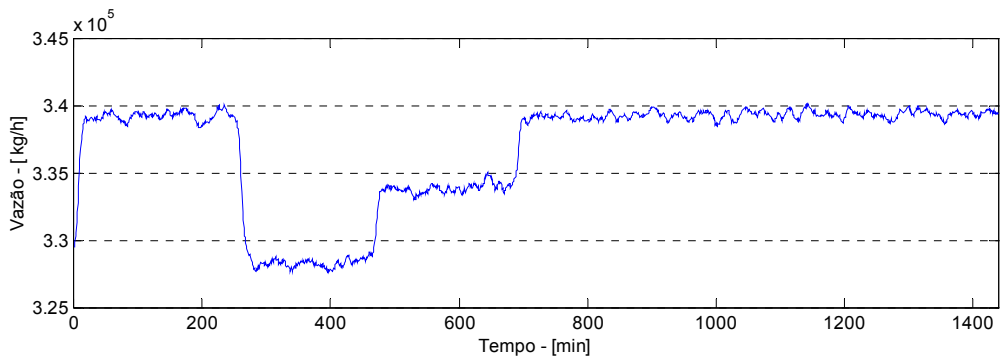


Figura 5.22: Vazão de alimentação utilizada como entrada do modelo.

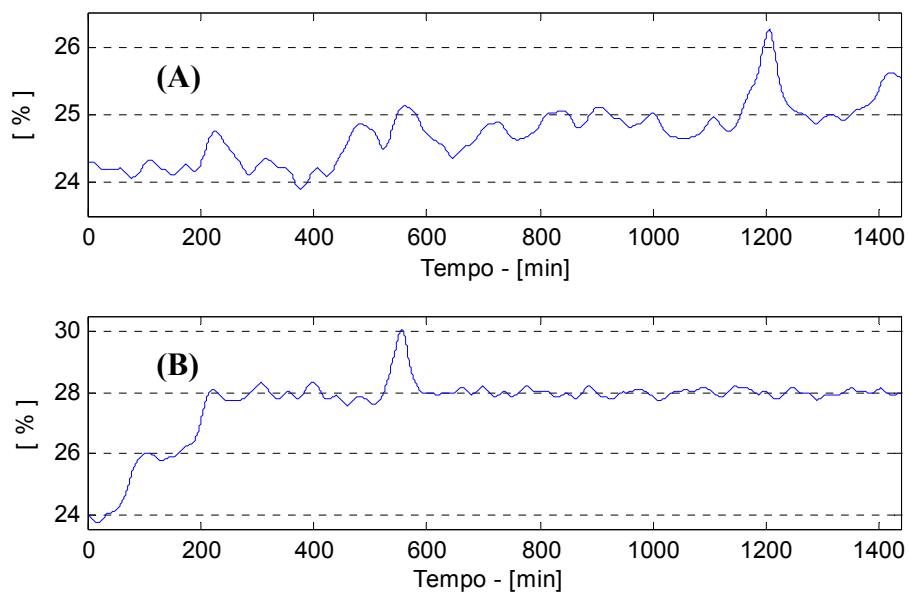


Figura 5.23: Nível do pré- evaporador (A) e da última caixa (B) utilizados no ajuste dos parâmetros.

Os valores obtidos do ajuste de $Ku_{(i)}$ foram:

$$Ku_{(0)} = 1572,1 \text{ kJ} \cdot \text{Brix}/\text{°C}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{m}^2$$

$$Ku_{(1)} = 1487,5 \text{ kJ} \cdot \text{Brix}/\text{°C}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{m}^2$$

$$Ku_{(2)} = 1941,7 \text{ kJ} \cdot \text{Brix}/\text{°C}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{m}^2$$

$$Ku_{(3)} = 2715,8 \text{ kJ} \cdot \text{Brix}/\text{°C}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{m}^2$$

O resultado da simulação utilizando estes parâmetros otimizados encontra-se apresentado na Figura 5.24. A concordância entre as duas curvas não é perfeita, mas o erro médio nas medidas foi inferior a 2°Brix.

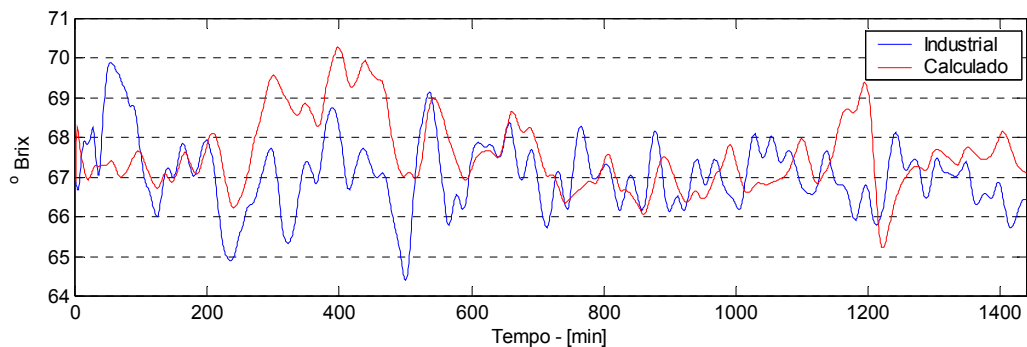


Figura 5.24: Comparação entre o valor $Brx_{(3)}$ calculado e o valor industrial na fase de ajuste.

A Figura 5.25 mostra a simulação de três dias de operação (4320 minutos), tendo sido o primeiro deles aquele utilizado para o ajuste dos parâmetros. Observa-se que o valor estimado se mantém próximo do valor industrial, principalmente até o minuto 2500; a partir deste ponto as estimativas do modelo se deterioram.

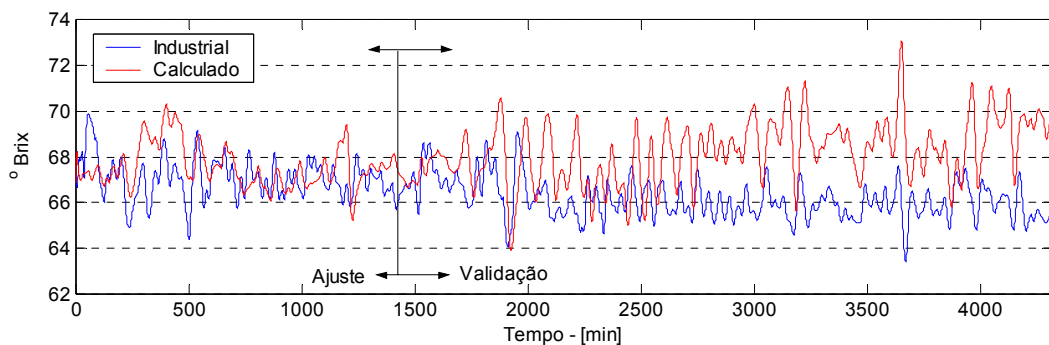


Figura 5.25: Comparação entre o valor $Brx_{(3)}$ calculado e o valor industrial.

Um dos motivos pelo qual o modelo transiente não representou de maneira adequada o último terço dos dados pode ser visualizado no comportamento das variáveis de entrada deste período. Na Figura 5.26 é mostrado como se comportaram os níveis do pré-evaporador e do último efeito. Nota-se que os picos na estimativa de $Brix_{(3)}$ coincidem com variações bruscas e de grande amplitude no nível destes equipamentos.

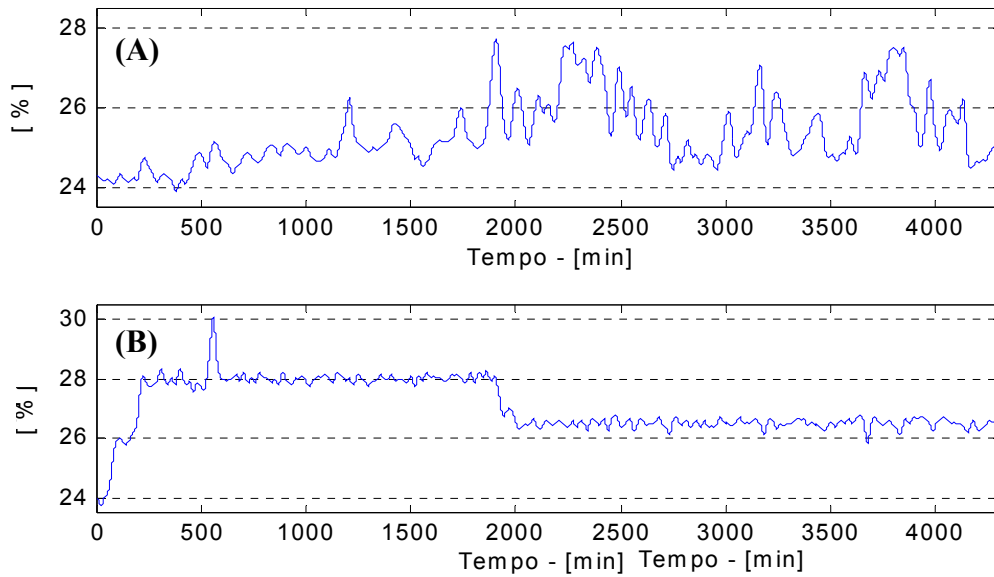


Figura 5.26: Representação do nível do pré-evaporador (A) e da última caixa (B).

Foram feitas simulações utilizando-se os mesmos parâmetros $Ku_{(i)}$, com dados de outros cinco dias de operação (7200 minutos) e distantes do primeiro grupo por aproximadamente dez dias. O resultado é apresentado na Figura 5.27:

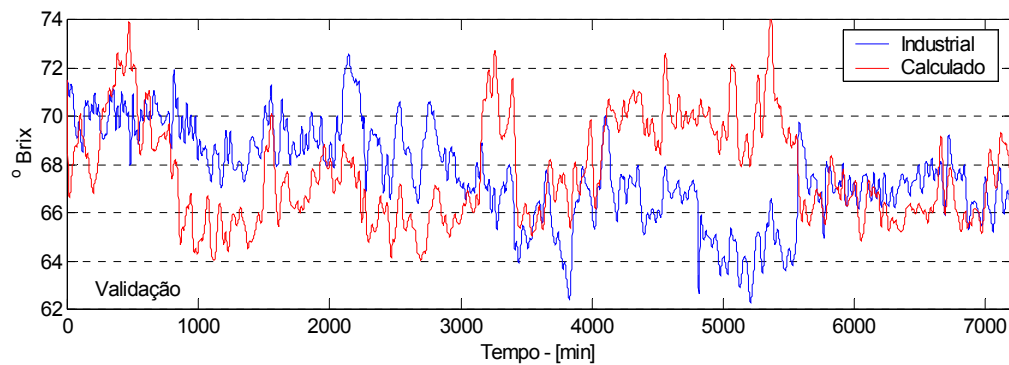


Figura 5.27: Estimativa de $Brix_{(3)}$ para cinco dias de operação.

Talvez mais importante que a boa estimativa de $Brx_{(3)}$ que se encontra após o minuto 5600, seja o comportamento que pode ser observado na Figura 5.28, que é um extrato da Figura 5.27 entre os minutos 1000 e 3000. Nota-se que qualitativamente, o comportamento da planta industrial foi completamente descrito pelo modelo dinâmico. A defasagem observada pode ter ocorrido devido a alguma mudança de *setpoint* ocorrida no período ou, o que é mais provável, a concentração do caldo de entrada não era próxima do valor médio de $18,9^{\circ}\text{Brix}$ utilizado nos cálculos. Esta discussão também se aplica ao período entre os minutos 4200 e 5400.

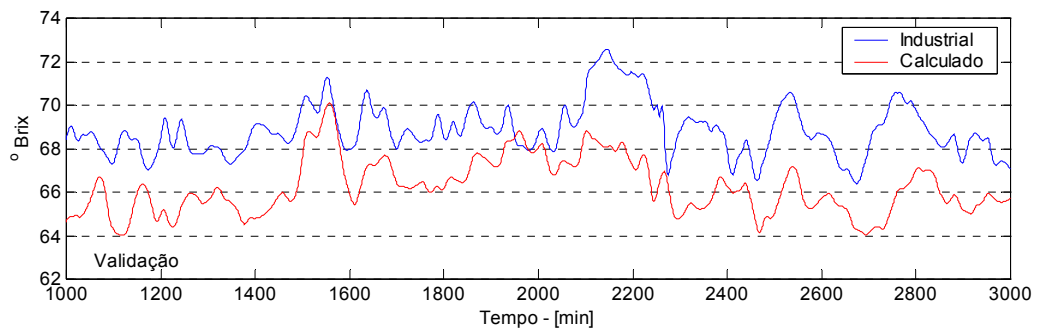


Figura 5.28: Extrato da Figura 5.27 entre os minutos 1000 e 3000

Os resultados mostrados pelos modelos determinísticos sugerem que esta abordagem tem grande potencial, mas necessita de mais dados de processo para poder se tornar uma ferramenta confiável em relação às estimativas geradas.

As estimativas do modelo dinâmico foram comparadas com aquelas obtidas do modelo estacionário para o mesmo período. Os valores resultantes são apresentados a seguir:

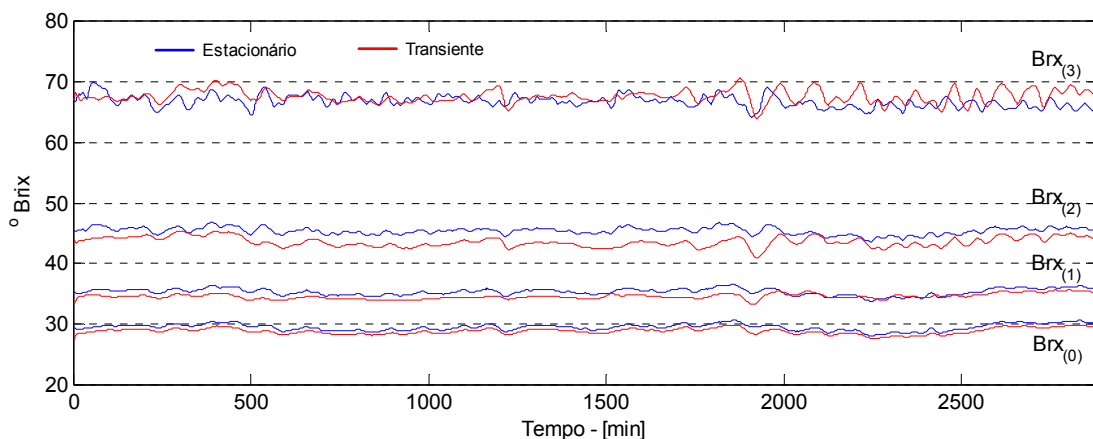


Figura 5.29: Comparação entre os valores de concentração calculados com o modelo estacionário e as estimativas do modelo dinâmico.

Analisando-se a Figura 5.29, observa-se que o modelo estimou satisfatoriamente $Brx_{(3)}$, mas as estimativas das concentrações dos demais efeitos se mantiveram abaixo dos valores calculados pelo modelo estacionário. Além da necessidade de se estimar de forma mais precisa os valores iniciais utilizados, este comportamento sugere que na fase de ajuste dos parâmetros seria necessário minimizar não só o erro da estimativa de $Brx_{(3)}$, mas também das demais concentrações.

O modelo dinâmico descrito nesta seção foi incorporado ao simulador do processo conferindo-lhe maior versatilidade e ampliando a gama de análises possíveis.

5.6. Utilização de Redes Neurais

Na resolução dos balanços de massa e energia do modelo estacionário e do modelo transiente tratados anteriormente algumas variáveis requeridas não se encontravam disponíveis na planta industrial, como era o caso, por exemplo, da temperatura do xarope nos equipamentos (que pôde ser estimada pela pressão). Em outros casos, o valor de uma variável se encontrava disponível por meio de valores de pouco significado físico, como a percentagem de fechamento das válvulas no lugar da vazão, onde apesar de existir uma relação entre o valor apresentado e a medida real, tal relação não é direta nem simples de se obter. Pelo que foi exposto, existe grande dificuldade na utilização de modelos determinísticos em ambientes nos quais as medidas das grandezas do processo não estão adequadamente disponíveis. Uma abordagem mais apropriada em tais ambientes é a utilização de *software* sensores na forma de Redes Neurais Artificiais (RNA).

Na Engenharia Química, as redes neurais começaram a ser utilizadas na detecção e diagnóstico de falhas em processos químicos e, atualmente, vêm se tornando uma importante ferramenta empregada na simulação e no controle de processos. Sua principal característica é a capacidade de reproduzir com fidelidade o comportamento de sistemas não-lineares, demandando tempos de processamento muito reduzidos. Além disso, no caso de utilização de um modelo caixa preta, dispensa a elaboração de modelos matemáticos baseados em equações fundamentais e constitutivas os quais, muitas vezes, pressupõem a adoção de grande número de hipóteses simplificadoras para que sua utilização se torne viável.

Apesar dos modelos baseados nos "princípios fundamentais" normalmente se comportarem melhor na extrapolação das estimativas para regiões não cobertas no treinamento da rede neural, a utilização destas, muitas vezes, apresenta grande capacidade de ajuste aos dados industriais, o que justifica sua adoção para a geração de estimativas.

5.6.1. Análise dos Dados de Entrada

Para se obter sucesso na modelagem empregando redes neurais é preciso conhecer as principais variáveis do processo e possuir uma base de dados de boa qualidade, ou seja, que contenha todas as informações importantes dentro do domínio desejado. A rede, depois de treinada com esta base de dados, apresenta uma resposta rápida e pode, em alguns casos, apresentar bons resultados mesmo em extrapolações moderadas.

Um ponto que merece ser comentado neste momento é a necessidade da existência, ou pelo menos que haja uma forte suspeita, de uma relação entre as variáveis que serão as entradas da RNA e as variáveis de saída (alvo). Esta relação pode ser ruidosa e de um tipo não necessariamente conhecido de antemão, mas deve existir. Tal aspecto foi abordado utilizando-se análise de correlação para fazer uma seleção preliminar das variáveis de entrada, de modo a impedir que a eficiência das RNAs fosse afetada pela utilização de dados não adequados.

Para selecionar as variáveis que seriam utilizadas como entrada das redes neurais foi feita uma análise de correlação entre as variáveis e o Brix de saída da última caixa, uma vez que o objetivo das redes neurais seria inferir esta última, utilizando as variáveis do processo disponibilizadas pelo sistema supervisor.

O coeficiente de correlação é adimensional e pode variar de um positivo (indicando uma perfeita relação positiva), passando por zero (indicando ausência de uma relação) até um negativo (indicando uma perfeita relação negativa). É necessário, porém, enfatizar que se duas variáveis mostram um grau de correlação elevado este fato, isoladamente, não indica a causalidade da relação, isto é, é necessária a análise do processo para justificar se a primeira variável realmente tem efeito no comportamento da segunda; situação na qual o modelo determinístico pode ser útil.

Foram analisadas todas as 35 variáveis que demonstraram ter alguma relação com a concentração do último efeito. A análise de correlação também foi feita levando-se em conta atrasos entre as variáveis e o Brix, uma vez que o material contido nos equipamento faz com que as variações sofridas pelos primeiros efeitos somente sejam sentidas nos últimos efeitos e depois de vários minutos. A resposta típica da análise de correlação está mostrada na Figura 5.30:

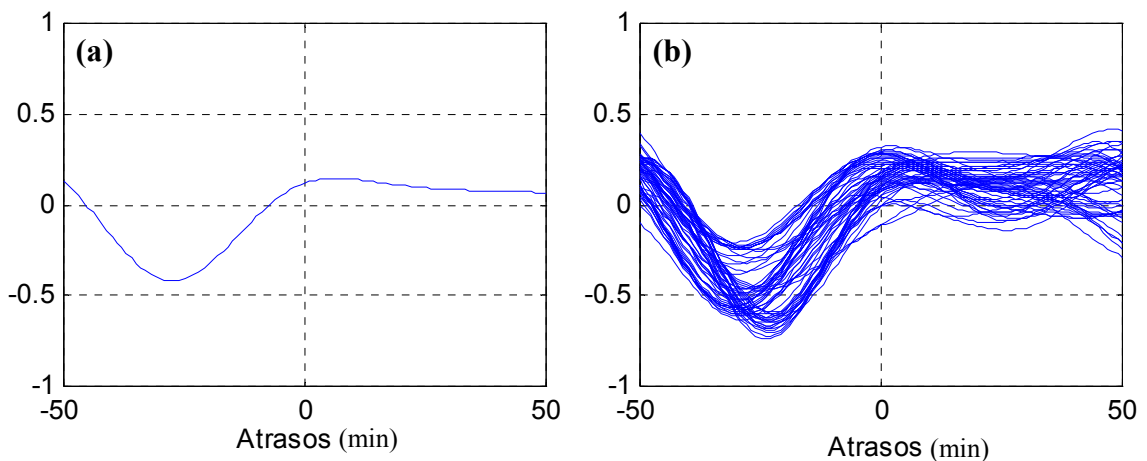


Figura 5.30: Resultados da análise de correlação de certa variável utilizando (a) toda a base de dados e (b) por meio de janelas de dados.

A Figura 5.30a foi gerada analisando-se todos os valores de uma determinada variável na base de dados. No entanto, uma outra abordagem possível consiste em analisar a correlação de uma “janela de dados” que se move ao longo da base de dados. Desta forma, é possível constatar se houve momentos onde a correlação foi maior ou menor. A Figura 5.30b mostra o resultado da análise de correlação para uma “janela” de 500 minutos, sendo que cada linha representa um avanço de 25 minutos. Pode-se notar que em certos momentos a correlação chegou a atingir valores maiores que 0,7. Ao mesmo tempo, há regiões nas quais o comportamento das duas variáveis é pouco correlacionado.

A Figura 5.31 mostra dois casos típicos onde, pelo coeficiente de correlação, determinou-se se uma variável seria aceita - Figura 5.31a - ou rejeitada - Figura 5.31b - como provável entrada da rede.

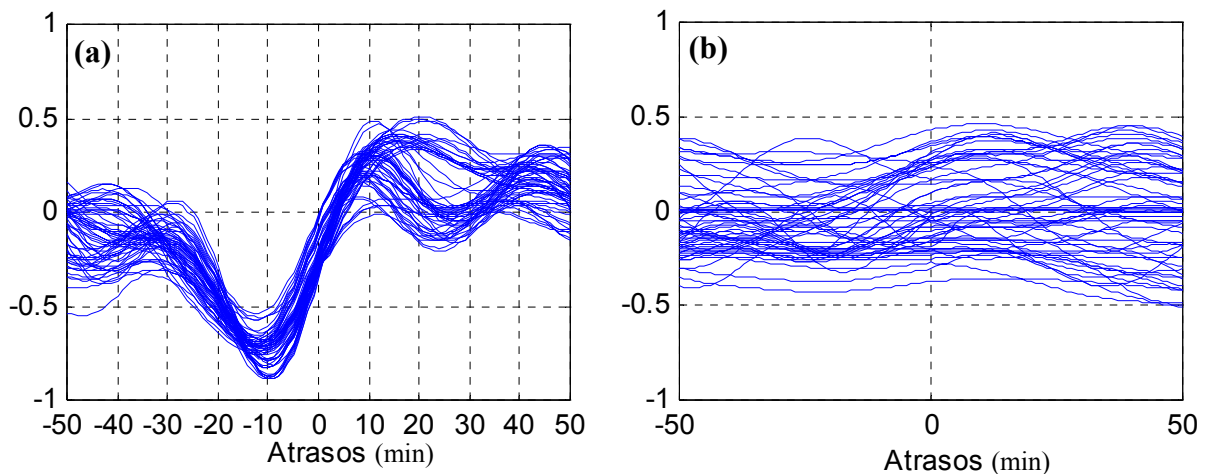


Figura 5.31: Exemplos da utilização da análise de correlação na aceitação ou rejeição de uma variável.

Analisando-se a Figura 5.31a, pode-se notar que a maior correlação encontra-se em torno do ponto '-10 minutos', ou seja, um pouco antes do tempo atual (zero no eixo das abscissas). Isto indica que uma mudança nesta variável possui uma relação com as variações do Brix que ocorrerão aproximadamente 10 minutos depois. É importante salientar que este tempo não representa necessariamente o atraso da causalidade física entre estas. O valor das variáveis utilizado como entrada das redes era referente ao ponto de maior correlação. Neste exemplo, o valor da variável que será informado à rede para a estimativa de $Brix_{(3)}$ no tempo zero é aquele presente na base de dados gravada há 10 minutos.

A escolha das variáveis, porém, não se apoiou apenas nos resultados da análise de correlação, pois é possível que haja complexas inter-relações para algumas delas não retratadas por esta análise. Outro ponto que dificulta a determinação direta do grau de relação entre as variáveis é o fato de algumas destas estarem sendo controladas. É o que ocorre, por exemplo, com a pressão da terceira caixa de evaporação. Sabe-se que variações nesta pressão irão afetar a concentração do xarope, porém, se a pressão for bem controlada, mantendo-se constante em seu *setpoint*, a análise de correlação não irá detectar relação alguma entre estas variáveis. Deste modo, o conhecimento do processo e a análise visual dos gráficos com as variáveis desempenharam um papel importante na escolha das variáveis que seriam utilizadas como entradas da rede neural.

A tabela seguinte lista as variáveis que foram inicialmente selecionadas por meio da análise descrita:

Tabela 5.5: Lista de variáveis selecionadas como entradas das redes neurais.

Variável	Descrição	Atraso (min)
NN_1	MV ¹ Nível Pré-Evaporador 02	12
NN_2	MV ¹ Nível Pré-Evaporador 03	13
NN_3	MV ¹ Nível Caixa 03	10
NN_4	MV ¹ Pressão Caixa 02	17
NN_5	Nível da Caixa 03	10
NN_6	Pressão da Caixa 01	14
NN_7	Temperatura Caldo Fábrica	18
NN_8	Nível do Pré-Evaporador 02	10
NN_9	Nível do Pré-Evaporador 03	20
NN_10	Pressão do Vapor de Escape	15
NN_11	Vazão de Água Multijato	0

¹ Variáveis manipuladas

Com as variáveis acima listadas foram preparados dois arquivos de entrada. Juntos, estes arquivos, doravante chamados de Bases, continham os valores de todas as variáveis acumulados durante oito dias de operação. Assim, a Base 01 se refere aos três primeiros dias dos dados utilizados e a Base 02 aos restantes. As variáveis escolhidas para um determinado treinamento eram separadas pelas rotinas de carregamento das Bases.

A função do Matlab utilizada para gerar as RNAs foi a “NEWFF”. Esta função gerava uma rede com estrutura multicamadas sem recorrência, tendo sido ajustada para trabalhar (1) com a função tangente sigmoidal hiperbólica (*tansig*) como função de ativação da camada oculta e (2) com a função linear pura (*purelin*) como função de ativação da camada de saída. A escolha das funções de ativação resultou de algumas tentativas de combinação entre as várias funções de ativação disponíveis. O método de treinamento utilizado foi o de retropropagação com o algoritmo de Levenberg-Marquardt atualizando os pesos ao longo do processo. Para o treinamento foram utilizados os dois primeiros dias da Base 01 e os quatro primeiros dias da Base 02. Os dois dias restantes foram utilizados para validação da rede. Em todas as redes geradas os valores das Bases foram apresentados 300 vezes à rede durante o treinamento. Vale observar que antes de ser iniciado o procedimento de treinamento, a seqüência dos valores das Bases era modificada aleatoriamente. Tal procedimento,

prática comum nos trabalhos com redes neurais, visa minimizar as chances do treinamento estacionar em mínimos locais antes que toda a base seja apresentada.

Além das rotinas padrão, foram desenvolvidas outras rotinas que visavam agilizar o processo de testes de várias topologias de rede. Elas atuavam no carregamento das Bases, na separação das variáveis que seriam utilizadas nos treinamentos, na normalização dos dados e também na busca automática de redes (o treinamento era reiniciado várias vezes selecionando a melhor rede de um grupo de tentativas).

Como primeiro passo na busca da melhor topologia das redes, optou-se por se utilizar apenas uma camada de neurônios ocultos. Quanto ao número de neurônios na camada de entrada e na camada oculta, estes foram alvo de uma série de testes que serão discutidos na seqüência. Nos próximos parágrafos, a discussão relacionar-se-á com as redes que tiveram como entradas os valores de todas as variáveis, ou seja, de NN_1 a NN_11. Estas variáveis estão graficamente apresentadas no Anexo B.

A Figura 5.32 mostra o erro quadrático associado ao treinamento durante a busca da melhor rede com as topologias 11-5-1 (onze entradas, cinco neurônios na camada oculta e uma saída), 11-7-1 e 11-10-1. Nestas redes, utilizou-se a função de ativação do tipo *tansig* para os neurônios da camada oculta e a função *purelin* nos neurônios da camada de saída (*tansig-purelin*). Os pesos das redes eram reiniciados (assumiam valores aleatórios) a cada nova rede. Nesta figura, pode-se analisar o erro associado a 10 redes testadas para cada topologia. É visível que a rede com 10 neurônios na camada oculta apresenta, na média, um erro menor. No entanto, a importância em se reiniciar a busca dos melhores pesos fica evidenciada quando se verifica a existência de uma rede 11-5-1, penúltimo ponto no gráfico, que teve um desempenho superior àquele observado para uma rede 11-10-1.

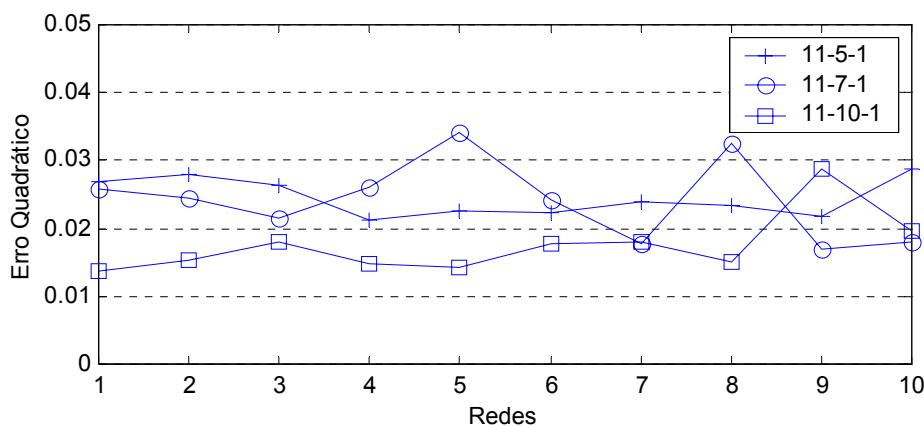


Figura 5.32: Erro quadrático associado às topologias 11-5-1, 11-7-1 e 11-10-1 de redes *tansig-purelin*.

A Figura 5.33, por sua vez, mostra a busca da melhor rede com as topologias 11-2-1, 11-10-1 e 11-15-1 para redes que utilizaram a função de ativação do tipo *tansig* para os dois tipos de neurônios (*tansig-tansig*). O gráfico mostra que o erro associado às redes 11-15-1 durante a fase de treinamento foi sempre menor que aquele observado para as demais topologias testadas, o que, em parte, era esperado, dada a utilização de maior número de neurônios. Uma vez que o mesmo ocorreu com os erros da fase de validação e o que o tempo de treinamento ainda era admissível, esta topologia foi utilizada nos estudos posteriores.

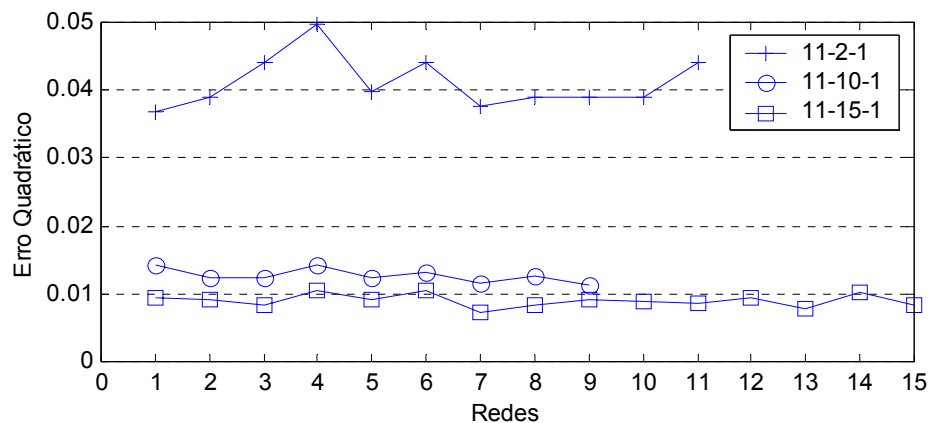


Figura 5.33: Erro quadrático associado às topologias 11-2-1, 11-10-1 e 11-11-1 de redes *tansig-tansig*.

Quanto ao número de variáveis de entrada foram testadas várias configurações. As Figuras 5.34 e 5.35, por exemplo, mostram o resultado do treinamento de uma rede 5-15-1 com as seguintes variáveis: NN_2, NN_3, NN_5, NN_9 e NN_11. Pode-se notar que, já no treinamento, a rede apresentou baixa capacidade de ajuste principalmente para os valores da Base 02.

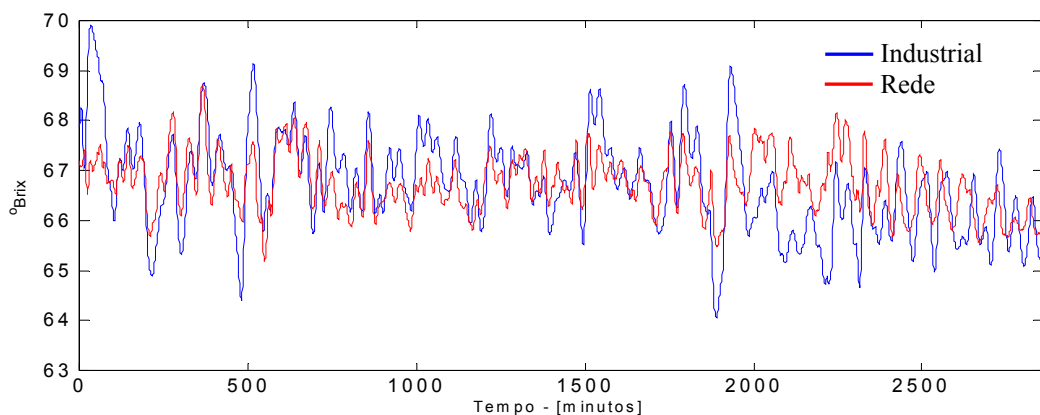


Figura 5.34: Estimativa final da rede para os dados de entrada da Base 01.

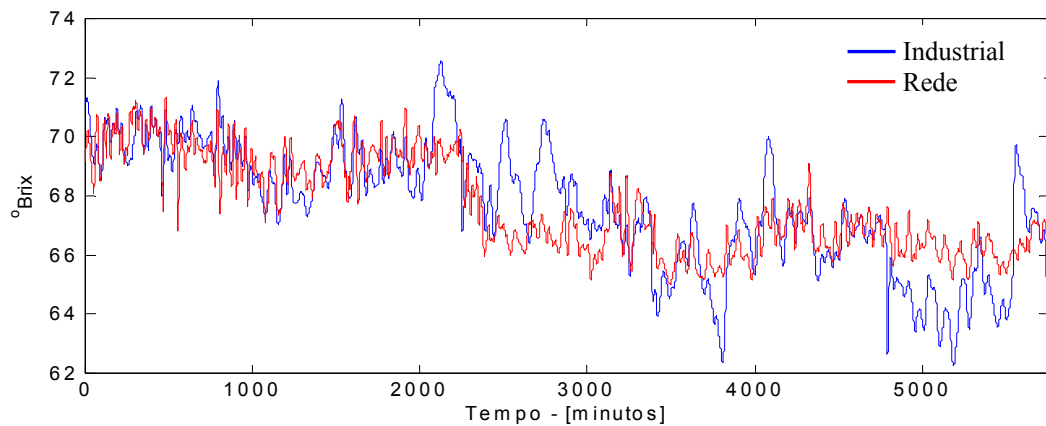


Figura 5.35: Estimativa final da rede para os dados de entrada da Base 02.

Uma vez que as Bases abrangiam a operação de vários dias e considerando que neste período o grau de influência de determinadas variáveis sobre o Brix da última caixa poderia ter sofrido variações significativas, foram adotadas como entradas das redes todas as variáveis listadas na Tabela 5.5.

Como esta decisão aumentava a quantidade de dados a ser apresentada para as redes durante a fase de treinamento, as Bases de dados utilizadas nesta fase eram formadas pelos valores das variáveis medidos a cada dois minutos e não a cada um minuto como está nas Bases originais. Esta tentativa de se minimizar o esforço computacional foi bem sucedida, pois a convergência foi mais rápida e as respostas foram semelhantes às obtidas com a apresentação das Bases de dados completas. O motivo para este bom resultado pode estar relacionado a pouca variação que existe entre dois pontos adjacentes das bases, o que facilita a interpolação das redes.

As discussões a seguir referem-se à análise das Figuras 5.36 e 5.38, que mostram as estimativas de $Brix_{(3)}$ geradas por uma rede (11-15-1 *tansig-tansig*) para as etapas de treinamento e validação, utilizando-se as Bases 01 e 02, respectivamente. Analisando-se a Figura 5.36 pode-se observar que a rede foi capaz, ao final do treinamento, de reproduzir muito bem o comportamento qualitativo do perfil da concentração da última caixa e gerar estimativas muito próximas dos valores industriais.

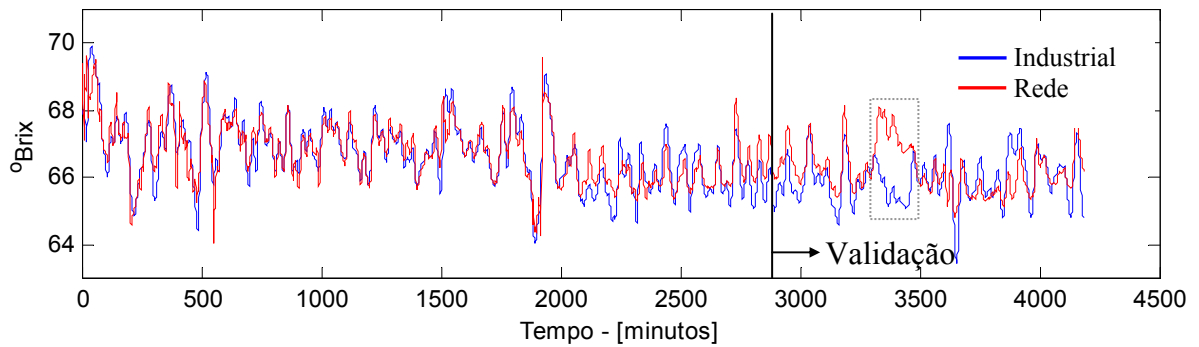


Figura 5.36: Estimativas de $Brx_{(3)}$ geradas por uma rede 11-15-1 *tansig-tansig* para as etapas de treinamento e validação da rede neural para dados da Base 01.

Na fase de validação a rede manteve a mesma boa capacidade de previsão, porém, em determinados pontos ela gerou resultados com aproximadamente 3°Brix de diferença em relação aos dados da planta. Os maiores desvios observados se encontram na região destacada na Figura 5.36 e também, em menor extensão, em torno do tempo 3630 minutos. A razão de tais resultados deve ser discutida levando-se em conta a qualidade dos dados de entrada e de saída referentes este último dia que foi utilizado na validação da rede.

A Figura 5.37 ajuda a elucidar as razões de tal comportamento. Nela estão representados os perfis das variáveis NN_7, NN_10 e NN_11 presentes na Base 01, que foram utilizadas como entrada da rede. As grandezas das variáveis não são mostradas pois, mais que seu valor absoluto, é importante notar o comportamento qualitativo das mesmas. Os valores indicados pela seta no gráfico da variável NN_7 parecem ser a causa dos desvios ocorridos na região demarcada na figura anterior. Por sua vez, os valores apontados nos gráficos de NN_10 e NN_11 indicam a provável causa dos erros que ocorreram em torno do tempo 3630 minutos. O motivo do impacto destes valores nas predições é o fato de existirem poucos pontos de mesma grandeza nos dados de treinamento, de modo que a rede não adquire uma boa capacidade para fazer estimativas quando valores similares estão presentes nos dados de entrada.

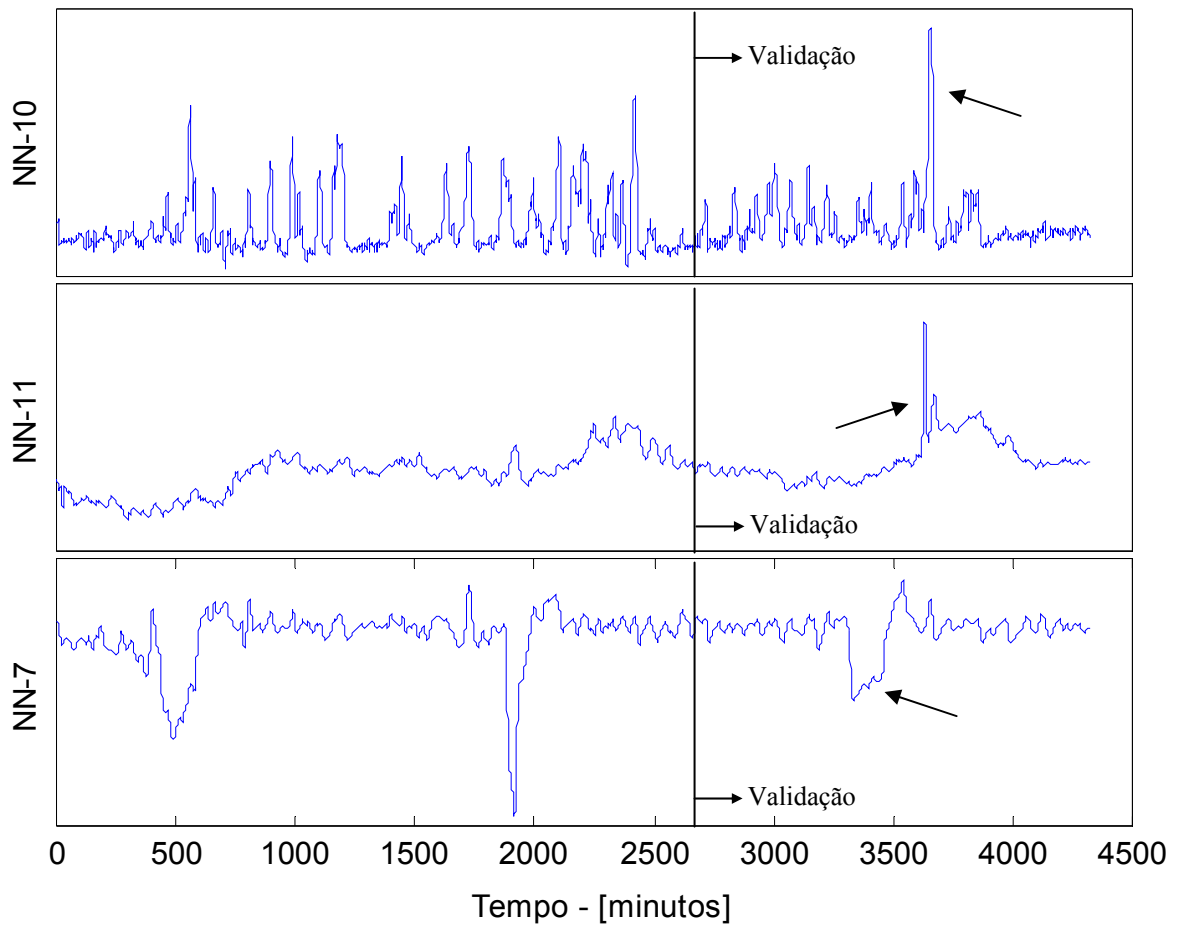


Figura 5.37: Perfis das variáveis NN_7, NN_10 e NN_11, presentes na Base 01.

A discussão anterior pode ser estendida para os resultados da Base 02 - Figura 5.38, mas, neste caso, o desvio das estimativas não foi muito pronunciado. O motivo provável para sua ocorrência não foi a existência de picos nos valores de entrada, mas sim a mudança de patamar das variáveis NN_4 e NN_5, mostrada na Figura 5.39.

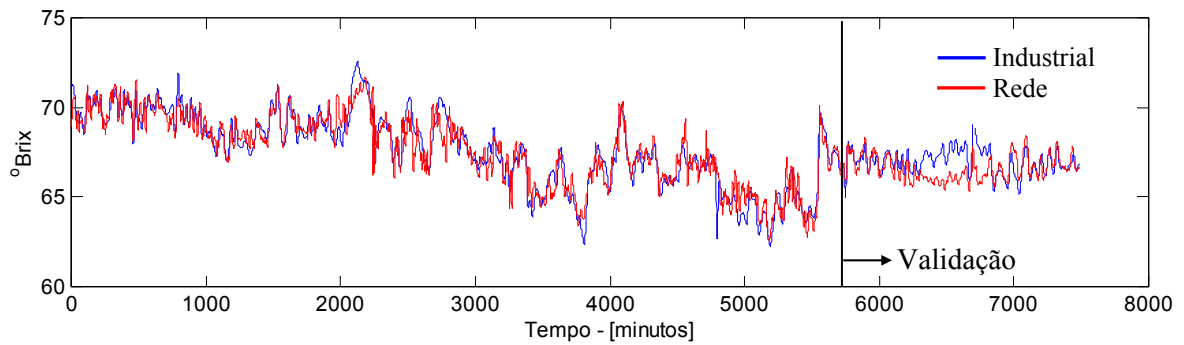


Figura 5.38: Estimativas de $Brx_{(3)}$ geradas por uma rede 11-15-1 *tansig-tansig* para as etapas de treinamento e validação da rede neural para dados da Base 02.

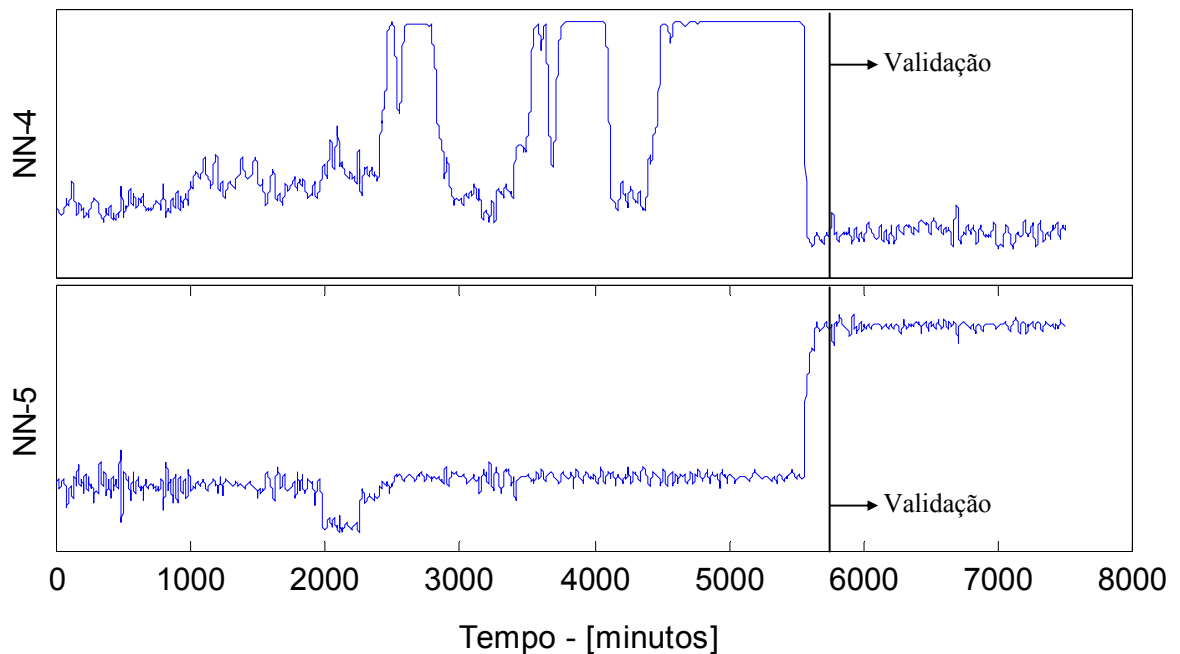


Figura 5.39: Perfis das variáveis NN_4 e NN_5, presentes na Base 02.

Os comentários feitos anteriormente chamam atenção para uma característica indesejada das redes treinadas: grande dependência em relação à qualidade dos dados de entrada. Isto significa que mesmo que se chegue a uma rede capaz de gerar boas estimativas durante vários dias de processo, ela ainda estará vulnerável à falha ou má medição de algum sensor que alimente uma de suas entradas e, por sua vez, terá seu desempenho comprometido, podendo levar até a estimativas sem nenhum significado físico. Neste sentido, os modelos fenomenológicos se mostram mais robustos, pois na falta de um sinal de entrada é possível utilizar o valor médio desta variável. Obviamente os resultados não apresentarão a mesma qualidade, porém, devido às equações de balanço, estes provavelmente ainda se encontrarão dentro de faixas plausíveis.

Neste ponto, torna-se interessante discutir a dificuldade de, apenas com os dados do sistema supervisorio, compreender o que aconteceu durante o processo industrial que fez com que o sistema se comportasse de certa forma, principalmente devido ao grande número de variáveis e das complexas inter-relações entre elas. Muitas hipóteses podem ser levantadas - quebra de algum equipamento, troca de turno, intervenção do operador em uma válvula, troca de linha, etc, mas o conhecimento real das causas só é possível se houver um acompanhamento intenso do processo no local. Como esta não é a situação que se apresenta, o melhor que pode ser feito é separar comportamentos muito anômalos das Bases e explicitar as faixas de validade das estimativas das redes.

Uma vez que as redes eram treinadas com valores de tempos anteriores, vislumbrou-se a possibilidade de utilizá-las na inferência da concentração do último efeito para tempos futuros. No entanto, esta possibilidade não foi estudada plenamente e poucas redes foram treinadas com este objetivo. As Figuras 5.40 e 5.41, a seguir, mostram as estimativas de uma rede (11-15-1 *tansig-tansig*) na etapa de validação para as Bases 01 e 02, respectivamente. Estas se referem à estimativa da rede para o valor de Brix a dez minutos a frente do tempo atual.

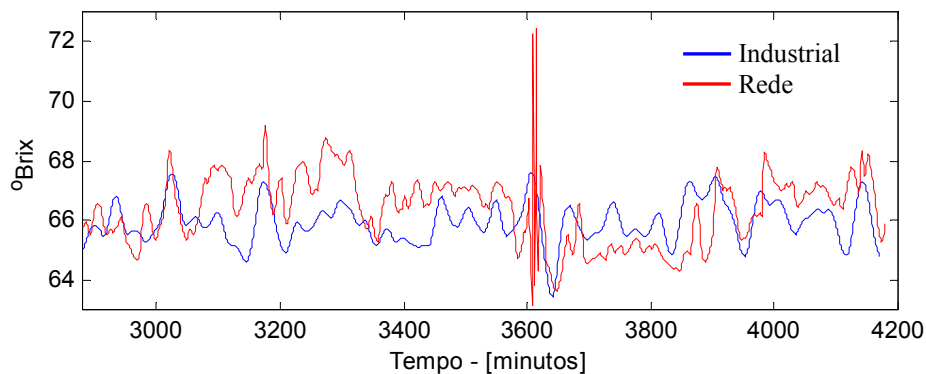


Figura 5.40: Estimativas do $Brix_{(3)}$ para 10 minutos a frente do tempo atual, utilizando-se uma rede (11-15-1 *tansig-tansig*) na etapa de validação para as Bases 01.

Vale observar que o resultado anômalo que ocorre por volta do minuto 3600 é devido ao comportamento das variáveis de entrada já mostrado na Figura 5.37.

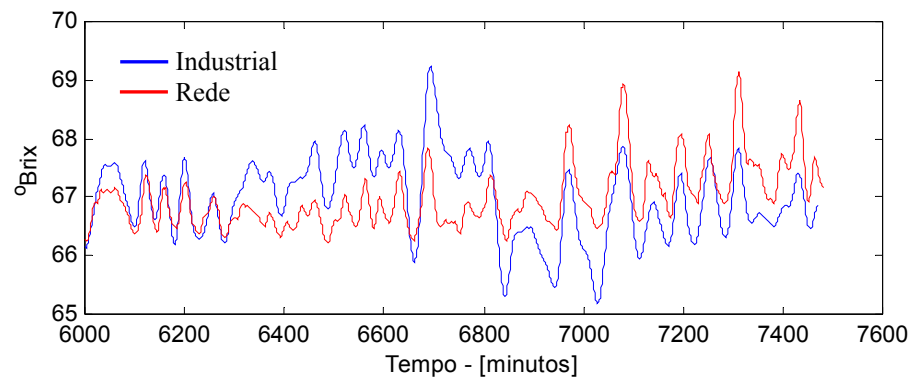


Figura 5.41: Estimativas do $Brx_{(3)}$ para 10 minutos a frente do tempo atual, utilizando-se uma rede (11-15-1 *tansig-tansig*) na etapa de validação para as Bases 02.

Pode-se notar que a qualidade da previsão é comparável àquela das redes discutidas até o momento, o que pode facilitar o monitoramento do processo por parte dos operadores, levantando ainda muitas possibilidades de aplicação, sobretudo na área de controle de processos.

Além dos resultados mostrados foram realizados outros testes que buscaram cobrir as várias possibilidades de configuração de redes neurais. Foram treinadas redes que utilizavam uma série dos dados anteriores das variáveis de entrada (até seis valores defasados do atual), porém, devido ao elevado número de pesos a serem ajustados, o tempo de processamento tornou proibitiva a busca de maiores variações na topologia destas redes. Houve tentativas de utilização de redes recorrentes, que realimentavam como entrada o valor estimado, mas a convergência dos pesos na fase de treinamento era lenta e os resultados gerados não satisfatórios.

5.7. Conclusões da Etapa de Evaporação

Foram apresentadas neste capítulo as abordagens utilizadas na modelagem da etapa de evaporação da Usina Santa Adélia, de modo a tornar possível a inferência das variáveis de estado do processo.

Após a caracterização do ambiente e dos equipamentos presentes no setor de evaporação da usina, o primeiro passo para o desenvolvimento do estudo proposto neste trabalho foi a obtenção dos dados que seriam utilizados pelos modelos matemáticos. Para tanto, foi desenvolvido um software que decodificava os arquivos de histórico do

processo gravados pelo sistema supervisor da planta. A amostragem do processo industrial, por sua vez, se mostrou útil na estimativa inicial de parâmetros, como o coeficiente de troca térmica, e na verificação das faixas normais de operação.

Em relação ao desenvolvimento dos modelos, a primeira abordagem foi gerar o modelo do estado estacionário do EME. Este modelo, apesar de ter utilizado todas as informações disponíveis no processo para sua resolução, foi capaz de gerar estimativas das vazões e concentrações dos efeitos intermediários dentro das faixas usuais, o que é bastante animador tendo-se em vista as várias considerações simplificadoras assumidas.

Um dos resultados relevantes foi a indicação de que aproximadamente 73% da quantidade de vapor que é gerada nos pré- evaporadores é sangrada do EME para a fábrica.

Incorporando o modelo estacionário, foi desenvolvida uma interface gráfica que representava esquematicamente o equipamento industrial e que podia apresentar os dados da usina em forma de gráficos.

O modelo dinâmico desenvolvido logo em seguida gerou boas estimativas do Brix da última caixa, além de permitir que todas as propriedades das correntes do processo fossem calculadas.

Por fim, foram testadas várias configurações de redes neurais na tentativa de se gerar um *software* sensor da concentração do terceiro efeito. Os resultados obtidos foram encorajadores e apontam as redes neurais como uma boa alternativa na inferência de variáveis do processo de produção de açúcar. Durante o desenvolvimento das redes ficou clara a importância da qualidade e da representatividade das variáveis do processo.

5.8. Sugestões para Trabalhos Futuros na Área de Evaporação

Tendo-se em vista as dificuldades encontradas neste trabalho para o desenvolvimento dos modelos do EME, e analisando-se os resultados obtidos, crê-se que os seguintes tópicos mereceriam ser abordados em trabalhos futuros:

- Desenvolvimento de um estudo descritivo do comportamento do coeficiente de troca térmica para os evaporadores, dada a sua importância nas equações de balanço;
- Implementação dos modelos no ambiente industrial visando a simulação *on-line* e o controle do processo;
- Utilização de redes neurais adaptativas na inferência das concentrações do EME;
- Desenvolvimento de modelos híbridos (“princípios fundamentais”/Redes Neurais) visando a utilização das melhores características de cada técnica;
- Estudos sobre a utilização das redes neurais em conjunto com técnicas de controle preditivo;
- Desenvolvimento de estratégias de detecção de falhas ou de deterioração do sinal de sensores por meio de comparação com estimativas geradas por modelos;e
- Utilização de técnicas de otimização da topologia das redes, por exemplo, OBS (*Optimal Brain Surgeon*) e o OBD (*Optimal Brain Damage*). Estas técnicas reduzem a complexidade das redes neurais eliminando os pesos menos importantes e substituem a abordagem de tentativas e erros automatizando a busca das melhores configurações das redes neurais.

6. ETAPA DE CRISTALIZAÇÃO

Um dos principais objetivos nesta etapa do trabalho foi investigar as diferentes etapas de operação de um cristalizador, de modo a gerar um modelo capaz de, utilizando dados reais coletados do sistema supervisorio da Usina São Martinho, gerar estimativas das variáveis de estado do equipamento condizentes com os valores obtidos na indústria. Por exemplo, a evolução do diâmetro médio dos cristais e a concentração de sacarose durante o decorrer da cristalização.

6.1. Descrição das Condições na Planta Industrial da Usina São Martinho

A execução da *fase de diagnóstico* do setor de cristalização foi realizada através de visitas à usina que possibilitaram o levantamento das características físicas dos equipamentos e a descrição do processo.

A Usina São Martinho está equipada para trabalhar com o método de esgotamento de *três massas*, isto é, o xarope dos evaporadores é processado por meio de bateladas e ciclos em três diferentes tipos de cristalizadores (A, B e C) de modo a se obter, além de cristais de açúcar, um mel final com a menor pureza economicamente viável. Na planta industrial são encontrados 14 cristalizadores do tipo evaporativo de calandra operando em batelada, sendo 6 de massa A, 5 de massa B e 3 de massa C. Estes equipamentos apresentam dimensões similares dentro de cada grupo. A Figura 6.1 mostra cinco dos seis cristalizadores de massa A. Cada um destes produz, aproximadamente, 40000 quilos de açúcar por batelada (800 sacos de 50kg). Em safras anteriores, foram instalados impelidores (agitadores) em alguns dos cristalizadores na tentativa de melhorar a movimentação da massa dentro dos equipamentos, porém, segundo os operadores, estes foram posteriormente removidos em consequência do alto consumo de energia e também por não terem proporcionado a melhoria esperada em relação ao tempo de batelada e a qualidade dos cristais.



Figura 6.1: Cristalizadores de massa A - Setor de Cristalização da Usina São Martinho.

As principais variáveis acompanhadas através do sistema supervisório da usina ao longo da batelada são o nível, a temperatura, a pressão e a condutividade da massa. Diferentemente dos demais equipamentos, o cristalizador 10 conta com um sensor de concentração (Brix), do tipo radiofrequência, ao invés do sensor de condutividade.

Os cristalizadores de massa A são carregados com o magma proveniente dos cristalizadores B. Depois de bateladas que duram aproximadamente uma hora e meia são gerados cristais com diâmetro médio (AM) de 0,7mm e coeficiente de variação (CV) de 30%. Os cristalizadores de massa B são operados de forma semelhante, porém são carregados inicialmente com o material do cristizador de granagem e alimentados com o mel proveniente dos cristalizadores A.

A cada turno pelo menos um cristalizador de cada tipo é submetido a um processo de limpeza com água aquecida por uma corrente de vapor. Esta limpeza branda se deve ao fato das incrustações, nesses equipamentos, ocorrerem em escala bem menor do que aquela observada nos evaporadores, principalmente em função da abrasão dos cristais sobre os depósitos minerais que porventura se formem.

Um fato observado é que todas as bateladas são acompanhadas e controladas, em alguma extensão, por um conjunto de controladores lógicos

programáveis (CLPs) e supervisionadas por computadores. A sala de controle do setor de cristalização está localizada ao lado dos equipamentos. O ponto positivo desta proximidade do processo é a rapidez com que certas atitudes podem ser tomadas pelos operadores. Nessa sala, trabalham os três grupos de operadores que se revezam nos turnos da fábrica. O acompanhamento do processo se dá por meio de dois computadores supervisórios que apresentam telas com a representação do processo. O primeiro fica dedicado aos cristalizadores de massa A e o segundo aos demais.

A presença dos operadores ao lado dos equipamentos é requerida apenas esporadicamente, uma vez que estes podem seguir o andamento das bateladas da sala de controle através dos sensores disponíveis. Outro ponto interessante foi a constatação de que a experiência dos operadores desta usina foi compilada ao longo dos anos em um guia de procedimentos que descreve os passos associados à operação de cada equipamento e às ações recomendadas para certas situações. Outro fruto desta sistematização foi a estratégia de controle dos equipamentos, implementada seguindo as recomendações e os parâmetros de processos fornecidos pelos operadores.

É comum nas usinas que operam a unidade de cristalização de forma manual se determinar o ponto de supersaturação apropriado para a semeadura através do acompanhamento do aumento da viscosidade da massa por meio da observação da velocidade com que as gotas do xarope escorrem pelo vidro do visor na parede do cozedor ou medindo-se a distância necessária para romper a continuidade de uma pequena quantidade de material esticada entre o dedo polegar e o indicador, dito ponto de fio. A manipulação das válvulas de alimentação de sementes, do xarope, da água e do vapor de modo a atingir os objetivos relacionados com a batelada também são atividades realizadas pelos operadores. No caso da Usina São Martinho, a programação que se encontra no CLP e controla a operação dos cristalizadores incorpora o conhecimento adquirido pelos operadores com base em vários parâmetros que já se mostraram efetivos ao longo do tempo.

As principais malhas de controle presentes nos cristalizadores são a de controle da pressão, através da manipulação da válvula de admissão de água no multijato, e a de controle da condutividade, ou de Brix no caso do cristalizador 10, que se dá através da manipulação da vazão de alimentação. O *setpoint* de condutividade varia linearmente com o nível da massa ao longo da batelada, seguindo uma rampa previamente definida. Apesar dos valores predefinidos poderem ser modificados pelos operadores, esta atitude não é usual dada a relativa estabilidade do processo.

Levando-se em conta apenas os dois *loops* de controle que se encontram nos cristalizadores, poder-se-ia deduzir que a operação destes é simples. Porém, a complexidade reside na forma com que se dá a alimentação de xarope e no modo com que vários parâmetros não medidos são monitorados pelos operadores de modo a gerar cristais bem formados e com as características desejadas. Dentre as variáveis não medidas estão a viscosidade da massa, que influencia a movimentação da massa, o crescimento dos cristais e a transferência de calor.

Uma vez que a operação dos cristalizadores se apresenta razoavelmente automatizada, o papel dos operadores é mais voltado ao planejamento da produção e ao gerenciamento das contingências que são impostas pelo processo, isto é, os operadores decidem com quais cristalizadores irão operar em determinado momento, estipulam qual o tempo de espera entre as bateladas e administram situações de escassez momentânea de xarope como também de quebra e manutenção de equipamentos.

Uma prática usual durante a operação de cristalização é o “corte da massa”, que consiste na divisão da massa cozida de um cristalizador cheio para outros dois ou mais nos quais a batelada terá prosseguimento. O objetivo é proporcionar um maior tempo de crescimento aos cristais, para que estes possam atingir um tamanho mais uniforme. Um exemplo desta prática ocorre com o material gerado no cristalizador de granagem que, por meio de cortes sucessivos, passa por oito bateladas nos cristalizadores de massa B. Um fato associado a esta prática é que não se pode garantir a constância das condições iniciais e finais dos equipamentos, que em um momento podem iniciar a batelada com cristais pequenos e em outro com cristais já mais crescidos. Esta situação poderia representar um problema no desenvolvimento deste trabalho, pois as condições iniciais dos equipamentos são críticas na resolução e nos resultados dos modelos.

Para tornar possível a utilização do modelo do cristalizador este sofreu ajustes de modo a se adaptar às condições encontradas na usina. Porém, a escolha adequada do equipamento no qual se basearia o modelo poderia reduzir o número e a extensão de tais ajustes. A seguir serão descritos os pontos que foram analisados para esta escolha.

Não pertencia ao escopo deste trabalho modelar toda a etapa de cristalização, isto é, englobar no equacionamento os tanque de armazenamento, as centrífugas, dentre outros. Além da grande dificuldade envolvida no levantamento de todas as informações que seriam necessárias, grande parte da operação destes equipamentos está relacionada

com uma estratégia de controle e adequação às restrições diárias que muitas vezes é ditada pelos próprios operadores da planta industrial. Visando o desenvolvimento de um modelo que aumentasse o entendimento da dinâmica da cristalização e tivesse a possibilidade de ser implementado utilizando as informações disponíveis na usina, decidiu-se que apenas um tipo de cristalizador seria acompanhado.

Inicialmente, os dados dos cristalizadores de massa A foram escolhidos para serem utilizados como entrada do modelo e, após o acompanhamento de diversas bateladas, uma descrição detalhada de sua operação foi obtida. A análise deste material mostrou que a implementação do modelo nestes equipamentos seria difícil, principalmente por questões relacionadas a incertezas na composição do material com o qual se iniciava a operação (magma proveniente dos cristalizadores de massa B) e a falta de medição direta da concentração da massa ao longo das bateladas; havia apenas o sinal da condutividade.

Frente aos problemas detectados, as atenções voltaram-se para o cristalizador 10. Este cristalizador é estruturalmente igual aos cristalizadores de massa B, mas nele ocorre a granagem, ou seja, a elevação da concentração da solução até a zona metaestável e, atingida esta zona, a introdução de uma certa quantidade de cristais de açúcar (sementes) que crescerão até o tamanho desejado. Estes cristais são os primeiros a surgir dentro do processo de cristalização e são estes que aumentam de tamanho ao longo do processo, quando processados nos cristalizadores A e B.

As vantagens da utilização deste equipamento como objeto de estudo deste trabalho serão detalhadas a seguir:

- (a) - Como foi citado anteriormente, é neste equipamento que o processo de cristalização se inicia e por este motivo há uma especial preocupação, por parte dos operadores, para que suas condições de trabalho estejam sempre dentro dos padrões. Além disso, ele é o único a apresentar um medidor de concentração (Brix) e uma operação preparada para a semeadura da massa;
- (b) - Sua operação se dá de modo mais reprodutível que a dos demais, principalmente por dois motivos: (1) é alimentado apenas com xarope, fato que não ocorre com os cristalizadores A e B, que são alimentados com xarope, magma e mel, e (2) não recebe o “corte” de outro cristalizador, ou seja, a batelada não é iniciada com parte da massa desviada de um outro cristalizador. Este último ponto também contribui para que ele seja o cristalizador que menos necessita de intervenção dos operadores, ficando apenas sob a supervisão do sistema automático de controle;

- (c) - A batelada é iniciada mediante o preenchimento do equipamento com xarope e, depois deste ter sido convenientemente concentrado, faz-se a semeadura: quando o sistema de supervisão indica o momento propício, insere-se na massa um volume fixo de uma suspensão alcoólica saturada contendo pequenos cristais de açúcar (sementes), previamente preparada no laboratório da usina. Nos outros cristalizadores, o início da batelada se dá com estes sendo carregados com magma. Este fato faz com que as condições iniciais relativas às características físicas dos cristais (principalmente tamanho médio, grau de aglomeração e percentagem de cristais), à pureza do magma e ao volume inicial fiquem muito dependentes da seqüência anterior de bateladas;
- (d) - Por fim, o equipamento apresenta vantagens que facilitam o acompanhamento de sua operação por meio de amostras: (1) possui uma pia com água, luz e espaço físico para alojar a centrífuga de cesto que auxiliou na coleta de amostras; (2) nas suas proximidades é encontrado um ponto de energia com voltagem adequada e um balcão onde as amostras coletadas ao longo do tempo puderam ser alojadas e, (3) a retirada de amostras pode se dar em dois pontos, um na sua parte inferior (por meio de uma “garrafa de amostragem”) e outro na sua parte frontal (por meio de uma sonda). A Figura 6.2 mostra alguns dos pontos citados:



Figura 6.2: Detalhes do ambiente de trabalho: (a) Garrafa de amostragem, (b) Parte frontal do cristalizador 10 e (c) Balcão utilizado para alocação das amostras coletadas.

A Figura 6.3 mostra uma representação esquemática do cristalizador 10 e a Tabela 6.1 lista suas características físicas.

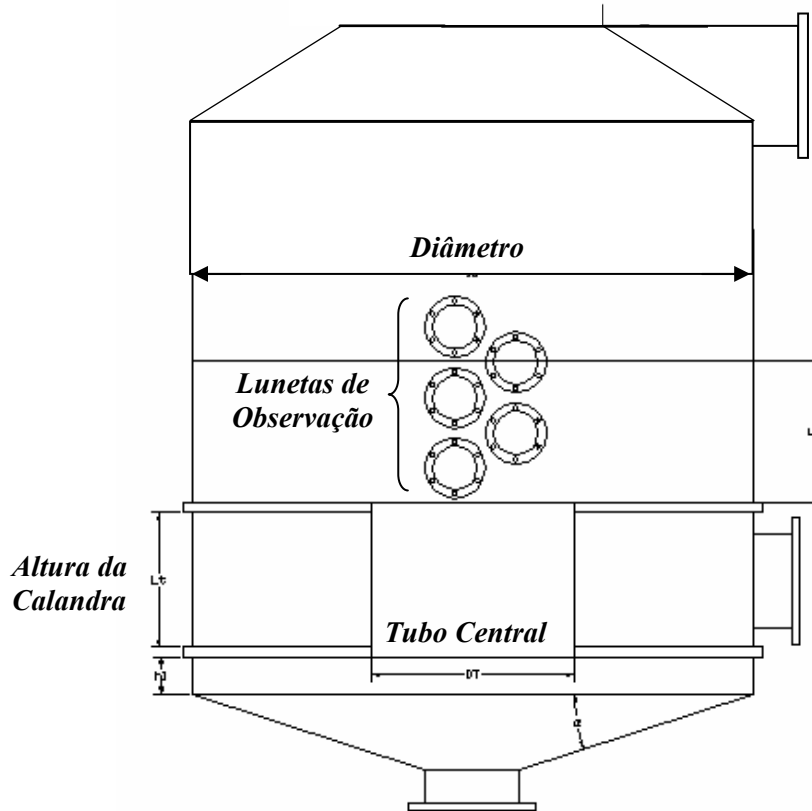


Figura 6.3: Representação esquemática do cristalizador 10.

O cristalizador 10, assim como os demais cristalizadores, apresenta duas importantes malhas de controle: uma para a pressão de vácuo e outra responsável pelo controle da concentração da massa cozida.

Tabela 6.1: Medidas das principais características dos cristalizadores da Usina São Martinho.

Característica	Valor	Característica	Valor
Diâmetro	5,69 m	Diâmetro Interno dos Tubos	111,10 mm
Volume Total (tabela da usina)	63,26 m ³	Comprimento dos Tubos	905,00 mm
Volume da Calandra	14,31 m ³	Comprimento Útil dos Tubos	890,00 mm
Volume Abaixo da Calandra	8,43 m ³	Diâmetro do Tubo Central	2,54 m
Número de Tubos na Calandra	1.128	Superfície de Aquecimento Total	350,38 m ²
Diâmetro Externo dos Tubos	114,30 mm	Sistema de Separação de Arraste	Labirinto

A Tabela 6.2 apresenta os valores médios de alguns parâmetros da operação do cristizador 10 (cristalizador de granagem).

Tabela 6.2: Valores de importantes parâmetros usuais de operação.

Parâmetro de Operação	Valor
Tempo de Processamento	120-200 minutos
Pressão de Trabalho	22-25 polHg(vac man)
Brix do Xarope de Alimentação	63-70 Brix
Diâmetro Médio do Cristal (AM)	0,3-0,45 mm
Coefficiente de Variação (CV)	< 35%
Brix Total da Massa no Final da Batelada	86-89°Brix (Total)
Pureza da Massa	> 79%
Produção por Batelada	~40 toneladas

Na Figura 6.4, que representa a tela de processo disponível para os operadores; encontram-se destacadas as variáveis que de alguma forma estão relacionadas com a operação do cristizador 10.

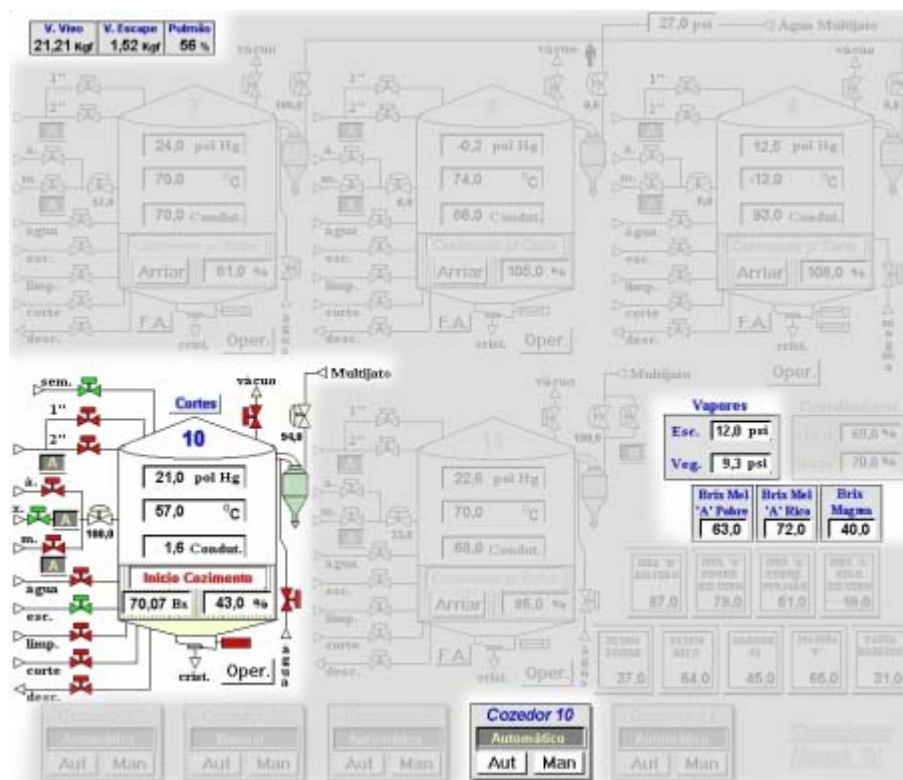


Figura 6.4: Tela de processo representando o monitoramento do cristizador 10.

A Figura 6.4 mostra o grande número de variáveis acompanhadas pelos operadores no setor de cristalização, pois além das propriedades principais, os estados de abertura/fechamento das válvulas também são indicados na tela do processo. Porém,

constatou-se que apenas a pressão, a temperatura, a condutividade (Brix no cristalizador 10) e a percentagem de abertura da válvula de alimentação de cada equipamento são armazenadas nos *arquivos de registro de histórico* do sistema supervisório. Estas quatro variáveis são gravadas na base de dados a cada 30 segundos.

A Usina São Martinho, assim como a Usina Santa Adélia, utiliza o *software* Ifix, da Intellution, como *software* de supervisão. Os testes efetuados nos arquivos da usina mostraram que o programa desenvolvido para abrir os arquivos de histórico, comentado na etapa de evaporação, poderia ser utilizado sem maiores modificações. A Figura 6.5, mostrada a seguir, apresenta os dados de pressão, nível e Brix de um dia de operação do cristalizador 10, decodificados utilizando o programa desenvolvido pelo pesquisador.

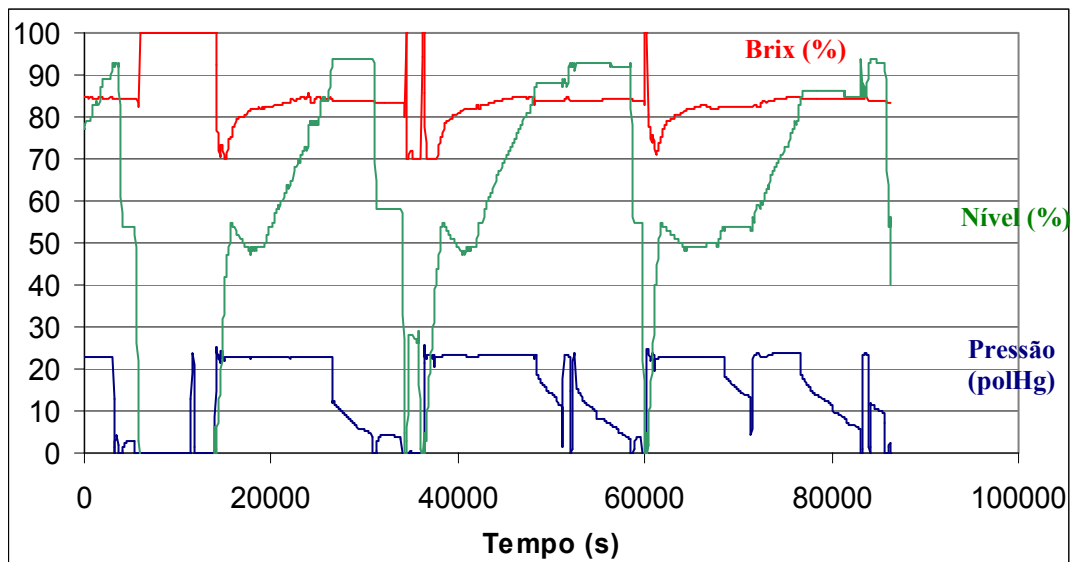


Figura 6.5: Representação gráfica dos dados de Brix, nível e pressão obtidos em um dia de operação do cristalizador 10.

Para que o pesquisador pudesse reproduzir e visualizar nos computadores da universidade toda a operação do cristalizador 10, o setor de Informática da Usina São Martinho criou, no sistema supervisório, um novo grupo de variáveis englobando todas as válvulas e medidas indicadas na Figura 6.4. Desta forma, ao invés de quatro agora seriam aproximadamente 28 variáveis relacionadas com a operação do equipamento. Neste novo conjunto se encontravam, dentre outras, variáveis que indicavam o *status* de abertura das válvulas, a pressão do vapor vegetal e a posição das válvulas de controle.

6.2. Materiais e Métodos

Além das informações oriundas do sistema supervisor, o modelo necessita de dados que só podem ser obtidos através da amostragem direta do equipamento industrial. As propriedades medidas servem como dados de entrada para o modelo matemático ou são usadas para validação dos resultados gerados.

6.2.1. Pontos de Amostragem

As análises realizadas pelo laboratório da usina no setor de cristalização enfocam principalmente as características do material no final das bateladas, em especial dos cristalizadores de primeira. São analisados rotineiramente o Brix e o Pol (percentagem mássica de sacarose) do xarope de alimentação (na caixa de xarope), da massa dos cristalizadores A e B e a granulometria do açúcar (após a etapa de secagem). A frequência com que são realizadas estas análises, para os propósitos deste estudo, é baixa, pois são efetuadas apenas uma vez por turno e, normalmente, com o material de apenas um cristalizador de cada tipo. A determinação da fração mássica de cristais na massa cozida dos cristalizadores é realizada esporadicamente para confirmar se os parâmetros que auxiliam na condução das bateladas se encontram adequados para o material que está sendo processado pela usina e para checar o bom andamento das bateladas.

O laboratório também é responsável pela produção das sementes que são utilizadas na semeadura do cristalizador de granagem. A produção de tais sementes se dá com a moagem de cristais de açúcar, na proporção de quatro quilos de açúcar dispersos em oito litros de álcool anidro, em um moinho de bolas por aproximadamente dez horas. Não são realizadas análises rotineiras na dispersão resultante e, desta forma, os laboratoristas não puderam informar qual o tamanho médio das sementes utilizadas nos dias que o pesquisador acompanhou o processo. Diante disto, foram realizados testes no laboratório de cristalização do DEQ/UFSCar e os resultados obtidos serão mostrados mais adiante.

Após a análise do processo e das necessidades do modelo, foram escolhidos quais seriam os pontos de amostragem do material, o tipo de amostra a ser coletada e as

propriedades a serem medidas ou determinadas. A Tabela 6.3 mostra os pontos escolhidos.

Tabela 6.3: Indicação dos pontos de amostragem, tipo de amostra a ser coletada e algumas propriedades a serem medidas de acordo com as necessidades do modelo.

Ponto de Amostragem	Amostra	Propriedade Medida
Tanque de Xarope dos Cristalizadores	1-Xarope	Temperatura*, Brix, Pol e Densidade**
Cristalizador	2-Massa (mel+cristais)	Temperatura*, Brix e Pol
	3-Mel	Brix e Pol
	4-Cristais	Granulometria

* A temperatura parou de ser medida após algumas amostras por restrição no tempo.

** Teve sua determinação interrompida por concordar bem com a equação de estimativa de densidade.

A determinação do Brix e do Pol das amostras foi realizada utilizando-se o refratômetro (Bellinghan - modelo ADS 220) e o sacarímetro (ATAGO - modelo DBX-55-A) do laboratório da usina, pois esta última análise requeria a clarificação da amostra. O valor do Pol apresentava uma precisão da ordem de $\pm 0,1\%$, porém, no caso da medição do Brix, a metodologia industrial sugeria que a solução fosse diluída dez vezes antes de ter seu valor de concentração lido no refratômetro. Como a leitura tinha uma precisão de $\pm 0,1^\circ\text{Brix}$, o valor da concentração das amostras apresentava uma precisão de $\pm 1^\circ\text{Brix}$. As conseqüências desta prática de diluição serão comentadas na apresentação dos resultados.

6.2.2. Obtenção do Mel e dos Cristais

A coleta de material do interior do cristalizador, que estava sob vácuo, não se mostrou ser uma atividade trivial. Assim, será descrita aqui a metodologia desenvolvida para a obtenção das amostras de mel e cristais a partir de uma certa quantidade da massa cozida retirada do cristalizador 10. Também serão citadas as infrutíferas tentativas executadas durante o processo de consolidação da metodologia por estas informações serem consideradas importantes dentro do escopo deste trabalho.

Separar os cristais de açúcar do mel - líquido escuro, viscoso e saturado de sacarose - seria o primeiro passo para se acompanhar o crescimento dos cristais ao longo da etapa de cristalização. A primeira alternativa para a separação consistiu na filtração da massa cozida sem nenhuma modificação. Foram testados filtros de papel,

tecido e vidro sinterizado acoplados a bombas de vácuo, mas devido a alta viscosidade da massa este tipo de abordagem mostrou-se inadequada. Tentou-se diminuir a viscosidade da massa com o uso de um antiespumante (Surfanol, da Aquatec) e também com detergente comum incolor, saturado com sacarose. Os resultados foram satisfatórios, ou seja, o líquido viscoso e escuro que recobria os cristais foi retirado e os cristais aparentemente não tiveram suas características modificadas pelo processo de separação, porém a quantidade de solução saturada necessária para as lavagens e o tempo de operação da bomba de vácuo levaram este método a ser considerado inviável.

Os primeiros testes utilizando a centrifugação como método de separação se mostraram satisfatórios, mas os oito frascos da centrífuga eram de pequeno volume, aproximadamente 40ml, e o cuidado com o equilíbrio dos frascos requeria muito tempo. Os cristais ficavam bem separados no fundo dos frascos após serem centrifugados por 5 minutos a 5000rpm, mas sua remoção com espátula era difícil, lenta e normalmente incompleta.

A questão da separação dos cristais foi solucionada através da aquisição de uma centrífuga de cesto de uso doméstico (ACME - Waring Products Division of CONAIR Corp., model 11JE21), importada. A Figura 6.6 mostra uma fotografia ilustrativa da centrífuga utilizada e suas partes constitutivas.



Figura 6.6: Centrífuga de cesto e suas partes constitutivas.

A centrífuga possui um cesto de aço-inox cuja parede é preenchida por pequenos orifícios. Para a separação dos sólidos, são utilizados filtros de papel que são encaixados no interior do cesto. Quando em funcionamento, este atinge a rotação máxima de 3400rpm. Para os testes de separação foram utilizadas amostras das massas dos cristalizadores da Usina São Martinho. Para checar se pequenos cristais estariam passando pelo filtro de papel, o pesquisador fez com que o mel obtido fosse centrifugado em uma centrífuga de tubos. O material sólido recolhido após 5 minutos de centrifugação a 5000rpm representava menos de 0,6% da massa do mel.

Para a obtenção do mel, o cesto munido do filtro era preenchido com aproximadamente 300ml de massa. A centrifugação era iniciada com a tampa de segurança e continuava até que uma quantidade razoável (70-100ml) de mel tivesse sido obtida. Mesmo após a centrifugação, os cristais dentro do cesto ainda apresentavam uma pequena quantidade de mel em sua superfície.

Para a obtenção dos cristais era necessário misturar uma quantidade adequada de massa (~200ml) com aproximadamente 100ml de uma solução aquosa saturada de açúcar. Este procedimento diminuía a viscosidade da amostra e facilitava a remoção da película de mel, sem dissolver os cristais. Neste caso, a operação da centrífuga era conduzida sem a tampa de segurança, isto é, o cesto girava exposto. O motivo de tal procedimento era a necessidade de se introduzir a amostra lentamente com auxílio de um béquero e também, de se lavar os cristais borrifando sobre eles, ainda com o cesto em rotação, primeiramente uma solução aquosa de açúcar seguida de uma solução alcoólica saturada. A retirada dos cristais do interior do cesto era efetuado com o uso de uma espátula plástica.

Após a realização das primeiras coletas, observou-se que os cristais deveriam ser retirados da centrífuga dentro de um período de poucos minutos após a centrifugação, caso contrário, favorecer-se-ia a formação de um “bloco” compacto de cristais aglomerados. Para que as operações descritas ocorressem com maior agilidade no ambiente da usina, um cesto sobressalente para a centrífuga foi construído. Desta forma, o processo de amostragem foi otimizado, pois evitava que o mesmo cesto tivesse que ser lavado e preparado com o filtro antes de cada uma das separações de mel e cristais.

6.2.3. Análise Granulométrica dos Cristais

Uma vez solucionado o modo como os cristais seriam obtidos o passo seguinte foi definir como estes seriam conservados, visto que durante a amostragem do cristalizador industrial não seria possível iniciar o processo de análise de cada amostra logo depois de coletada. Após a realização de experimentos visando estimar o efeito da armazenagem dos cristais, foi constatado que a forma adequada para armazenar-los logo após a coleta, sem que as suas características granulométricas fossem afetadas, foi conservá-los em um frasco hermético preenchido com uma solução alcoólica saturada de sacarose. Testes mostraram que os cristais armazenados desta maneira podiam manter suas características granulométricas inalteradas por pelo menos dois meses.

A determinação da granulometria dos cristais foi estudada e chegou-se a conclusão que o método normalmente utilizado na usina - secar o açúcar exposto ao ambiente ou em estufa e peneirá-lo - não era adequado para os objetivos deste trabalho. Dentre os motivos que levaram a esta conclusão estão o tempo necessário para se analisar uma amostra, a comprovada aglomeração que ocorria com os cristais menores durante a secagem e a quantidade necessária de cristais para o peneiramento.

Para evitar a necessidade de secar os cristais houve tentativas de se utilizar o processamento de imagens na determinação da distribuição granulométrica. Tal idéia, no setor sucroalcooleiro, não é nova e muitos estudos foram feitos no sentido de gerar uma ferramenta de grande aceitação (Mhlongo e Alport, 2002), porém as tentativas de se lidar com imagens como a retratada na Figura 6.7, também no caso deste trabalho, se mostraram muito trabalhosas. Os motivos para este fato recaem na difícil distinção entre os cristais transparentes e o fundo da imagem, na ampla faixa de diâmetros que deveria ser analisada e no extenso período de desenvolvimento e testes que seria necessário para obter o *software* de processamento de imagens capaz de avaliar as imagens e retornar as características físicas dos cristais.

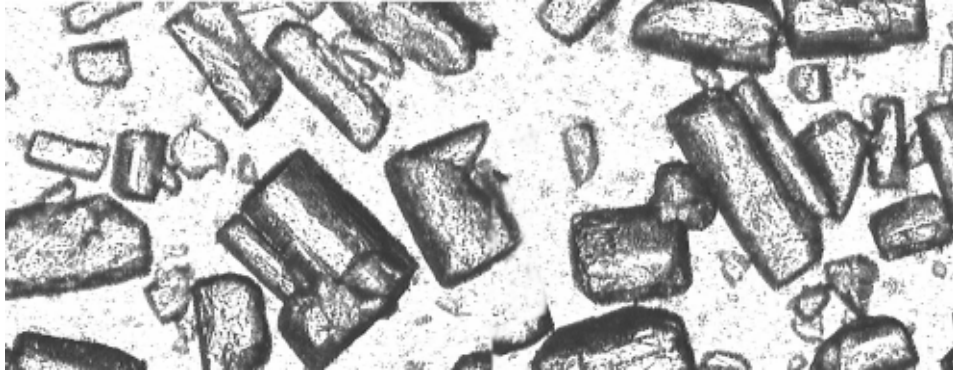


Figura 6.7: Imagem de cristais de açúcar adquirida com uma câmera acoplada a um microscópio.

Por fim, um analisador de partículas Mastersizer $\mu+$, da Malvern Instruments, foi utilizado para determinar a distribuição do tamanho de cristais (DTC) das amostras. O princípio de funcionamento utilizado pelo equipamento consiste no espalhamento de um feixe *laser* pelos cristais. Esta técnica de medição de tamanhos é extremamente flexível e, em princípio, impõe como restrição somente que o meio seja transparente para o comprimento de onda do laser e que o índice de refração das partículas e do meio em que estas se encontram dispersas sejam diferentes. Internamente, o equipamento se vale de uma configuração de lentes que faz com que o padrão de difração das partículas de tamanho L se mantenha estacionário e focado a uma distância $r(L)$ do centro do detector, independentemente do movimento das partículas, da posição destas dentro do feixe laser ou da distância que se encontrem das lentes. Cálculos envolvendo a intensidade do padrão de difração e sua distância $r(L)$ geram a estimativa da presença relativa de um grupo de partículas com diâmetro L dentro da amostra.

Algumas das vantagens dessa abordagem são: (a) reprodutibilidade e rapidez das análises - de um a dois minutos; (b) a quantidade de material necessária é mínima, apenas alguns gramas de cristais; (c) possibilidade de análise da distribuição granulométrica das sementes utilizadas nos cristalizadores; (d) os resultados gerados podem ser imediatamente analisados no computador acoplado ao equipamento; (e) não é necessária a secagem dos cristais, uma vez que no analisador o meio utilizado para sua dispersão é álcool anidro saturado de sacarose, e (f) o equipamento se encontrava disponível no Laboratório de Cristalização do DEQ/UFSCar.

O tipo básico do resultado gerado pela técnica de difração laser é uma DTC baseada no volume de partículas, ou seja, a proporção do volume de cada classe de

tamanhos no volume total das partículas. Os cálculos de determinação dos parâmetros de caracterização da distribuição são baseados no volume das partículas. Todas as outras representações – número, comprimento e área por diâmetro – são derivadas da distribuição de volume por diâmetro equivalente de uma esfera.

De modo geral, depois da DTC baseada no volume o outro tipo de distribuição mais utilizada é a baseada no número, isto é, a quantidade analisada é a proporção do número de partículas em cada classe de tamanho em relação ao número total de partículas. Apesar de ser possível transformar matematicamente um tipo de distribuição em outro, é preciso lembrar que tal procedimento pode realçar características indesejadas. Este é o caso onde, por exemplo, um pequeno volume de partículas pequenas se torna parte significativa de uma DTC baseada no número. Se este pequeno volume for apenas ruído ou erro na medida, a sua relevância será aumentada com tal transformação.

A Figura 6.8 mostra a análise feita em duas amostras de cristais recolhidas do cristalizador 10. Uma delas foi recolhida durante a operação e a outra ao final da batelada. Pela análise da figura pode-se notar que o analisador, na configuração atual, mostra uma limitação em relação ao diâmetro da partícula máximo que pode ser analisada, que é de $L=555\mu\text{m}$.

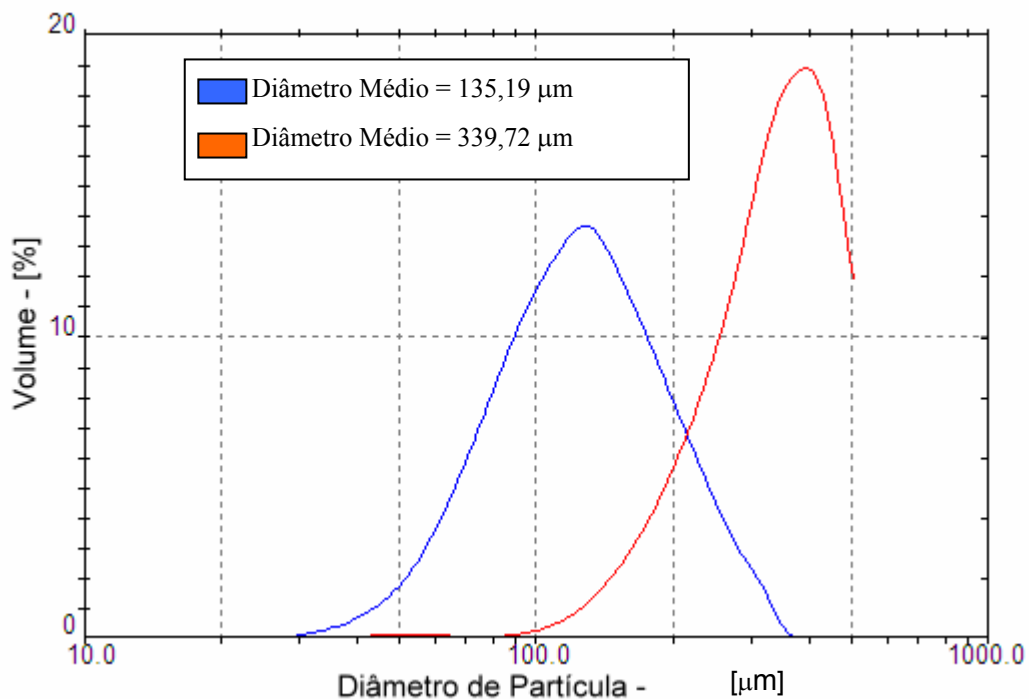


Figura 6.8: Distribuição granulométrica obtida com o analisador de partículas de duas amostras coletadas do cristalizador 10.

A abordagem utilizada para diminuir o impacto desta limitação do equipamento, que podia mascarar os resultados, foi extrapolar as curvas de resposta. A Figura 6.9, apresentada a seguir, mostra como foram extrapoladas as três curvas que claramente possuíam cristais maiores que 555 μm .

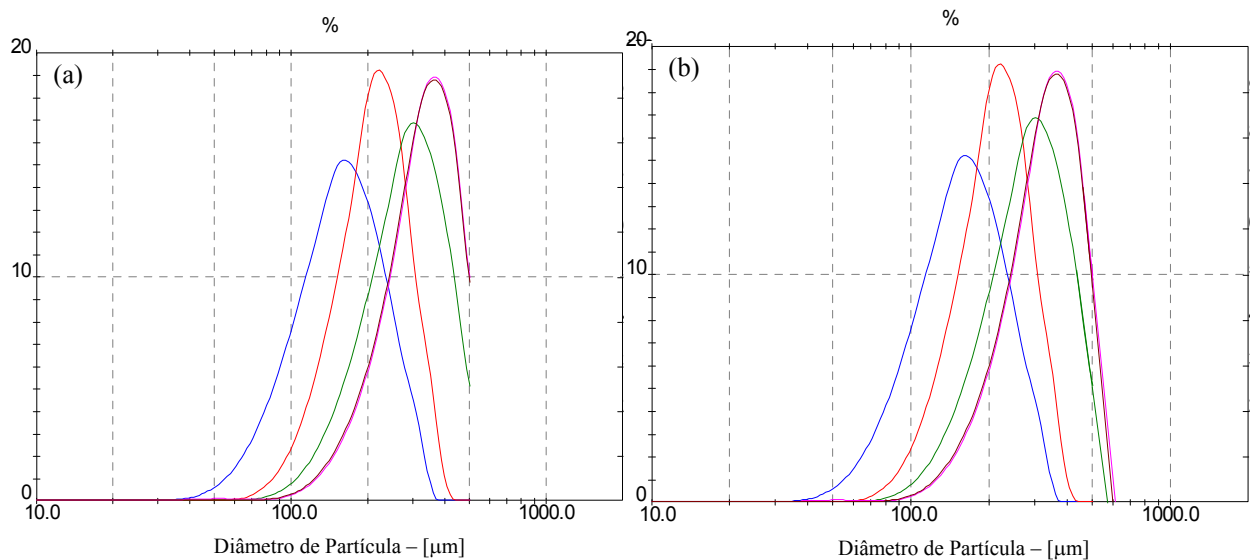


Figura 6.9: (a) Curvas das DTC obtidas originalmente como resposta e (b) curvas extrapoladas das DTC.

Freitas *et al* (2000) afirmam que a DTC pode ser representada por uma linha reta em um sistema de coordenadas $z-L$, onde os valores de z são calculados a partir do ajuste da distribuição cumulativa do tamanho de cristais, $M(L)$, pela equação 01.

$$M(L) = 100 \left(1 + z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{6} \right) \exp(-z) \quad (01)$$

onde:

$$z = 3 \frac{(L - L_N)}{(L_m - L_N)} \quad (02)$$

As constantes L_m e L_N são os diâmetros L para os quais $M(L)$ assume o valor de 64,7% e 100%, respectivamente.

A representação das curvas no sistema de coordenadas $z-L$ é mostrada na Figura 6.10. Observa-se que mesmo as curvas que possuíam todos os cristais dentro da faixa de detecção do analisador de partículas apresentavam um desvio da linearidade na parte final das curvas, e este comportamento foi mantido para aquelas que foram extrapoladas.

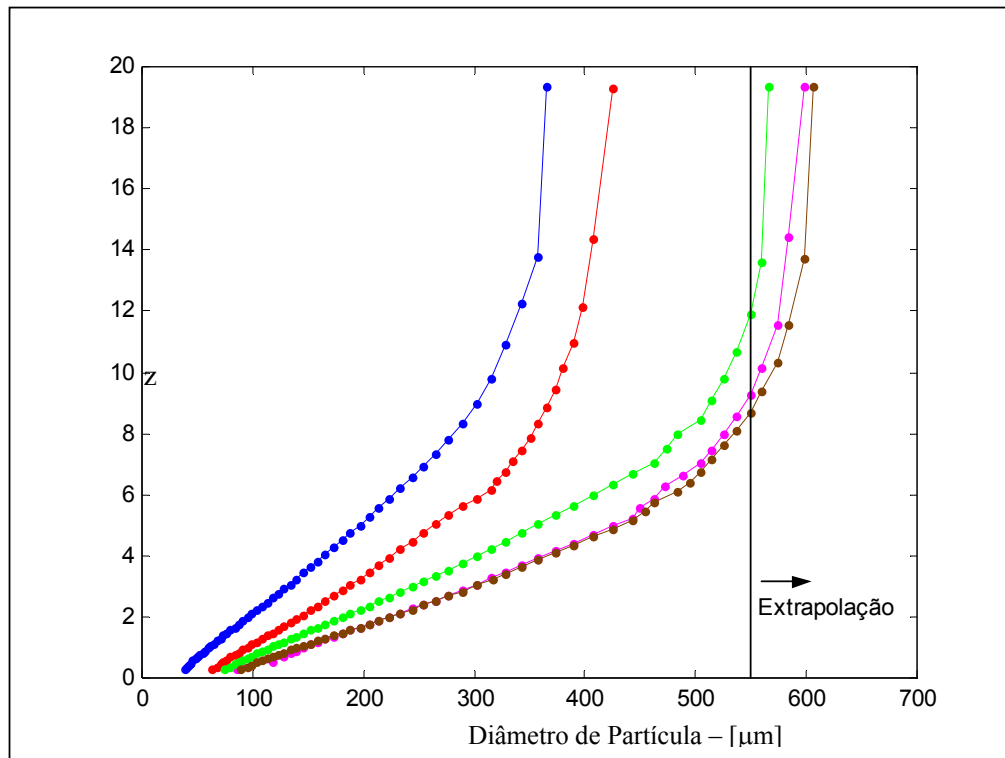


Figura 6.10: Representação das curvas no sistema de coordenadas $z-L$, com respectivos desvios da linearidade na sua parte final.

Algumas amostras foram observadas em microscópio, tendo-se observado que os maiores cristais encontrados tinham a média das duas maiores dimensões, por volta de $720 \mu\text{m}$, o que mostrou que a extrapolação não havia sido excessiva.

6.2.4. Testes no Ambiente Industrial

Tendo sido realizados os testes preliminares no ambiente da universidade, o passo seguinte foi checar na usina os pontos de coleta de material e a logística necessária para se obter as quatro amostras de interesse: xarope, massa cozida, mel e cristais.

A utilização da “garrafa de amostragem”, localizada na parte inferior do equipamento, não representava uma boa alternativa para a obtenção das amostras, pois além de recolher um volume excessivo de material, sua localização dificultava o acesso a energia elétrica e a água, e expunha o pesquisador a condições de altas temperaturas ao longo de toda a batelada.

A Figura 6.11 representa a sonda de amostragem, de bronze, que se encontra presente na parte frontal do equipamento industrial. O volume de material retirado com esta sonda é apropriado para o acompanhamento da batelada pelos operadores, porém é pequeno para as necessidades deste trabalho. A obtenção do volume apropriado era uma operação cansativa e, como tomava alguns minutos, comprometia a integridade da amostra – perda de água por evaporação, queda da temperatura, etc.

A Figura 6.12 representa a sonda idealizada pelo pesquisador, cuja utilização permitiria superar as limitações da sonda original. Esta eliminava a necessidade de deslocar todo o corpo da sonda e permitia a coleta de uma grande quantidade de amostra, aproximadamente 300ml. Os problemas com a temperatura foram diminuídos, uma vez que o corpo de metal mantinha a amostra quente, e não havia a perda de água, já que a amostra era despejada quase que imediatamente na centrífuga. Tendo sido permitida a troca da sonda original, um protótipo foi construído e testado com sucesso. Vale observar que a manipulação das válvulas da nova sonda se dava de forma que pelo menos uma delas permanecesse fechada, pois a entrada de ar no equipamento ocorria rapidamente e tinha efeitos imediatos na pressão interna do equipamento.

A sonda era introduzida no cristalizador um pouco antes da batelada ter início e, por reter material em seu interior, era retirada ao final. Esta operação era necessária pois, como o equipamento era limpo com vapor entre as bateladas, formava-se um bloco de açúcar derretido dentro da sonda, impedindo sua utilização na batelada posterior.

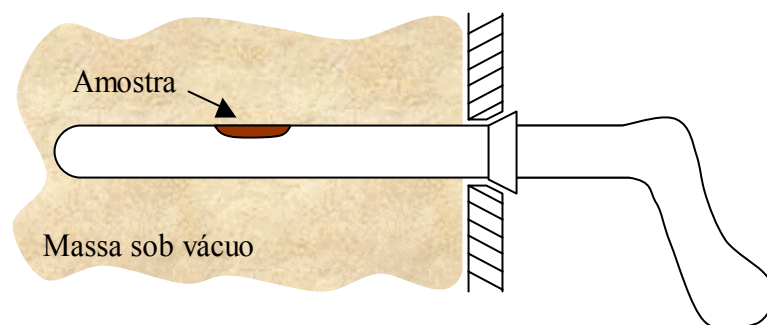


Figura 6.11: Sonda de amostragem normalmente utilizada na usina;

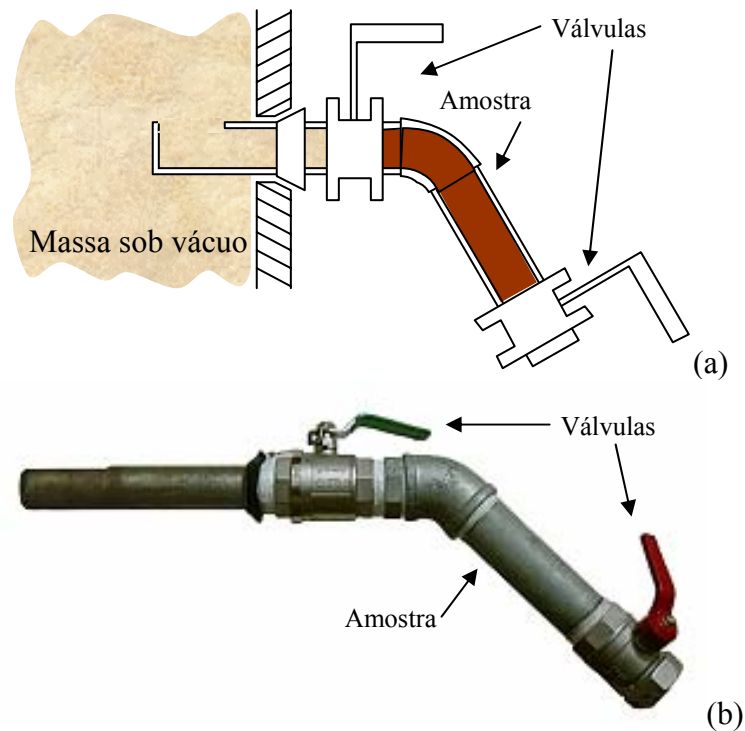


Figura 6.12 Desenho esquemático e foto da sonda de amostragem idealizada e construída para a retirada de amostra do cristalizador 10.

O tempo médio entre as amostragens era de 25 minutos. No entanto, nem sempre era possível, de uma mesma quantidade de material coletado, obter as amostras da massa cozida, do mel e dos cristais. Dentre os fatores que contribuíam para a diminuição do volume de material estavam o aumento da viscosidade da massa em dado momento e outros fatores extemporâneos, como o entupimento da sonda ou o desligamento automático da centrífuga devido ao superaquecimento. As amostras recolhidas eram armazenadas em fracos plásticos devidamente identificados, e, a seguir, eram levadas ao laboratório da usina para serem analisadas pelo pesquisador.

6.3. Modelagem do Processo

Nesta seção será detalhado o desenvolvimento do modelo do cristalizador 10. Em alguns pontos difere do enfoque utilizado na modelagem dos evaporadores, apesar dos equipamentos possuírem características semelhantes. As propriedades físicas da solução de sacarose foram, na maioria dos casos, calculadas utilizando-se as mesmas equações algébricas da etapa de evaporação.

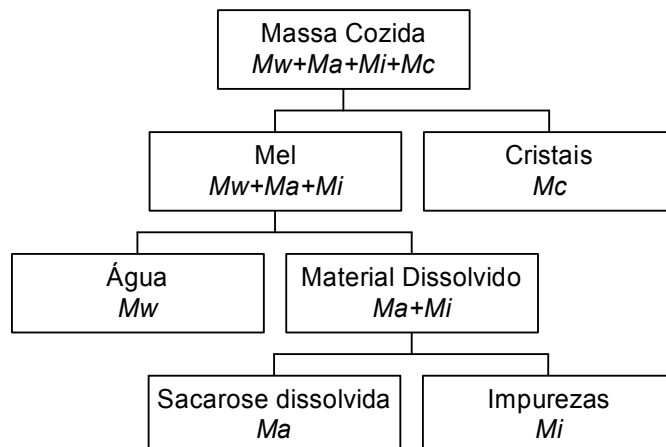
Primeiramente será apresentado o equacionamento que forma o modelo matemático do cristalizador e também as considerações envolvidas. Na seqüência serão comentados alguns aspectos da operação do cristalizador, principalmente aqueles que necessitaram de algum tipo de consideração simplificadora para se ajustarem ao modelo. Porém, a descrição detalhada da operação que se dava na indústria não será exposta aqui para resguardar o esforço de compilação de experiências empreendido pela usina. Este fato porém não dificulta nem limita o entendimento dos modelos gerados para simular o processo de cristalização.

É preciso enfatizar que o desenvolvimento do modelo foi direcionado no sentido de que fosse possível utilizar apenas os dados disponíveis no banco de dados do sistema supervisor.

6.3.1. Supersaturação

O processo de cristalização tem uma dinâmica que varia no tempo e exhibe fortes efeitos de não linearidade. Um dos motivos geradores de tais não-linearidades é a grande dependência da velocidade de crescimento dos cristais e das propriedades físicas da massa cozida com a temperatura e com a concentração (Lauret *et al*, 2000).

Para a representação matemática do cristalizador será considerado que a **massa cozida** é constituída de duas fases: uma sólida (os cristais), de massa M_c , e outra líquida (mel ou licor-mãe), cuja massa é a soma da massa de água, M_w , da massa de sacarose dissolvida, M_a , e da massa de impurezas, M_i . Vale observar que sob a definição de impurezas estão todos os materiais dissolvidos que não sejam sacarose. De forma resumida tem-se:



O balanço destas quatro espécies caracteriza completamente o acúmulo mássico no cristizador, de modo que o balanço da massa total, por não ser independente, não se faz necessário.

Além das equações de balanço, existem outras relações importantes entre as quantidades de constituintes da massa cozida, a saber:

Massa Total da Massa Cozida.....	$Mt = Ma + Mi + Mw + Mc$
Massa do Licor-Mãe.....	$Msol = Ma + Mi + Mw$
Fração Mássica de Matéria Seca.....	$Bx = \frac{Ma + Mi}{Ma + Mi + Mw}$
Fração Mássica de Matéria Seca Total.....	$BxT = \frac{Ma + Mi + Mc}{Ma + Mi + Mw + Mc}$
Brix – Percentagem de sólidos dissolvidos (%)	$Brx = 100Bx = 100 \frac{Ma + Mi}{Ma + Mi + Mw}$
Brix Total – Número de partes de matéria seca total em 100 partes de massa cozida.....	$BrxT = 100BxT = 100 \frac{Ma + Mi + Mc}{Ma + Mi + Mw + Mc}$
Pureza.....	$P = \frac{Ma}{Ma + Mi}$
Fração de Cristais.....	$Fc = \frac{Mc}{Ma + Mi + Mw + Mc} = \frac{BxT - Bx}{1 - Bx}$
Razão de Sacarose para Água.....	$Raw = \frac{Ma}{Mw} = \frac{Bx \cdot P}{1 - Bx}$
Razão de Impurezas para Água.....	$Riw = \frac{Mi}{Mw} = \frac{Bx \cdot (1 - P)}{1 - Bx}$

O Brix Total acima citado considera a sacarose na forma de cristais como se estes estivessem dissolvidos e, desta forma, não segue a definição de Brix, que se refere ao material realmente dissolvido no licor-mãe. Analisando-se a forma como as medidas de Brix da massa cozida são determinadas no laboratório da usina, concluiu-se que na verdade o Brix relatado é o Brix Total. É importante notar que todas as equações de propriedades do mel utilizam o valor de **Brix** e não de Brix Total.

A solubilidade da sacarose é definida como a concentração de sacarose em uma solução saturada que se encontra em equilíbrio com cristais de sacarose (Bubnik e Kadlec, 1995 *apud* Tahal, 2000). A solubilidade de uma solução pura de sacarose, Bx_{SAT} , é dependente da temperatura e na literatura são encontradas várias expressões

para seu cálculo. Neste trabalho será utilizada a seguinte equação (Maurandi, 1988 *apud* Feyeo de Azevedo e Chorão, 1993) :

$$Brx_{SAT} = 100Bx_{SAT} = 64,447 + 8,222\left(\frac{T}{100}\right) + 16,6169\left(\frac{T}{100}\right)^2 - 1,558\left(\frac{T}{100}\right)^3 - 4,63\left(\frac{T}{100}\right)^4 \quad (03)$$

O fenômeno da cristalização ocorre apenas em soluções supersaturadas, ou seja, que apresentam mais soluto dissolvido que o necessário para obter a saturação. O parâmetro utilizado para indicar a extensão do excesso de soluto é a supersaturação, S . O valor de S será 1,0 para soluções saturadas, menor que 1,0 para soluções diluídas e maior que 1,0 para soluções supersaturadas. A definição de supersaturação aparece na literatura de diversas maneiras, porém a ICUMSA (*International Commission for Uniform Methods of Sugar Analysis*) recomenda sua utilização da seguinte forma:

$$S = \frac{\left(\frac{Ma}{Mw}\right)_{IMP,T}}{\left(\frac{Ma}{Mw}\right)_{SAT,IMP,T}} \quad (04)$$

Onde:

- o numerador é a razão de sacarose/água para a solução “impura”;
- o denominador é a razão sacarose/água para uma solução saturada de açúcar com a mesma razão impureza/água e na mesma temperatura, e pode ser calculado através da equação (05):

$$\left(\frac{Ma}{Mw}\right)_{SAT,IMP,T} = SC \left(\frac{Ma}{Mw}\right)_{SAT,T} \quad (05)$$

Onde:

- SC é o coeficiente de saturação: um fator de correção adimensional que incorpora o efeito das impurezas na concentração de saturação de uma solução pura. Vários autores têm sugerido correlações para o cálculo de SC :

Wright (1974) *apud* Lauret (2000):

$$SC = 1 - 0,088\left(\frac{Mi}{Mw}\right) \quad (06)$$

Tahal (2000) cita a correlação de Broadfoot e Steindl (1980):

$$SC = 1 - \left(0,1 - \frac{T - 60}{200} \right) \left(\frac{Mi}{Mw} \right) \quad (07)$$

Outras correlações foram encontradas para o cálculo de SC, porém as mais recentes apresentam a seguinte forma:

$$SC = m \left(\frac{Mi}{Mw} \right) + b + (1 - b) \exp \left(-c \left(\frac{Mi}{Mw} \right) \right) \quad (08)$$

O manual de instruções para o *software* Seedmaster, da K-Patents (2002), sugere que as indústrias produtoras de açúcar determinem com certa freqüência as constantes m , b e c de modo a garantir que o processo se ajuste a mudanças na qualidade da cana-de-açúcar devido ao clima, condições de estocagem, práticas de cultivo e composição das impurezas. Interessante notar que os parâmetros para a cristalização de açúcar proveniente da beterraba são bastante diferentes daqueles utilizados para a cristalização de açúcar proveniente da cana-de-açúcar. Hassani *et al* (2001) trabalharam com a cristalização de açúcar de cana, porém utilizaram as constantes que no *software* Seedmaster foram utilizadas para a beterraba. Neste trabalho, a equação (08) foi adotada utilizando as constantes m , b e c do trabalho de Georgieva *et al* (2003):

$$SC = 0,1 \left(\frac{Mi}{Mw} \right) + 0,4 + (1 - 0,4) \exp \left(-0,24 \left(\frac{Mi}{Mw} \right) \right) \quad (09)$$

Por fim, a equação de supersaturação (Eq. 04) pode ser representada em termos do Brix da seguinte maneira:

$$S = \frac{\frac{Bx \cdot P}{1 - Bx}}{SC \frac{Bx_{SAT}}{1 - Bx_{SAT}}} \quad (10)$$

A seguir serão mostradas duas equações que permitem calcular a supersaturação limite para soluções de sacarose, isto é, grau de supersaturação a partir do qual os cristais de açúcar se formam de maneira espontânea e descontrolada:

White (2000) *apud* Tahal (2000):

$$S_{LIM} = 1,11 + 3,6(1 - P)^3 \quad (11)$$

Georgieva *et al* (2003):

$$S_{LIM} = 1,129 - 0,284(1 - P) + [2,333 - 0,0709(T - 60)](1 - P)^2 \quad (12)$$

Como pode ser visto, a diminuição da pureza da solução eleva o valor limite da supersaturação.

6.3.2. Modelo Matemático do Cristalizador

O modelo matemático desenvolvido para o cristalizador 10 consiste em um sistema algébrico-diferencial gerado a partir dos balanços de massa, de energia e do balanço populacional. A Figura 6.13 apresenta esquematicamente o cristalizador considerado para o desenvolvimento do modelo matemático.

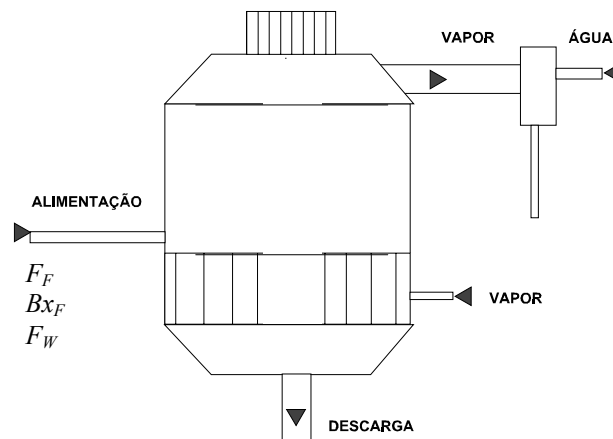


Figura 6.13: Representação esquemática do cristalizador 10.

Para o desenvolvimento do modelo, assumiu-se como desprezíveis os gradientes de temperatura e concentração dentro do equipamento, hipótese semelhante àquela adotada no modelo dos evaporadores. As demais considerações assumidas são listadas a seguir:

- Dinâmica do vapor desprezível;
- Capacidade calorífica desprezível da superfície de aquecimento (calandra);
- Mistura perfeita do líquido e dos cristais;
- Temperatura média da solução é representativa;
- Calor perdido para o ambiente desprezível;
- Condensação de todo o vapor que entra na calandra;
- Desconsiderados os eventos populacionais de nascimento e morte de partículas.

BALANÇO MATERIAL

A seguir são apresentadas as equações diferenciais do modelo:

Balanço de água:

$$\frac{dM_W}{dt} = F_F \rho_F (1 - Bx_F) + F_W \rho_F - J_{VAP} \quad (13)$$

Balanço de impurezas:

$$\frac{dM_I}{dt} = F_F \rho_F Bx_F (1 - P_F) \quad (14)$$

Balanço de sacarose dissolvida:

$$\frac{dM_A}{dt} = F_F \rho_F Bx_F P_F - J_{CRIST} \quad (15)$$

Balanço de cristais:

$$\frac{dM_C}{dt} = J_{CRIST} \quad (16)$$

Para o balanço de energia no líquido foi levada em consideração a dependência da entalpia da solução (Hl_{sol}) com a fração mássica do soluto (Bx) e com a pureza (P), lançando-se mão das correlações de Hl_{sol} disponíveis (Feyo de Azevedo e Chorão, 1993):

$$\begin{aligned} (M_{SOL} Cp_{SOL} + M_C Cp_C) \frac{dT}{dt} = & W + Q + F_F \rho_F Hl_F + F_W \rho_W Hl_W - J_{VAP} H_{VAP} \quad (17) \\ & - Hl_{SOL} \left(\frac{dM_A}{dt} + \frac{dM_I}{dt} + \frac{dM_W}{dt} \right) \\ & - H_C \frac{dM_C}{dt} - \frac{dHl_{SOL}}{dBx_{SOL}} \left[(1 - Bx_{SOL}) \left(\frac{dM_A}{dt} + \frac{dM_I}{dt} \right) - Bx_{SOL} \frac{dM_W}{dt} \right] \\ & - \frac{1}{Bx_{SOL}} \frac{dHl_{SOL}}{dP_{SOL}} \left[(1 - P_{SOL}) \left(\frac{dM_A}{dt} \right) - P_{SOL} \frac{dM_I}{dt} \right] \end{aligned}$$

Onde:

F = Vazão mássica	M = Massa no cristalizador
Hl = Entalpia (para líquidos)	H = Entalpia (para os cristais)
T = Temperatura da solução	J_{VAP} = Taxa de evaporação
P = Pureza da solução	H_{VAP} = Entalpia do vapor
J_{CRIST} = Taxa de cristalização	Q = Energia proveniente do vapor na calandra
Bx = Brix da solução	W = Energia advinda do agitador ($W=0$, pois não há agitador no cristalizador 10)
ρ = Densidade	

Subscritos:

F = Alimentação

I, A, W e C = impureza, sacarose, água e cristais, respectivamente

SOL = Solução

ST = Vapor na calandra

VAP = Vapor gerado dentro do cristalizador

Substituindo as equações (13) a (16) em (17) e rearranjando a equação resultante, chega-se a uma forma mais simples de representar o balanço de energia:

$$\frac{dT}{dt} = A_T J_{cris} + B_T F_F + C_T J_{VAP} + D_T \quad (18)$$

Onde : A_T, B_T, C_T e D_T agregam os termos isolados.

$$A_T = \frac{I}{(M_{Sol} C_{pSol}) + (M_C C_{pC})} \left[H_{lSol} - H_C + (1 - Bx_{Sol}) \frac{dH_{lSol}}{dBx_{Sol}} + \frac{(1 - P_{Sol})}{Bx_{Sol}} \frac{dH_{lSol}}{dP_{Sol}} \right] \quad (18a)$$

$$B_T = \frac{\rho_F}{(M_{Sol} C_{pSol}) + (M_C C_{pC})} \left[H_{lF} - H_{lSol} - \left((Bx_F - Bx_{Sol}) \frac{dH_{lSol}}{dBx_{Sol}} \right) - \left(\frac{Bx_F}{Bx_{Sol}} (P_F - P_{Sol}) \frac{dH_{lSol}}{dP_{Sol}} \right) \right] \quad (18b)$$

$$C_T = \frac{I}{(M_{Sol} C_{pSol}) + (M_C C_{pC})} \left[H_{lSol} - H_{VAP} - \left(B_{Sol} \frac{dH_{lSol}}{dBx_{Sol}} \right) \right] \quad (18c)$$

$$D_T = \frac{I}{(M_{Sol} C_{pSol}) + (M_C C_{pC})} \left[W + Q + \left(H_W - H_{lSol} + Bx_{Sol} \frac{dH_{lSol}}{dB_{Sol}} \right) F_W \rho_W \right] \quad (18d)$$

Através da resolução do sistema de equações diferenciais são obtidas as estimativas para as quantidades de sacarose, impurezas e água contidas no cristalizador e com estas grandezas é possível calcular, para cada instante, o Brix da solução - B_{rx} . Com o valor da concentração calculado e de posse da temperatura da massa, T , todas as propriedades físicas que figuram no modelo matemático podem ser calculadas através das correlações apresentadas no Anexo A. Dentre estas propriedades estão as densidades das correntes de material, a entalpia do vapor, a entalpia da solução e a dependência desta última com a pureza e a concentração.

6.3.3. Adaptações do Modelo ao Ambiente Industrial

O modelo foi utilizado para simular o processo a partir do momento em que o cristalizador se encontrasse preenchido com a carga inicial de xarope, que ocorria quando o nível indicava aproximadamente 54%. Um dos motivos para tal abordagem é que durante o período de enchimento a pressão dentro do equipamento ainda não havia se estabilizado e seu efeito não é perfeitamente descrito pelo modelo. Porém, a Figura 6.14 mostra que esta etapa da operação do equipamento não é crítica, uma vez que o nível pode ser bem representado por uma função linear em relação ao tempo e atinge 54% em aproximadamente 16 minutos.

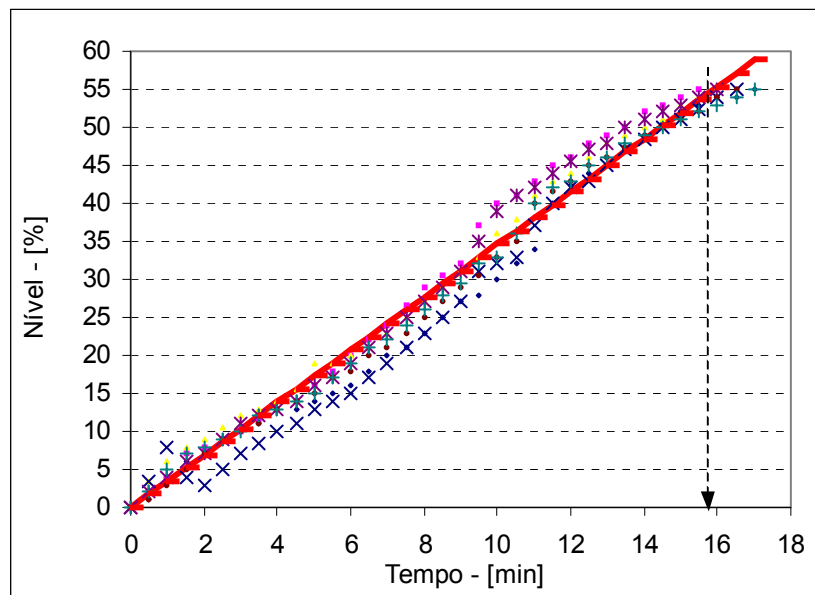


Figura 6.14: Representação da fase de enchimento do cristalizador 10.

Analisando-se as equações expostas, nota-se que para a resolução do modelo proposto é necessário que o material que alimenta o cristalizador seja bem caracterizado (através da temperatura, da concentração e da vazão de alimentação - F_W e F_F) e também que sejam informados os valores das taxa de evaporação de água e de cristalização - J_{VAP} e J_{CRIST} , respectivamente. As próximas seções detalham as manipulações que tiveram que ser efetuadas nas informações presentes na base de dados do sistema supervisor, uma vez que nem todas estavam na forma adequada para serem diretamente utilizadas pelo modelo.

6.3.3.1. Vazão da Corrente de Alimentação de Xarope (F_F) e de Água (F_W)

A carência de informações disponíveis *on-line* na usina a respeito do xarope que alimentava o cristalizador 10 era significativa. A vazão de alimentação, talvez a variável mais crítica do modelo, não era medida e, por este motivo, foi calculada indiretamente por meio do sinal da abertura da válvula de controle. Uma mostra do comportamento desta variável é encontra na Figura 6.15, a seguir.

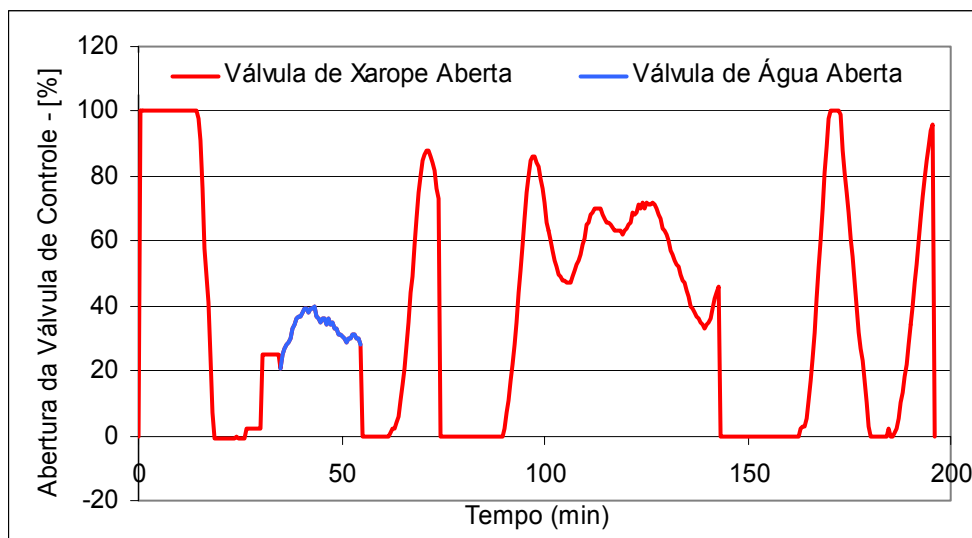


Figura 6.15: Abertura da válvula de controle e fluidos transportados por ela.

A vazão através da válvula de controle depende do tamanho desta, da perda de carga, da percentagem de abertura e das propriedades do fluido. As equações de projeto normalmente utilizadas para o cálculo da vazão que flui através da válvula de controle relacionam todos estes fatores, porém devido à falta de dados e de especificações da válvula, a vazão de alimentação foi calculada através de uma relação linear com a abertura da válvula de controle:

$$F_F = K_X * ABVAX * ST_X \quad [m^3/min] \quad (19)$$

$$F_W = K_W * ABVAX * ST_W \quad [m^3/min] \quad (20)$$

Nas equações (19) e (20) $ABVAX$ representa o valor da abertura da válvula de controle presente na base de dados. Uma vez que por esta mesma válvula circulam o xarope e a água que alimentam o equipamento, foram utilizados os sinais ST_W e ST_X que indicavam, respectivamente, os estados das válvulas *on/off*, que permitiam a passagem da água e do xarope (Figura 6.15). K_W e K_X são constantes que tiveram seus valores ajustados. O motivo para não utilizar a mesma constante para os dois fluidos foi a possibilidade de uma mesma abertura de válvula poder gerar vazões diferentes devido às diferentes densidades e viscosidades dos materiais.

O Brix da solução era controlado através da manipulação da abertura da válvula de controle e o *setpoint* do Brix era linearmente relacionado com o nível da solução. A Figura 6.16 ilustra esta dependência, que é determinada pelos valores de Brix desejados para os níveis de 50, 75 e 100%.

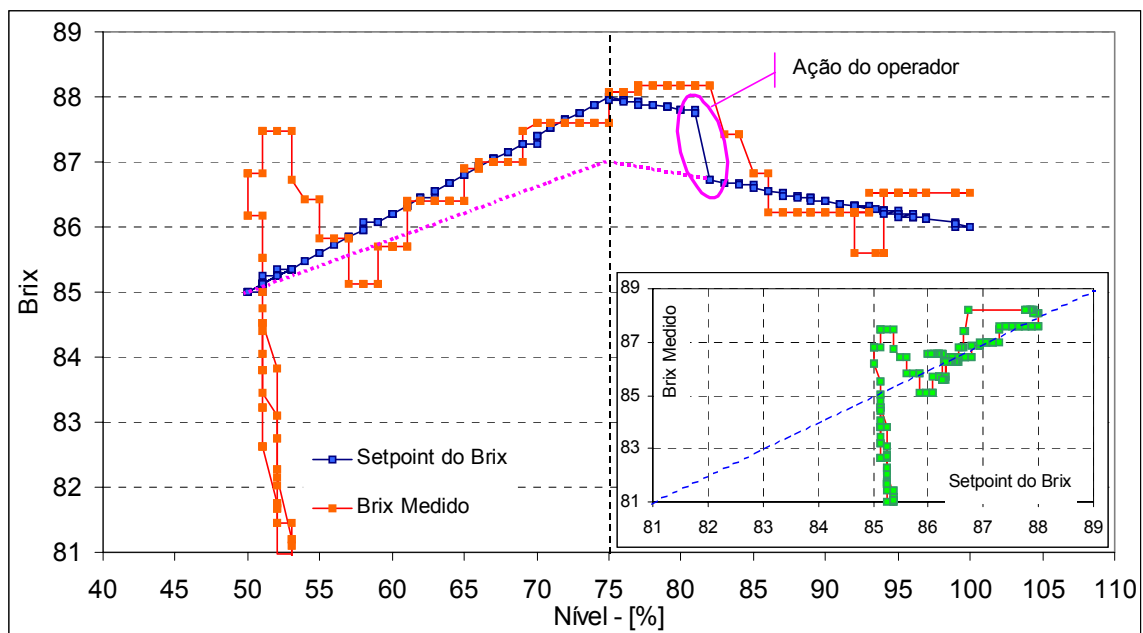


Figura 6.16: Representação esquemática da dependência do Brix com o nível da solução.

A Figura 6.16 também ilustra a capacidade do processo em seguir a rampa estipulada. Pode-se notar que esta representação permite localizar pontos de interferência manual dos operadores. No exemplo acima, pode-se notar que quando o nível se aproximou de 80% o operador reduziu o valor do Brix desejado correspondente ao nível de 75%. Como será mostrado mais adiante, a forma como é manipulada a válvula de controle impacta de maneira expressiva nos resultados do modelo.

O cálculo utilizado para estimar um valor inicial de K_X é exemplificado a seguir. Nos dados relativos a uma determinada batelada foram separados os tempos nos quais o nível atingiu 57 e 75% - durante a fase de enchimento. Com os volumes correspondentes a estes níveis e com as densidades do material foram calculadas, para cada tempo, a massa total contida no equipamento. Com os valores do Brix Total foram calculadas as massas de soluto (sacarose total e impurezas) e de água. A diferença entre as massas de soluto ($\Delta 1$ na Tabela 6.15) foi utilizada para calcular o volume de xarope (68° Brix de concentração) que conteria esta mesma massa de soluto. A vazão de alimentação média foi calculada dividindo-se este volume pela diferença entre os tempos anotados. Relacionando-se este valor calculado com a abertura média da válvula de controle durante o período é possível estimar a vazão de alimentação para a abertura de 100% por meio de uma regra de três e na seqüência calcular K_X . Com os mesmos dados também é possível fazer uma primeira estimativa da taxa de evaporação, uma vez que a quantidade de água evaporada equivale a aquela que entrou na corrente de alimentação menos a diferença entre a quantidade de água de cada tempo ($\Delta 2$). A Tabela 6.4 abaixo sumariza os cálculos aqui detalhados:

Tabela 6.4: Dados para o cálculo da estimativa do parâmetro K_X .

Tempo (min)	Nível (%)	Volume (m ³)	Brix (%)	Densidade (kg/m ³)	Massa Total (kg)	Soluto Total (Sac, e Imp)	Água (kg)
↓38	57	30,30	85,84	1432,78	43419,86	37271,61	6148,25
	75	44,10	88,00	1447,96	63855,10	56192,49	7662,61
					$\Delta=20435,24$	$\Delta 1=18920,88$	$\Delta 2=1514,36$

	Brix (%)	Densidade	
Xarope	68	1310,33	
Abertura Média	62,84 %	→	732,232 kg/min
Abertura Total	100 %	→	1165,155 kg/min
			$K_X=0,889$ m³/min

Soluto Alimentado ($\Delta 1$)	Xarope Alimentado	Água no Xarope	Água Evaporada	Taxa de Evaporação
18920,88	27824,82	8903,94	7389,58	194,46 kg/min

Repetidos estes cálculo em um conjunto de sete bateladas, obteve-se um K_X de $0,913 \pm 0,143 \text{ m}^3/\text{min}$ e uma taxa de evaporação (J_{VAP}) de $214,27 \pm 63,55 \text{ kg}/\text{min}$. Na fase de ajuste dos parâmetros utilizou-se como valor inicial de K_W o valor de K_X aqui calculado.

6.3.3.2. Temperatura da Corrente de Alimentação de Xarope (T_F)

Em relação à temperatura do xarope de alimentação, que seria utilizada no cálculo da entalpia, foi adotada a menor temperatura registrada durante a batelada. Esta normalmente se encontrava nos primeiros minutos da fase de enchimento (Figura 6.17). Quanto à concentração e à pureza da alimentação, para as bateladas nas quais não houve coleta de amostra de xarope, foram utilizados os valores determinados no laboratório da usina para o turno no qual a batelada teve início. De acordo com dados armazenados pelo laboratório, constatou-se que estas variáveis podem ser bem representadas pelos seus valores médios de 66,0° Brix e 90% de pureza. Vale observar que o xarope que alimenta os cristalizadores se encontra na “caixa de xarope”. O material neste tanque recebe correntes de reciclo da etapa de cristalização e apresenta características (concentração e pureza) um pouco diferentes do xarope que sai dos evaporadores.

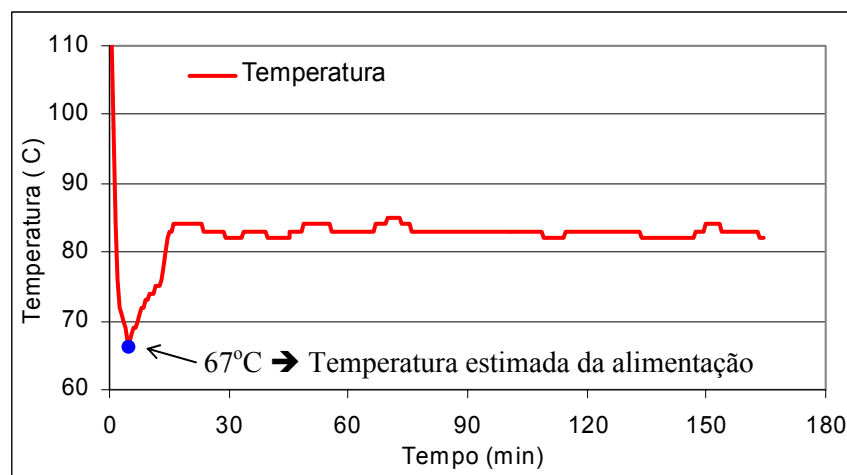


Figura 6.17: Determinação da temperatura da corrente de alimentação

6.3.3.3. Volume de Massa Cozida (V_m)

Em um dado momento dos cálculos acima, o volume de massa cozida contido no cristizador, V_m , foi calculado a partir do nível indicado na base de dados. Este procedimento seria trivial não fosse o desconhecimento inicial da forma como a indústria relacionava estas grandezas. A determinação desta relação entre o volume e o nível da base de dados foi efetuada em dois passos. Primeiramente, calculou-se a altura

de líquido, a partir do valor do nível, e, a seguir, o volume. A relação entre o nível e a altura é mostrada na Figura 6.18:

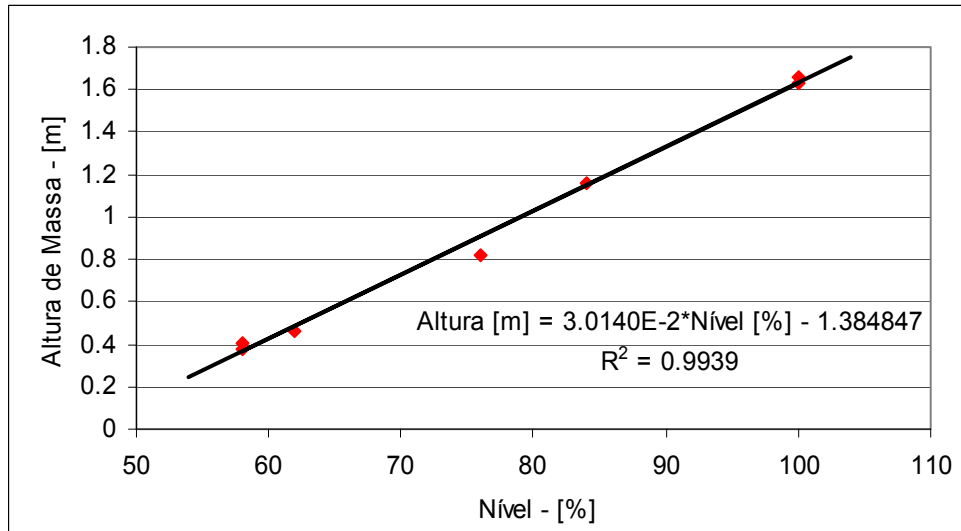


Figura 6.18: Relação entre o sinal do nível do cristalizador 10 e a altura da massa cozida.

Os sete pontos experimentais explicitados na Figura 6.18 foram obtidos em momentos nos quais a operação do cristalizador 10 havia sido interrompida. Uma vez que não havia ebulição da massa cozida, era simples medir, pelos visores do equipamento, a distância entre a superfície da solução e a parte superior da calandra. Vale observar que a equação obtida é uma aproximação, mas sua utilização pode ser justificada, pois a faixa de variação da densidade da massa ao longo da batelada é estreita, de 1370kg/m^3 a 1470kg/m^3 , e é de se esperar que valores de nível semelhantes estejam sob condições equivalentes de concentração e temperatura.

Por meio de cálculos com as dimensões do cristalizador foi possível relacionar a altura de massa cozida com o volume correspondente através da equação (21), que é apropriada para valores de nível maiores que 50%.

$$\text{Volume} = (0,03014 \cdot \text{Nível} [\%] - 1,384847) \cdot 25,428189 + 21,8336 \quad [\text{m}^3] \quad (21)$$

6.3.3.4. Taxa de Evaporação de Água (J_{VAP})

Uma outra variável requerida pelo modelo é a taxa de evaporação de água no equipamento (J_{VAP}). Em seu trabalho, Evans e colaboradores (1970) sugerem a equação empírica (22) para estimar J_{VAP} . Os autores atestam que a constante K_{VAP} terá um valor “muito” elevado de forma a forçar que $T \approx T_{VAP} + EPE_X$. Neste caso, a taxa de evaporação pode ser vista como um regulador da temperatura.

$$J_{VAP} = K_{VAP} (T - (T_{VAP} + EPE_X)) \quad (22)$$

Uma outra forma de estimar J_{VAP} foi sugerida por Meireles (1996). Sua abordagem é complementar a de Evans e colaboradores, mas, além do superaquecimento da solução, fica explicitada a relação da quantidade de água evaporada com a quantidade de calor cedida à massa cozida. Aquele trabalho também se valia do fato do valor da vazão de vapor, F_{ST} , estar disponível.

$$J_{VAP} = \frac{F_{ST} \alpha_{ST} \Delta H_{V_{ST}}}{\Delta H_{V_{VAP}}} + K_{VAP} (T - (T_{VAP} + EPE_X)) \quad (23)$$

Nesta equação, α_{st} é um parâmetro empírico ajustável que pode ser entendido como um fator de correção para a entalpia do vapor de aquecimento, que engloba perdas de calor e imprecisões nas medidas dos sensores de pressão do vapor. Já K_{VAP} traduz a extensão do efeito de um superaquecimento da massa na taxa de evaporação. Ambos podem ser modificados para melhor adequação à situação real do processo, mas é de se esperar que o primeiro não se distancie muito da unidade, uma vez que pretende apenas compensar erros. Interessante notar que no trabalho de Meireles (1996) K_{VAP} apresenta um valor baixo (1,8kg/min °C), ao contrário do que ocorre no trabalho de Evans *et al* (1970), o que sugere que o primeiro termo da equação (23) já é uma boa aproximação de J_{VAP} .

Uma vez que a vazão do vapor que entrava na calandra não se encontrava disponível no cristalizador 10, utilizou-se a consideração de que o calor cedido pelo vapor era descrito por:

$$Q = UA(T_{ST} - (T_{VAP} + EPE_X + EPE_H)) \quad (24)$$

Onde U é o coeficiente de troca térmica; A a área de troca da calandra e T_{ST} a temperatura do vapor, considerado saturado; já EPE_X e EPE_H correspondem à elevação do ponto de ebulição causado pela concentração e pela coluna de massa cozida. A utilização da EPE_H apenas no cálculo de Q é sugerida por Camargo (1990) e Evans *et al* (1970), e também reflete a informação contida no manual da K-Patents (2002), que afirma que o interior dos tubos da calandra é a região do equipamento onde a massa se encontra com maior temperatura.

O valor de U foi estimado com os dados da etapa de concentração de sete bateladas, utilizando a metodologia sugerida por Feyo de Azevedo e Chorão (1993) e Meireles (1996). Nesta etapa da operação não há alimentação de material nem crescimento de cristais, somente evaporação da água. Assim, a equação (18) é representada por:

$$\frac{dT}{dt} = C_T J_{VAP} + D_T \quad (25)$$

Resolvendo-se para J_{VAP} torna-se:

$$J_{VAP} = \frac{Q - M_{SOL} C_{P_{SOL}} \frac{dT}{dt}}{Hv_{VAP} - Hl_{SOL} + Bx_{SOL} \frac{dHl_{SOL}}{dBx_{SOL}}} \quad (26)$$

Com os dados disponíveis na base de dados - especificamente Brix, nível e pressões do vapor de aquecimento e do vácuo - é possível integrar a taxa de evaporação ao longo do período de concentração e acompanhar a diminuição da quantidade de água no cristalizador. O valor de U , que se encontra embutido no cálculo de Q , foi ajustado apropriadamente de modo a gerar resultados concordantes com a evolução da massa de água obtida dos dados experimentais. Os gráficos da Figura 6.19 mostram a variação da massa de água em cinco das sete bateladas utilizadas. O valor estimado de U foi de 2501 kJ/h m² °C (41,69 kJ/min m² °C) e a taxa de evaporação média foi de 241 kg/min, ainda dentro da faixa de J_{VAP} calculada anteriormente. Na etapa de ajuste dos parâmetros o valor de U aqui calculado foi utilizado como valor inicial de busca.

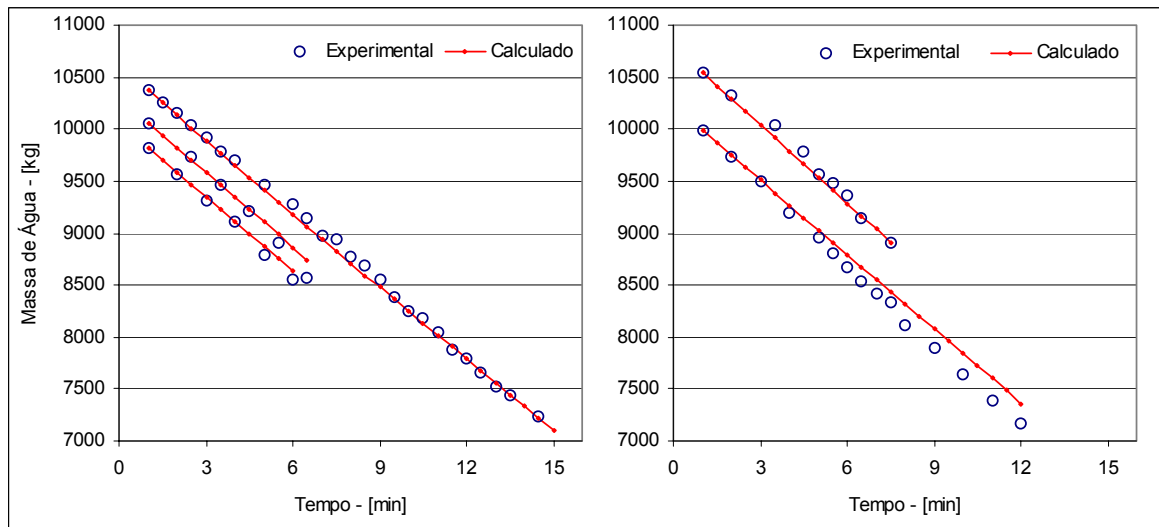


Figura 6.19: Representação da variação da massa de água presente no cristalizador 10 em cinco bateladas. Valores calculados durante a estimativa do coeficiente de troca térmica.

Uma vez que fora da etapa de concentração a variação da massa de água no equipamento é ditada por um efeito combinado da quantidade de calor cedida à massa cozida e da vazão de alimentação de material, não é possível utilizar a equação (26) ao longo de toda a batelada. Desta forma, a abordagem que será adotada neste trabalho para exprimir J_{VAP} é uma variante da equação de Meireles (1996) e será esta versão simplificada, equação (27), aquela a ser utilizada nos cálculos da resolução do sistema de equações diferenciais:

$$J_{VAP} = \frac{UA(T_{ST} - (T_{VAP} + EPE_X + EPE_H))}{\Delta H_{VAP}} + K_{VAP}(T - (T_{VAP} + EPE_X)) \quad (27)$$

Uma vez ajustados os valores de U e K_{VAP} , todos os termos desta equação ou são conhecidos ou podem ser calculados ao longo da resolução do modelo.

6.3.4. Balanço Populacional

Um dos objetivos do modelo da cristalização é a descrição da população de cristais presentes no equipamento. Neste trabalho, o acompanhamento do crescimento dos cristais se dá através do cálculo do tamanho médio mássico, AM , e do desvio padrão, σ , associados a sua DTC. Nas usinas de açúcar é comum utilizar o coeficiente de variação, $CV=100\sigma/AM$, para descrever o grau de uniformidade dos cristais formados. Este parâmetro é a representação percentual do desvio padrão em relação ao tamanho médio do cristal,

Do ponto de vista matemático, a descrição das características da população de partículas vem da resolução do balanço populacional. Este é derivado de maneira análoga ao balanço diferencial de massa, energia e *momentum*, efetuando a contagem das partículas com tamanho na faixa de L a $L+\Delta L$ em um volume diferencial dV de uma suspensão. A aplicação do balanço populacional não se restringe a sistemas de cristalização, uma vez que deriva da análise de um sistema particulado geral sujeito a várias ocorrências populacionais (por exemplo: surgimento de partículas, retirada seletiva de partículas em uma certa faixa de tamanhos, etc).

Para um processo de batelada alimentada, no qual a corrente de entrada não possui cristais, o balanço populacional baseado no tamanho de partículas pode ser representado de maneira genérica pela equação (28) (Patience, 2002):

$$\frac{\partial \bar{f}(t, L)}{\partial t} + \frac{\partial G(t, L) \bar{f}(t, L)}{\partial L} - D_G \frac{\partial^2 \bar{f}(t, L)}{\partial L^2} = B(L) - D(L) \quad (28)$$

Onde :

$f(t, L)$ = Função densidade populacional baseada no número de partículas por tamanho de partícula por unidade de volume de suspensão – [#m/m³]

$\bar{f}(t, L) = f(t, L) V$, com V sendo o volume total da suspensão – [#m]

$B(L)$ e $D(L)$ = Taxa de nascimento e morte, respectivamente – [#m/s]

G = Velocidade de crescimento linear – [m/s]

D_G = Difusividade da velocidade de crescimento linear – [m/s²]

L = Comprimento característico – [m]

= Símbolo representativo de número.

Considerando-se que não há desaparecimento de partículas (morte) ou surgimento de novas (nascimento) a equação (29) pode ser representada para todo o volume do cristalizador como:

$$\frac{\partial \bar{f}(t, L)}{\partial t} + G \frac{\partial \bar{f}(t, L)}{\partial L} - D_G \frac{\partial^2 \bar{f}(t, L)}{\partial L^2} = 0 \quad (29)$$

Na equação acima também se encontra a hipótese de que a velocidade de crescimento do cristal, G , independe do tamanho deste (Lei de McCabe). Tal comportamento é encontrado em muitos sistemas e no caso específico da cristalização de sacarose é assumido por vários autores (Georgieva *et al*, 2003; Hassani, 2001; dentre outros).

Uma vez que a resolução da equação diferencial parcial (29) não é trivial, é comum representá-la por um conjunto de j equações diferenciais ordinárias, por meio dos momentos da distribuição definidos como (Randolph & Larson, 1988):

$$\mu_j(t) = \int_0^{\infty} L^j f(L, t) dL \quad (30)$$

A equação (29) é representada, então, pelo seguinte conjunto de seis EDOs:

$$\frac{d\bar{\mu}_0}{dt} = 0 \quad (31)$$

$$\frac{d\bar{\mu}_1}{dt} = G\bar{\mu}_0 \quad (32)$$

$$\frac{d\bar{\mu}_j}{dt} = jG\bar{\mu}_{j-1} + j(j-1)D_G\bar{\mu}_{j-2} \quad , \text{ para } 2 \leq j \leq 5 \quad (33)$$

Matthews (1997) aponta que apesar de sua utilidade este método apresenta como limitações o fato de não ser possível, resolvendo-se um conjunto finito de equações de momento, reconstruir a distribuição, pois o problema inverso é mal-condicionado. Em outras palavras, um conjunto finito de momentos não é capaz de representar uma DTC de forma única. Outro fator é que a inclusão de funções dependentes do tamanho da partícula leva a sistemas de difícil solução.

Por outro lado, uma característica que pode ser interpretada como vantagem, além da redução da EDP em um conjunto de EDOs, é que os momentos da distribuição estão relacionados com características físicas das partículas (Jancic e Grootscholten, 1984). Quando a função densidade é dada relacionando-se o número ao diâmetro das partículas, em metros, a unidade de μ_j é $[m^j]$. Os momentos μ_0 e μ_1 equivalem ao número total e à soma do comprimento de todos os cristais, e os momentos μ_2 e μ_3 estão, respectivamente, relacionados à área total e ao volume total dos cristais pelos fatores de forma de área e volumétrico. É possível também, fazendo uso de μ_4 e μ_5 , calcular diretamente os parâmetros de caracterização da distribuição: o tamanho médio mássico (AM) e o respectivo coeficiente de variação (CV). A saber, o tamanho médio mássico é aquele obtido da distribuição de volume por tamanho de cristais.

$$AM = \frac{\mu_4}{\mu_3} \quad (34)$$

$$CV = 100 \frac{\mu_3}{\mu_4} \sqrt{\frac{\mu_5}{\mu_3} - \left(\frac{\mu_4}{\mu_3}\right)^2} \quad (35)$$

Vale observar que os resultados obtidos para os parâmetros acima independem da utilização de μ_j ou $\bar{\mu}_j$ nos cálculos, uma vez que são características intrínsecas da forma da DTC e não do número de partículas que formam a população.

Como citado acima o volume de cristais em uma unidade de volume de suspensão se relaciona com o terceiro momento de sua DTC baseada no número:

$$\frac{V_c}{V_m} = k_v \mu_3 \quad (36)$$

Onde V_m é o volume total de massa cozida e K_v é o fator de forma volumétrico do cristal.

Por extensão, a massa total de cristais na suspensão pode ser calculada com:

$$M_c = \rho_c k_v \bar{\mu}_3 \quad (37)$$

Derivando em relação ao tempo e substituindo na equação (16) tem-se:

$$\frac{dM_c}{dt} = \rho_c k_v \frac{d\bar{\mu}_3}{dt} = J_{CRIST} \quad (38)$$

Desta forma, pode-se observar que o balanço populacional se relaciona com os balanços de massa e energia através da taxa de cristalização, J_{CRIST} .

Os parâmetros necessários para a completa descrição do balanço populacional são o valor do fator de forma volumétrico, K_v , da expressão da velocidade de crescimento linear a ser utilizada, G , e da expressão da difusividade da velocidade de crescimento, D_G .

6.3.4.1. Fator de Forma Volumétrico (K_v)

Na literatura são encontrados inúmeros valores de K_v para os cristais de sacarose: Lauret e colaboradores (2000) apresentam o valor de $K_v=0,75$; Meireles (1996) utiliza o valor de 0,84 e refere-se aos valores obtidos por peneiramento por Heffels (1990) que variaram de 0,81 a 1,02; Georgieva *et al* (2003), por sua vez, toma 0,65 como valor de K_v e outros autores, como Evans *et al.* (1970) e Jesus (2000),

consideram o cristal esférico e utilizam $K_v = \pi/6$. Dada a grande dispersão de valores e a falta de parâmetros para preterir um a outro, neste trabalho foi adotado para K_v o valor de 0,75, por este se apresentar próximo da média dos valores citados. Vale observar que este parâmetro não tem um impacto crítico no modelo.

6.3.4.2. Velocidade de Crescimento Linear (G)

Como comentado anteriormente, o balanço populacional afeta o balanço de massa através de J_{CRIST} , por sua vez o balanço populacional sofre a influência das variáveis de estado do cristalizador (concentração de sacarose, temperatura, etc) através da velocidade de crescimento de cristais, G . A velocidade de crescimento é citada como a principal causa da não linearidade encontrada nos sistemas de cristalização (Lauret *et al*, 2000). Uma vez que um modelo totalmente determinístico da velocidade de crescimento dos cristais não se encontra disponível, este parâmetro cinético é genericamente descrito por correlações que agregam os efeitos das principais variáveis que o afetam: temperatura, pureza, fração de cristais, grau de agitação e supersaturação.

$$G(T, P, Fc, rpm, S) = g_T g_P g_{Fc} g_{rpm} g_S,$$

Onde cada função g descreve a influência de uma variável específica.

Influência da temperatura:

O efeito da temperatura sobre G é normalmente correlacionado por uma relação de Arrhenius (Garcia 2001; Meireles, 1996; Tahal, 2000):

$$g_T = A \exp\left(\frac{-Eat}{R(T + 273)}\right) \quad (39)$$

Onde A é um fator de frequência; Eat a energia de ativação necessária para que a molécula de sacarose se integre ao cristal; R a constante dos gases ($8,3145 \text{e-}3 \text{kJ/mol/K}$) e T a temperatura. Meireles (1996) utilizou $Eat = 57 \text{kJ/mol}$ e Tahal (2000) apresentou a seguinte expressão para o cálculo de seu valor:

$$Eat = 62,76 - 0,8368 (T - 60) \quad [\text{kJ/mol}] \quad (40)$$

Influência da Pureza:

Apesar de haver exceções, em geral as impurezas tem um efeito inibidor em relação a G . A equação a seguir é utilizada para exprimir o efeito da pureza (Meireles, 1996; Georgieva *et al*, 2003; Tahal, 2000):

$$g_p = \exp(-E_{PUR}(1-P)) \quad (41)$$

Onde E_{PUR} é uma constante de ajuste.

Influência da Fração de Cristais:

Meireles (1996) cita o trabalho de Maurandi (1989) no qual este quantifica como G é influenciada pela fração de cristais presentes no cristalizador. O trabalho concluiu que a diminuição da porosidade da suspensão, isto é, o aumento da quantidade de cristais, tinha um efeito positivo sobre G que podia ser expresso por:

$$g_{Fc} = \left(1 + 2 \frac{Vc}{Vm}\right) = \left(1 + 2 \frac{\rho_M}{\rho_C} Fc\right) \quad (42)$$

Em Lauret *et al* (2000) é encontrada a seguinte expressão:

$$g_{Fc} = \left(\frac{1-Fc}{Fc}\right)^{Efc} \quad (43)$$

Onde Efc pode ser ajustado.

Influência do Estado de Agitação:

Garcia (2001) afirma que a agitação no meio diminui a energia necessária para a incorporação da molécula de sacarose no cristal e diminui a resistência ao transporte de massa, sendo que este último efeito parece ser o mais provável. A autora apresenta a seguinte relação empírica:

$$g_{rpm} = (1 + rpm)^{Erpm} \quad (44)$$

Onde $Erpm$ é uma constante de ajuste. Uma vez que não há agitador no cristalizador que é objeto de estudo deste trabalho, rpm sempre será zero.

Influência da Supersaturação:

A influência da supersaturação em G é representada pela equação abaixo:

$$g_s = K_{SS} (S - 1)^{Ess} \quad (45)$$

Onde K_{SS} e Ess são parâmetros ajustáveis. O valor de Ess deve ser menor que 3, afirmam Lauret *et al* (2000) citando o trabalho de Tavares (1995). Meireles (1996) e Garcia (2001) sustentam que dentro das condições normalmente encontradas nos cristalizadores industriais de açúcar o valor de Ess pode ser considerado igual a unidade.

Na literatura são ainda encontradas outras formas de representação de G , por exemplo em Evans *et al* (1970), e abordagens híbridas de estimativa de G , como nos trabalhos de Lauret *et al* (2000) e Georgieva *et al* (2003) que lançaram mão de redes neurais para a estimativa de G .

Neste trabalho, a equação da velocidade de crescimento linear dos cristais utilizada possui uma forma semelhante àquela que foi utilizada por Meireles (1996), Feyo de Azevedo e Chorão (1993), Georgieva *et al* (2003) e Lauret *et al* (2000) e encontra-se ilustrada a seguir:

$$G = K_g \exp\left(\frac{-57000}{8,315(T + 273)}\right) \cdot (S - 1) \cdot \exp(-8(1 - P)) \cdot \left(1 + 2 \frac{\rho_M}{\rho_C} Fc\right) \quad (46)$$

Onde K_g é um parâmetro que teve seu valor determinado na fase de ajuste do modelo. Na literatura, o valor desta constante variou de 100 - Feyo de Azevedo e Chorão (1993) - a 265 - Georgieva *et al* (2003) - com dados de refinarias de açúcar.

6.3.4.3. Difusividade da Velocidade de Crescimento Linear (D_G)

Para a difusividade da velocidade de crescimento foi adotada a expressão utilizada por Meireles (1996), citada do trabalho de Randolph e White (1977):

$$D_G = K_{DG} (2P - 1)G \quad (47)$$

Assim como K_G , K_{DG} teve seu valor ajustado. No trabalho de Meireles (1996) K_{DG} assumiu o valor de 5×10^{-5} e no trabalho de Feyo de Azevedo e Chorão (1993) o valor de 6×10^{-5} .

6.3.5. Condições Iniciais das Variáveis de Estado do Modelo

Pelo que foi exposto, o modelo matemático do cristalizador 10 é constituído por quatro equações do balanço de massa (Eq 13 a 16), uma do balanço de energia (Eq 17) na massa cozida e seis referentes à evolução dos momentos da distribuição populacional (Eq 31 a 33). Com a resolução deste sistema de equações é possível acompanhar todos os parâmetros e variáveis relevantes da operação do cristalizador.

Neste ponto, uma vez estabelecidas todas as correlações necessárias, a concretização do modelo depende apenas da determinação das condições iniciais das EDOs para ser resolvido. As condições iniciais das equações dos balanços de massa e energia são obtidas diretamente dos dados do sistema supervisor. A forma como foram calculadas as condições iniciais das EDOs que compõem o balanço populacional serão mostradas a seguir.

No conjunto das bateladas acompanhadas neste trabalho, as três primeiras foram alimentadas com sementes que, em relação às características da DTC, podiam ser consideradas qualitativamente diferentes daquela utilizada nas sete bateladas restantes. A Figura 6.20 mostra a DTC baseada no número de partículas gerada pela análise destas duas sementes. Os valores numéricos que geraram estas curvas podem ser encontrados no Anexo C.

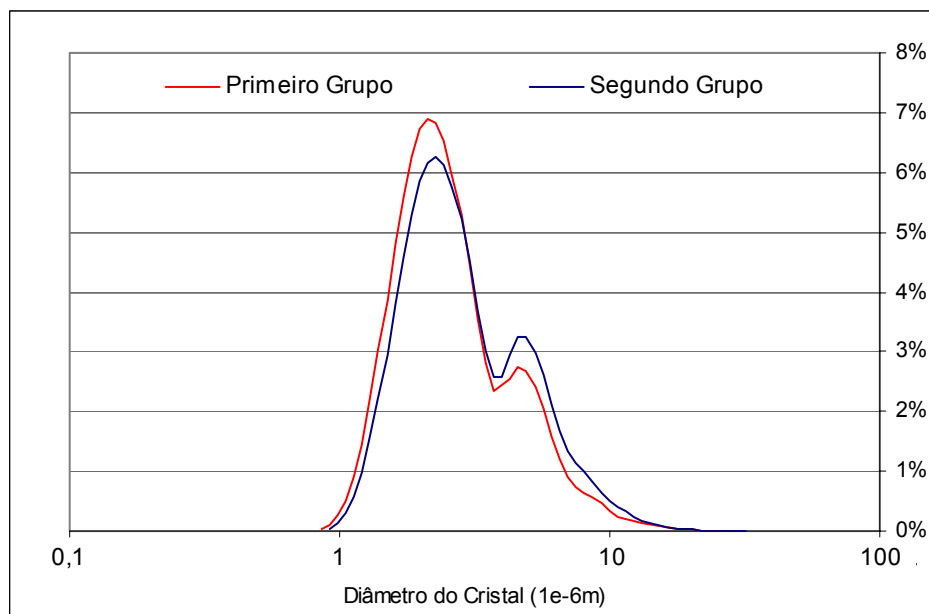


Figura 6.20: DTC das duas amostras de sementes utilizadas no modelo matemático.

Na usina, a dispersão alcoólica de sementes preparada no laboratório apresentava 0,3798 kg de cristais por litro e os operadores inseriam aproximadamente 0,5L por batelada. Para possibilitar que o cálculo dos momentos j das DTCs se adequasse de forma direta à massa de sementes, que podia ser variada nas simulações, foi tomado como massa de referência 1kg de cristais de sementes, com $Kv=0,75$, apresentando as DTCs acima. Os resultados foram :

DTC 1:

$$\begin{aligned}\mu_0 &= 1,14422763449159 \cdot 10^{13} & \mu_1 &= 3,39952897668636 \cdot 10^7 \\ \mu_2 &= 1,40411666417651 \cdot 10^2 & \mu_3 &= 8,43881856540115 \cdot 10^{-4} \\ \mu_4 &= 7,32717419506310 \cdot 10^{-9} & \mu_5 &= 8,85482803882824 \cdot 10^{-14} \\ AM_1 &= 8,68\mu\text{m} & CV_1 &= 62,6\%\end{aligned}$$

DTC 2:

$$\begin{aligned}\mu_0 &= 0,785017506275025 \cdot 10^{13} & \mu_1 &= 2,64653926391607 \cdot 10^7 \\ \mu_2 &= 1,25331883636548 \cdot 10^2 & \mu_3 &= 8,43881856540100 \cdot 10^{-4} \\ \mu_4 &= 7,78121634212497 \cdot 10^{-9} & \mu_5 &= 9,33167993753093 \cdot 10^{-14} \\ AM_2 &= 9,22\mu\text{m} & CV_2 &= 54,8\%\end{aligned}$$

Para ilustrar a utilização do valor de μ_3 no cálculo que permite recuperar o valor da massa de cristais:

$$\begin{aligned}Mc &= \rho_c Kv \mu_3 \\ &= 1580 * 0,75 * 8,43881856540115E-4 \\ &= 1,000000000000040 \text{ kg}\end{aligned}$$

O trabalho de Meireles (1996) cita os estudos de vários autores para sustentar a afirmação de que ocorre a dissolução de parte dos cristais das sementes após a inserção das mesmas no cristalizador. É feita referência ao estudo de Sushchenko e colaboradores (1988) que, com dados de um cristalizador industrial, alegaram que de 50 a 90% das sementes eram dissolvidas. A quantidade de cristais que se dissolve irá depender das condições de operação do equipamento, mas é razoável considerar que sejam os menores os primeiros a serem dissolvidos. Meireles (1996), em suas simulações, considera que os cristais menores que $3\mu\text{m}$ são eliminados com a dissolução. Neste trabalho, por sua vez, foi adotado que a dissolução se dava nos cristais que possuíam diâmetros menores que $2\mu\text{m}$.

O impacto de tal consideração é mínimo no volume de cristais e no diâmetro médio mássico. A Figura 6.21 ilustra, para as sementes do grupo 2, a extensão das mudanças de número e volumétrica sofridas pela DTC após a dissolução dos cristais menores que $2\mu\text{m}$. O volume perdido de cristais é de 1,3% e o diâmetro médio mássico (μ_4/μ_3) aumentou de $9,22\mu\text{m}$ para $9,32\mu\text{m}$, apenas 1%. Em relação ao número de cristais, aproximadamente 28% dissolvem após a inserção das sementes.

Considerou-se também que aproximadamente 25ml da dispersão de sementes eram perdidos na tubulação por onde esta era inserida.

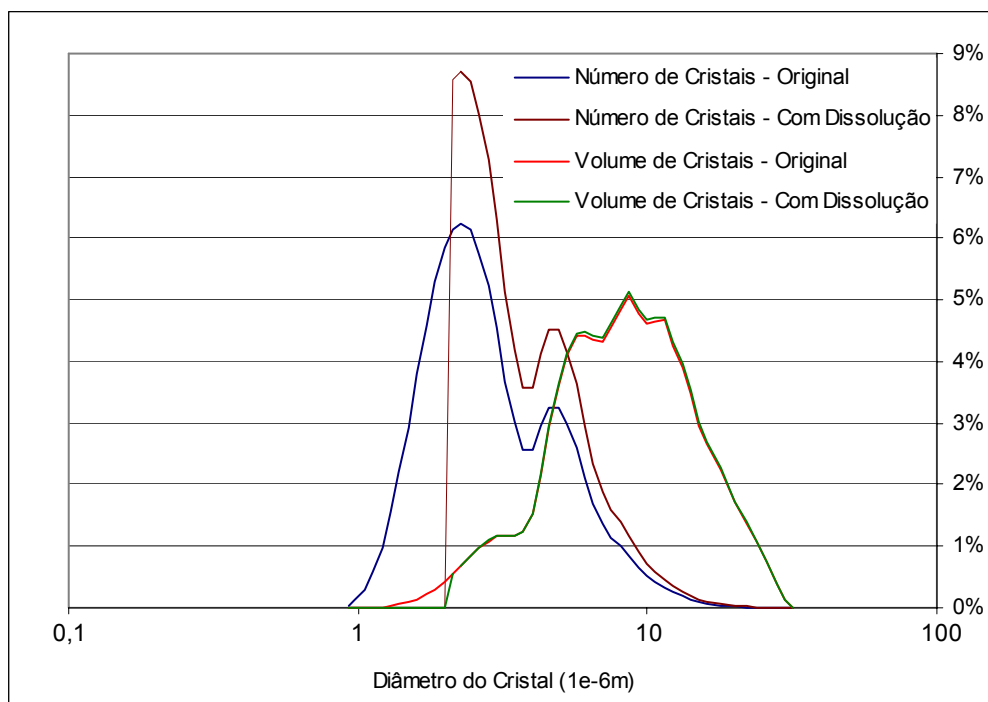


Figura 6.21: Efeito da dissolução de cristais nas DTC's de número e de volume.

Vale a pena observar que qualquer tentativa de controle do tamanho final dos cristais através da manipulação da quantidade de sementes inserida no equipamento irá apresentar uma eficiência muito baixa, já que, desconsiderando a morte de cristais, seria necessário aumentar em oito vezes a quantidade de sementes para reduzir à metade o diâmetro final dos cristais, isto é, uma mesma massa M de sacarose pode gerar N partículas de diâmetro L ou $8N$ partículas de diâmetro $L/2$.

6.3.6. Concretização do Modelo Matemático

Uma vez que as condições iniciais do modelo e suas correlações foram estabelecidas, a estrutura de resolução do modelo é mostrada na Figura 6.22:

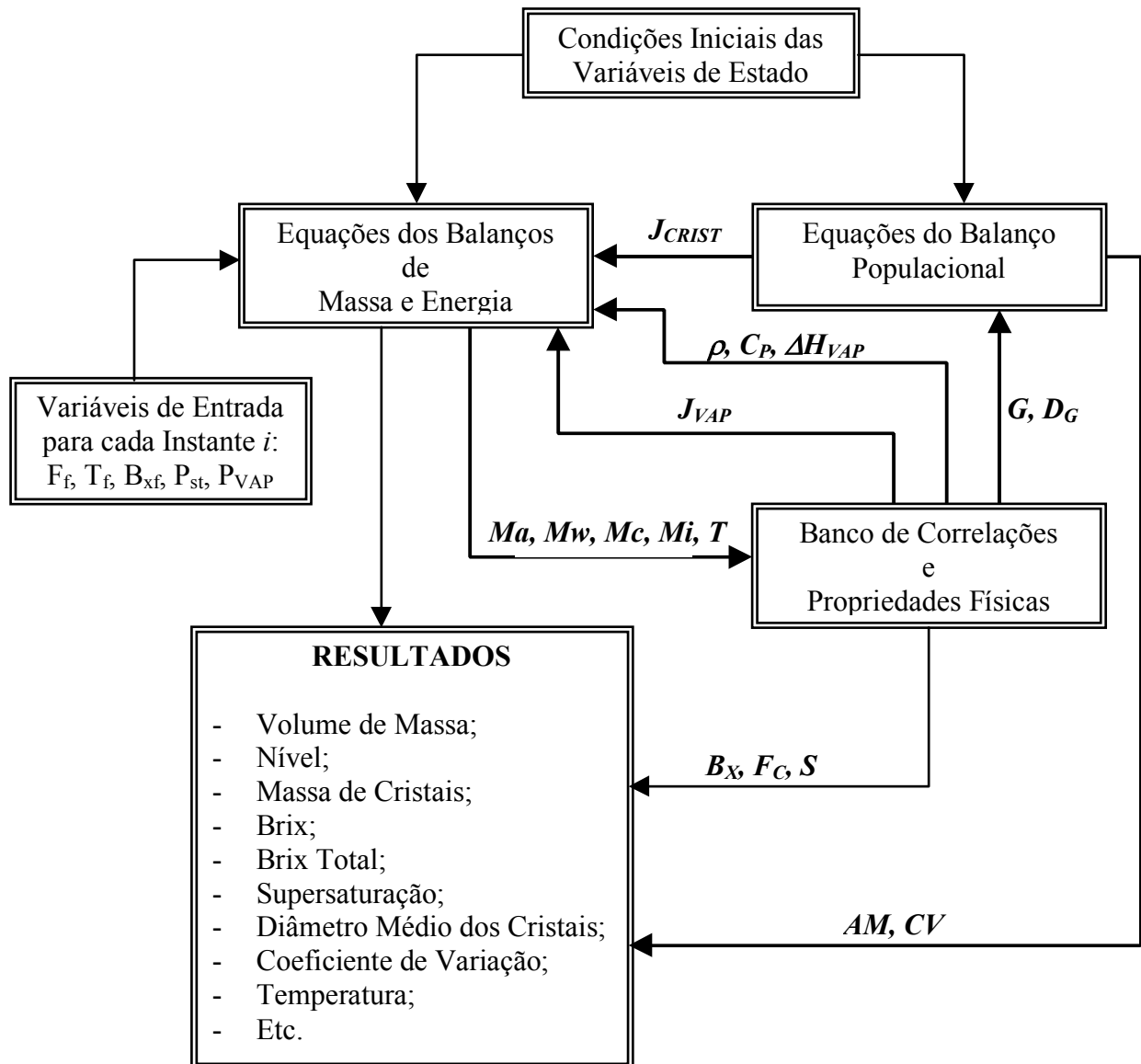


Figura 6.22: Representação da estrutura lógica do modelo matemático utilizado.

O modelo foi desenvolvido de tal forma que a simulação necessitasse apenas do fornecimento dos dados disponíveis na base de dados da usina. Os dados de processo foram armazenados no sistema supervisorío com um intervalo de trinta segundos entre as leituras. Apesar de estarem gravadas as leituras de muitas bateladas, apenas em 10 delas foi possível acompanhar o processo e coletar amostras da massa cozida, do mel e dos cristais. No texto que se segue as referências a estas bateladas serão feitas por meio de algarismos romanos.

As variáveis de entrada do modelo são:

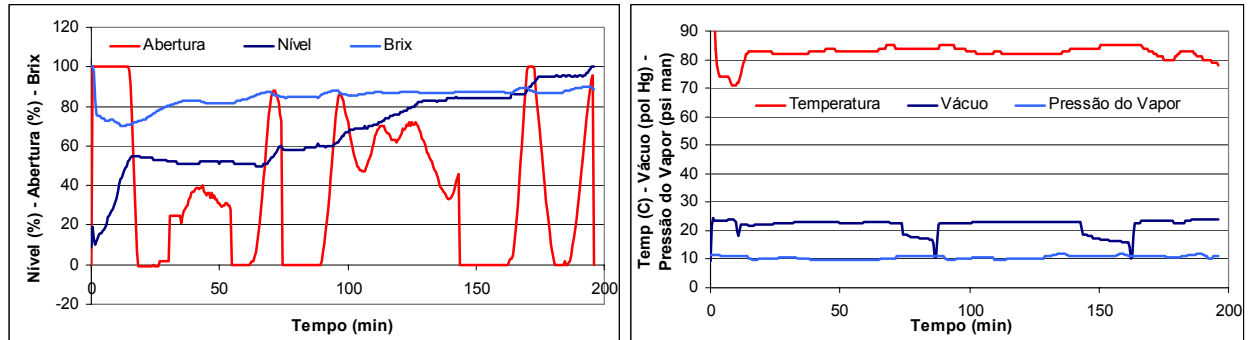
$ABVAX$	Abertura da válvula de controle utilizada para o cálculo de F_F e F_W (Eqs. 19 e 20). Esta é a principal variável do modelo, pois a ela está relacionada toda a sacarose que é alimentada ao cristalizador.
ST_X	Sinal de on/off (0 ou 1) da válvula de xarope, utilizado para o cálculo de F_F (Eq 19).
ST_W	Sinal de on/off (0 ou 1) da válvula de água, utilizado para o cálculo de F_W (Eq 20)
P_{ST}	Pressão do vapor na calandra, utilizada para o cálculo da temperatura T_{ST} – [psi man]
P_{VAP}	Pressão de vácuo no equipamento, para o cálculo da temperatura T_{VAP} – [inHg vácuo]
TmP	Temperatura medida no fundo do equipamento durante o processo. Apenas um valor é utilizado: o sinal de menor valor é a estimativa de T_F e T_W – [°C]
$BrixT$	Brix Total da massa cozida. Apenas um valor é utilizado: o valor encontrado imediatamente antes da fase de concentração é tomado no cálculo das condições iniciais das EDOs dos balanços de massa e energia.

As variáveis que serão utilizadas para checar as estimativas do modelo são:

Nível da massa cozida	Com este sinal é calculado o volume da massa (Eq 21) e este é comparado com a estimativa do modelo.
Temperatura	A temperatura de processo da massa é medida apenas por um sensor localizado no fundo do equipamento. Assim sendo, espera-se que a temperatura T , calculada pelo modelo, se comporte apenas qualitativamente em concordância com esta variável.
Brix Total:	O modelo, através de manipulações com as variáveis do balanço de massa, estima um valor de Brix Total da massa e o compara com esta variável.
Diâmetro médio mássico	O valor calculado pelo modelo é comparado ao determinado experimentalmente.
Fração de cristal	O valor calculado através dos valores de Brix medidos no laboratório, foi comparado com aquela do modelo estimado pelo modelo.

As Figuras 6.23 (a) e (b) mostram o comportamento das principais variáveis das bateladas II e III. As bateladas restantes são apresentadas no Anexo D.

(A) Batelada II:



(B) Batelada III:

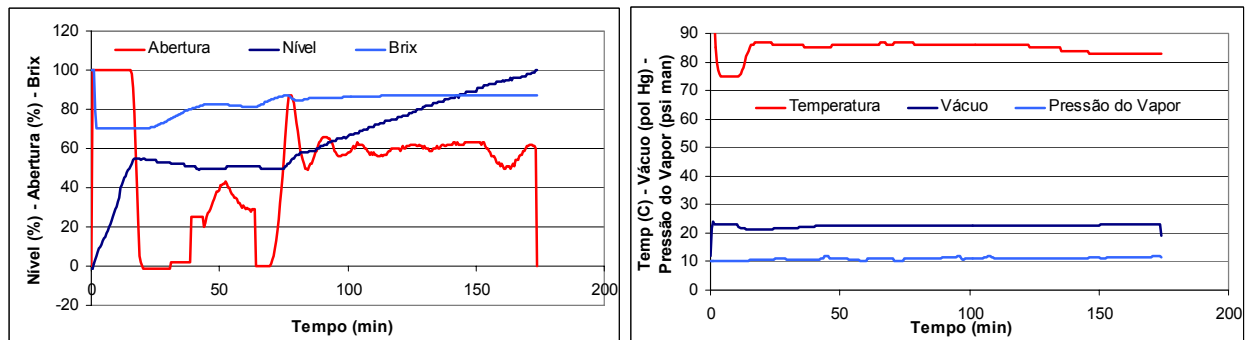


Figura 6.23: Comportamento das principais medidas disponíveis na base de dados das bateladas II e III.

Grande parte das análises que serão feitas sobre os resultados gerados pelo modelo leva em consideração o comportamento da abertura da válvula de controle, *ABVAX*. Nas figuras acima, pode-se observar que esta variável apresentou trajetórias bastante distintas nas duas bateladas em questão. A batelada III experimentou duas paradas na operação do cristalizador, uma delas aos 70 minutos e outra aos 145 minutos. Mesmo sob tais condições, a temperatura, a pressão da calandra e a pressão de vácuo apresentam um comportamento quase constante. O nível se comporta de forma linear na fase de enchimento quando *ABVAX* se encontra próxima de um valor fixo, por sua vez apresenta degraus nos momentos em que *ABVAX* apresenta variações significativas. Por fim, o comportamento do Brix Total, *BrxT*, reflete tanto a forma com que se dá a alimentação quanto as variações na quantidade de calor cedida à massa e ao crescimento dos cristais.

6.3.7. Ajuste dos Parâmetros

O modelo, da forma como foi descrito nas seções anteriores, possuía ainda vários parâmetros cujos valores deviam ser ajustados. O vetor de parâmetros a estimar é:

$$\theta = [U \ K_{VAP} \ K_X \ K_W \ K_g \ K_{DG}]$$

O vetor resposta, Y' , proveniente da resolução do sistema de EDOs é :

$$Y' = [M_a \ M_i \ M_w \ M_c \ T \ \mu_0 \ \mu_1 \ \mu_2 \ \mu_3 \ \mu_4 \ \mu_5]$$

Nesta forma não é possível fazer uma comparação direta do vetor Y' com as variáveis de interesse. Assim, o vetor Y' é manipulado para gerar Y :

$$Y = [V_m \ BrxT \ Brx \ Fc \ T \ AM \ CV]$$

Para a integração do sistema de EDOs foi utilizada a rotina de Runge-Kutta de quarta ordem. Já o procedimento de ajuste do vetor de parâmetros, θ , utilizou o algoritmo de otimização Simplex Nelder-Mead e Levenberg-Marquardt (ambos no ambiente do Matlab), por meio da minimização de uma função objetivo com estrutura de mínimos quadrados. Os valores iniciais foram aqueles citados anteriormente no texto. As tentativas de se obter todos os parâmetros simultaneamente não foram bem sucedidas, os valores ou não convergiam ou geravam simulações que apresentavam comportamentos sem significado físico.

Decidiu-se então que o ajuste dos parâmetros se daria em etapas e seguindo uma heurística ditada pelo pesquisador. Este procedimento foi adotado pois, apesar de não garantir que o vetor de parâmetros ótimo seria obtido, mostrou-se efetivo na geração de soluções não ótimas mas aceitáveis para o problema em questão.

Primeiramente, foi efetuada uma simplificação no modelo: a taxa de cristalização, J_{CRIST} , foi suprimida, e, desta forma, o balanço de sacarose não previa a formação de cristais. Sob estas condições os valores de U , K_{VAP} , K_X e K_W foram ajustados para cada batelada, partindo-se dos valores iniciais citados anteriormente. O motivo desta abordagem foi a constatação que se todas as bateladas utilizassem um mesmo conjunto de parâmetros médios, nenhuma delas teria o balanço de massa e energia devidamente representado, e, assim, os balanços populacionais seriam fortemente afetados, pois a velocidade de crescimento é função da supersaturação e da pureza que, por sua vez, são calculadas através do balanço de massa.

A praticidade desta metodologia vinha do fato das variáveis V_m e $BrixT$, volume da massa cozida e Brix Total, respectivamente, sofrerem o efeito das mudanças em U , K_X e K_W de forma mais pronunciada em momentos específicos da batelada. O parâmetro U foi ajustado observando-se principalmente a fase de concentração; K_W , o período de vinte minutos após a semeadura, onde a concentração era controlada manipulando-se a vazão de água; e K_X , a fase de enchimento, onde mudanças no valor deste parâmetro afetavam a capacidade do modelo em estimar satisfatoriamente V_m .

Em um segundo momento a taxa de cristalização foi re-introduzida no modelo e foram efetuadas pequenas adequações nos valores de U , K_X e K_W de cada batelada, enquanto que paralelamente foi ajustado um conjunto de parâmetros médios (K_{VAP} , K_G e K_{DG}) que seria válido para todas as bateladas – observou-se que apenas um valor de K_{VAP} era suficiente. Nesta etapa, os ajustes dos valores de K_{VAP} , K_G e K_{DG} foram realizados utilizando somente cinco bateladas (a saber: II, III, IV, V e VII), sendo as outras cinco reservadas para validar os valores obtidos.

Em essência, o procedimento descrito visa separar as incertezas das estimativas da vazão de alimentação e da troca de calor, que ocorrem de forma diferenciada em cada batelada, do modelo populacional, que descreve o fenômeno de cristalização que, em tese, ocorre da mesma forma em todas as bateladas.

A avaliação quantitativa do desempenho dos ajustes não pôde se basear totalmente nos critérios de avaliação de desempenho usuais, por exemplo, o erro quadrático médio (MSE). Desta forma, uma desvantagem apresentada por esta abordagem, além do excessivo consumo de tempo para a obtenção de um vetor θ satisfatório, é a dificuldade na determinação do intervalo de confiança dos parâmetros por meio da análise estatística tradicional.

Um comportamento encontrado em todas as bateladas fez com que fosse necessário tratar de modo diferenciado um momento específico da operação do cristizador. A Figura 6.24 mostra o perfil do nível, do Brix Total e da abertura da válvula de controle ao longo da batelada IV. Pode-se notar que depois do período de controle da concentração com a alimentação de água, a abertura da válvula de controle vai a zero. Uma vez que o vapor da calandra continua cedendo calor para a massa cozida, a evaporação da água faz com que a concentração se eleve. Após um período de aproximadamente seis minutos a válvula de controle começa a ser aberta e atinge, em poucos minutos, uma grande abertura (>80%), fazendo com que o nível suba.

O fato que torna este período diferente é o nível subir com uma velocidade que é maior que aquela computada para o restante da operação. Uma justificativa para este comportamento pode ser o efeito que a entrada repentina de uma grande quantidade de xarope pode causar na taxa de evaporação: o xarope alimentado na parte inferior da calandra entra pelos tubos e “extingue” a ebulição que já se encontrava estabelecida, a circulação e a evaporação diminuem e somente após um período de tempo voltam a se estabilizar. O efeito líquido sentido pela massa cozida equivale a uma entrada maior de xarope.

Após uma série de testes, a forma encontrada para reproduzir este efeito foi fazer com que por dez minutos, a partir da reabertura da válvula de controle, fosse admitido o equivalente ao dobro da quantidade de xarope calculada para a abertura disponível. Não há motivo físico que justifique especificamente esta escolha, porém, como pode ser visto na Figura 6.24, o método se mostrou efetivo. Uma abordagem alternativa e equivalente, mas que não foi implementada nos cálculos, seria multiplicar, neste período específico da operação, o coeficiente de troca térmica por uma constante que diminuísse adequadamente seu valor.

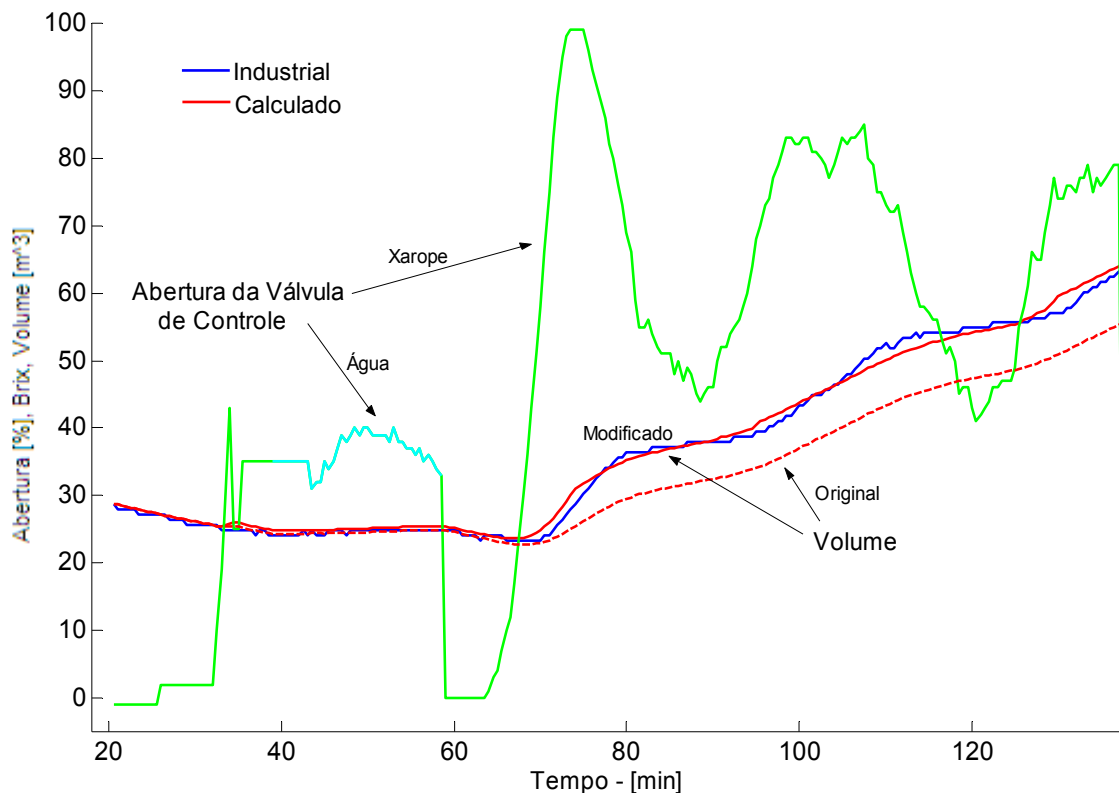


Figura 6.24: Representação da rápida elevação do nível após a reabertura da válvula de controle.

As Tabelas 6.5 e 6.6 apresentam os valores dos parâmetros ajustados com a metodologia descrita:

Tabela 6.5: Valores ajustados dos parâmetros U , K_X e K_W .

	U [kJ/m ² °C h]	K_X	K_W		U [kJ/m ² °C h]	K_X	K_W
Bat_I	2873	1,05	1,10	Bat_VI	3150	0,96	0,86
Bat_II	2660	1,01	0,84	Bat_VII	3050	0,92	0,85
Bat_III	2800	1,01	0,89	Bat_VIII	2922	0,95	0,90
Bat_IV	2850	1,10	0,89	Bat_XI	2850	0,89	0,89
Bat_V	2852	0,95	0,80	Bat_X	2880	0,91	0,89

Tabela 6.6: Valores ajustados dos parâmetros K_{VAP} , K_G e K_{DG} .

K_{VAP}	K_G	K_{DG}
3,0	600	$1,72 \times 10^{-5}$

Os valores médios e os respectivos desvios-padrão são apresentados a seguir:

Tabela 6.7: Valores médios dos parâmetros U , K_X e K_W e seus respectivos desvios-padrão.

	U [kJ/m ² °C h]	K_X	K_W
Valor Médio	2888,7	0,975	0,891
Desvio Padrão	133,43	0,0664	0,0798

Pode-se notar que a dispersão ao redor do valor médio não é grande; percentualmente, os desvios-padrão são menores que 9%, chegando a ser menor que 5% para o coeficiente de troca térmica. A sensibilidade do modelo em relação às variações nestes parâmetros é exemplificada nas figuras a seguir.

Nas Figuras 6.25, 6.26 e 6.27 são mostrados os perfis de concentração e volume da massa cozida ao longo da Batelada IV. A representação da abertura da válvula de controle e do momento no qual se deu a semeadura (pequeno círculo vermelho apresentado próximo ao eixo das abscissas) estão expostos no conjunto para permitir uma visão global do comportamento da operação. Pretende-se, pela análise destas figuras, avaliar os efeitos dos valores de U , K_X e K_W sobre os perfis calculados.

Na Figura 6.25 são mostrados os efeitos da variação do valor ajustado de U , $2850 \text{ kJ/h m}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$, no intervalo de -10% a $+10\%$ deste valor.

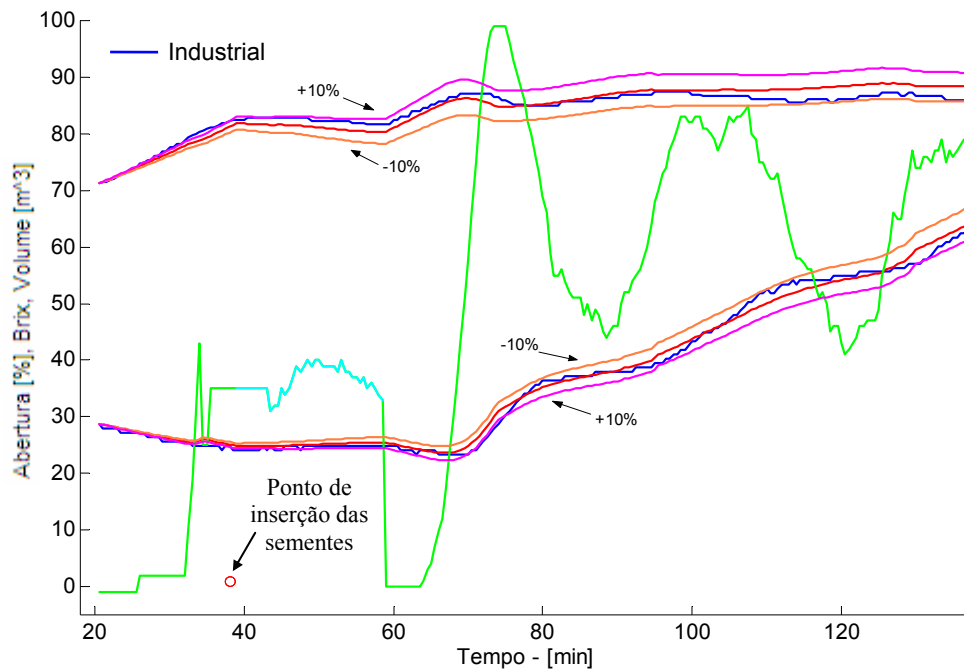


Figura 6.25: Influência da variação de U sobre o volume e o Brix Total.

Como comentado na descrição da metodologia de ajuste dos parâmetros, as mudanças que ocorrem no valor de U afetam os resultados desde a fase de concentração, antes da inserção das sementes, até o final da batelada.

Pela Figura 6.26 é possível notar que as variações no parâmetro K_W geram conseqüências mais brandas a partir da semeadura, provavelmente devido ao curto período em que a água é admitida na operação (apenas vinte minutos).

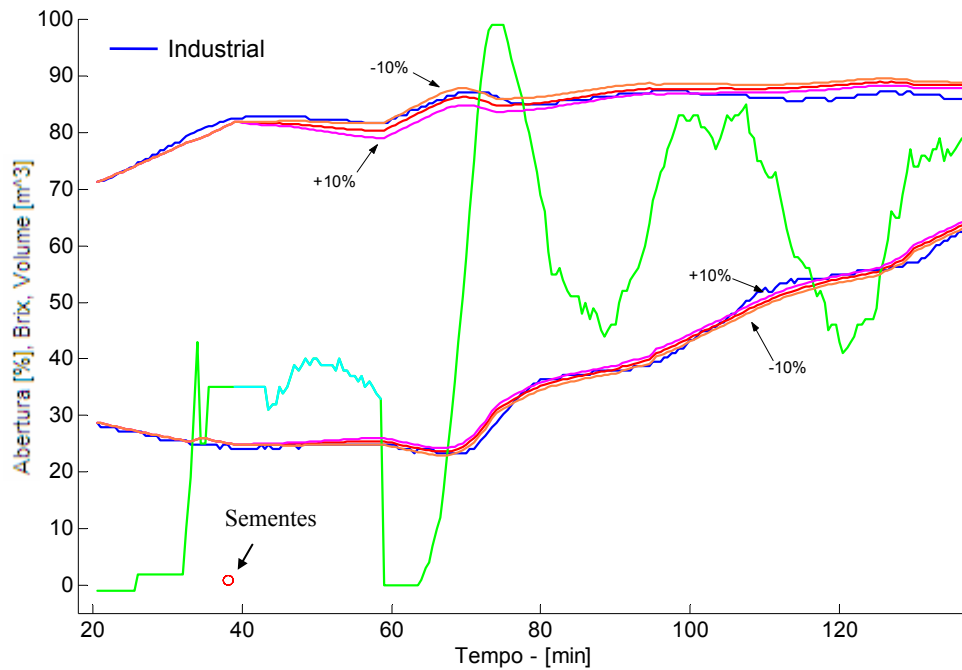


Figura 6.26: Influência da variação de K_w sobre o volume e o Brix Total.

Analisando-se a Figura 6.27, fica visível que os resultados do modelo são bastante sensíveis às mudanças no valor do parâmetro K_x . Mesmo sua influência sendo mais significativa no período de enchimento do equipamento, a variação na estimativa do volume de massa cozida é maior que para mudanças no valor de U . Este fato, por si só, mostra como os resultados gerados pelo modelo são dependentes de uma boa estimativa da vazão de entrada.

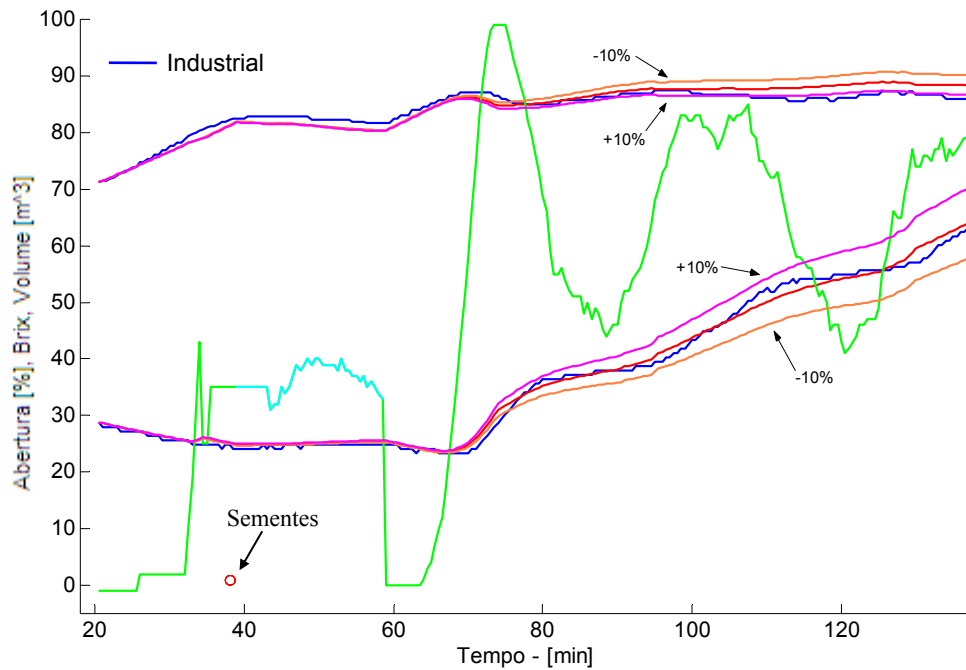


Figura 6.27: Influência da variação de K_X sobre o volume e o Brix Total.

A análise das Figuras 6.28 e 6.29 possibilita avaliar como modificações no valor das variáveis K_G e K_{DG} podem afetar a estimativa do tamanho dos cristais. Para esta análise foram utilizados os dados da Batelada III.

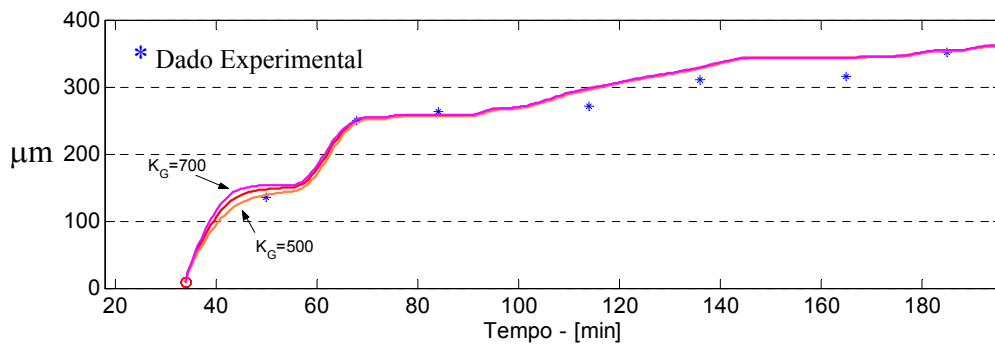


Figura 6.28: Influência da variação de K_G na estimativa do diâmetro médio dos cristais.

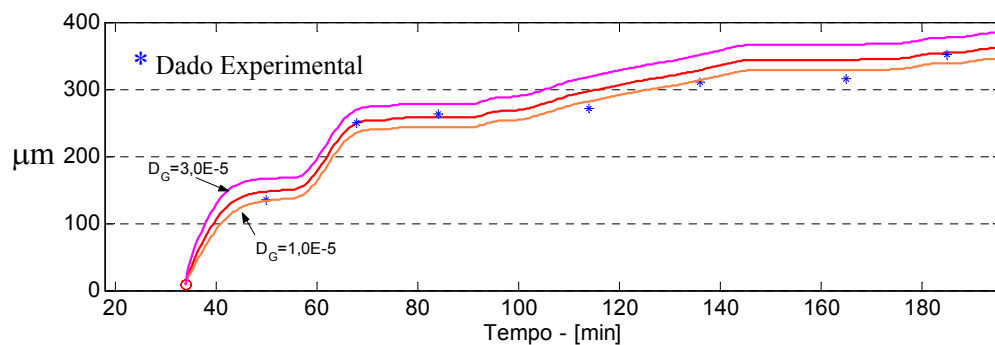


Figura 6.29: Influência da variação de K_{DG} na estimativa do diâmetro médio dos cristais.

Fica claro pelo gráfico apresentado na Figura 6.29 que o ajuste apropriado do valor do parâmetro K_{DG} é decisivo para que o modelo estime adequadamente o diâmetro dos cristais (AM). Variações tanto de K_G quanto de K_{DG} praticamente não afetam os perfis da concentração e de volume, e por este motivo não foram mostrados aqui.

O efeito de K_{VAP} é mais visível no perfil de temperatura da massa durante a operação. A Figura 6.30 mostra como os resultados são afetados por variações neste parâmetro. Vale notar que é de se esperar que os valores industriais de temperatura, medidos no fundo do equipamento, sejam maiores que os valores de temperatura média calculados pelo modelo, porém o comportamento qualitativo deve ser bem representado.

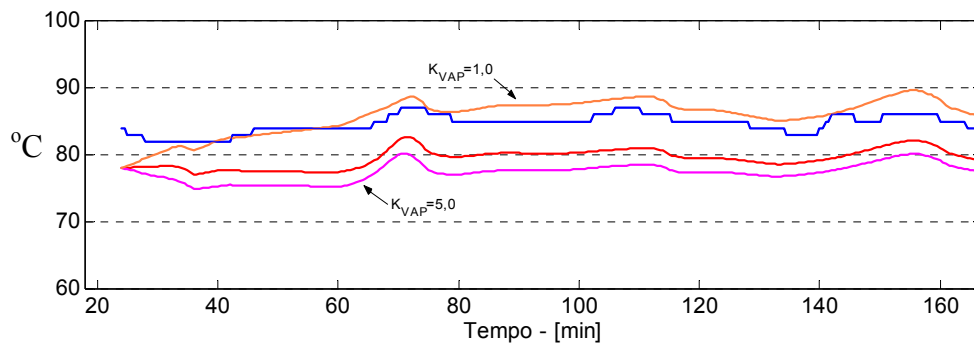


Figura 6.30: Influência da variação de K_{VAP} na estimativa da temperatura da massa cozida.

Como citado anteriormente, K_{VAP} se relaciona com a ocorrência de um certo grau de superaquecimento na massa cozida e com o efeito deste na taxa de evaporação, que ocorre por meio de um mecanismo de regulação da temperatura. A Figura 6.30 mostra que a diminuição excessiva no valor de K_{VAP} afeta a capacidade do modelo de gerar um perfil de temperatura com um comportamento semelhante ao da variável industrial.

6.4. Resultados das Simulações

Nesta seção serão apresentadas as comparações entre as respostas do modelo matemático e os valores obtidos no ambiente industrial. As discussões serão direcionadas principalmente pela apresentação de resultados típicos e pelos comentários a respeito de situações onde a estimativa do modelo não foi satisfatória. De todo modo, todos os resultados estarão listados no Anexo E.

Analisando-se primeiramente a qualidade das respostas do modelo em relação ao balanço de massa, especificamente os valores de V_m e $BrxT$, observa-se que os resultados para todas as bateladas se mostraram aceitáveis. As Figuras 6.31 e 6.32 são representações de duas bateladas com histórias de operação completamente diferentes: a batelada VIII se deu de maneira ininterrupta e com a abertura da válvula de controle, *ABVAX*, mantendo-se próxima a um valor médio durante toda a fase de enchimento; já a batelada III sofreu duas paradas de operação e *ABVAX* apresentou valores extremos. Porém, mesmo para esta duas situações distintas as estimativas para o volume no cristalizador, V_m , e para o Brix Total da massa cozida, $BrxT$, foram bastante satisfatórias.

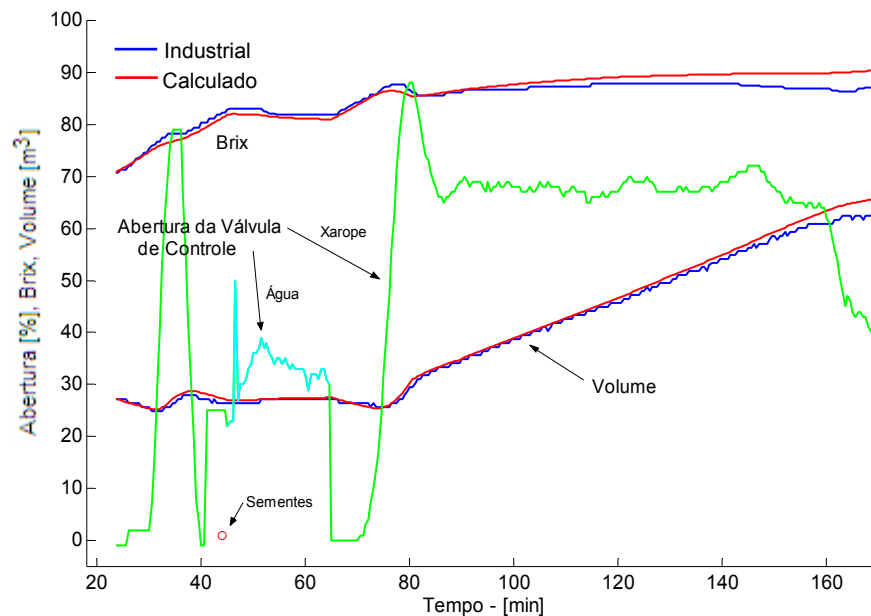


Figura 6.31: Evolução das estimativas de V_m e $BrxT$ para a Batelada VIII.

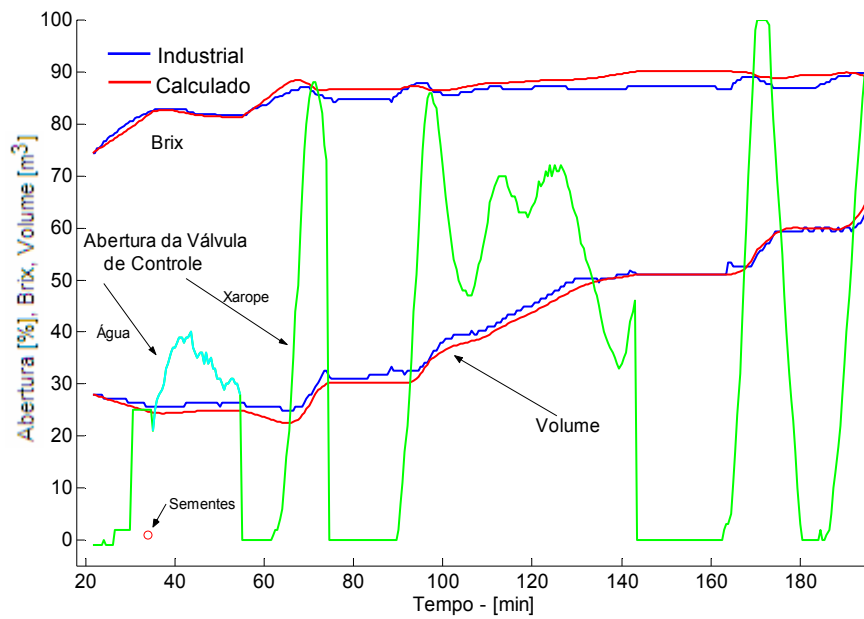


Figura 6.32: Evolução das estimativas de V_m e $BrxT$ para a Batelada III.

Um dos motivos para este bom desempenho é o fato dos parâmetros U , KX e KW terem sido ajustados para cada uma das bateladas individualmente.

Neste ponto, vale observar que o valor de Brx apresentado até o momento é o $BrxT$ da massa - $BrxT$, ou seja, a massa de cristal está sendo tratada como se fosse sacarose dissolvida. A Figura 6.33 mostra o comportamento típico do Brx da solução quando apenas a fase líquida é considerada para o cálculo - Brx . Até o momento da sementeira Brx e $BrxT$ são iguais, porém com a migração da sacarose dissolvida para os cristais o Brx da solução se mantém baixo.

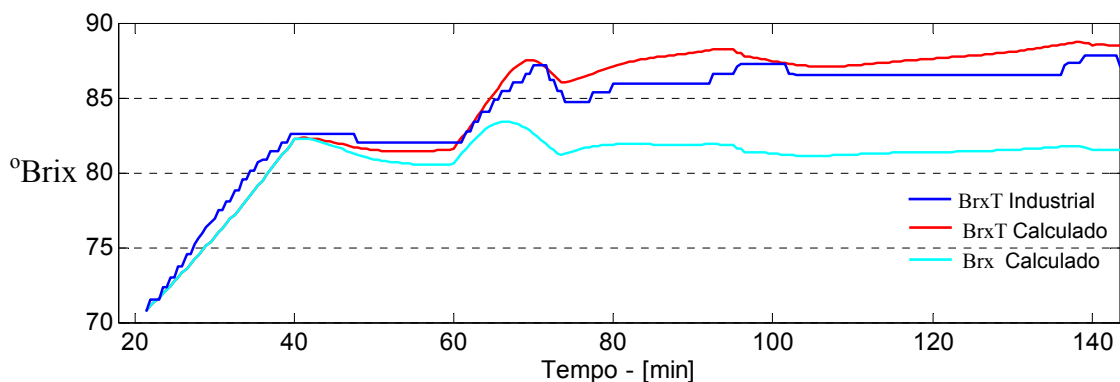


Figura 6.33: Evolução das estimativas de Brx e $BrxT$ para a Batelada I.

Uma vez que na usina a distinção entre Brx e BrxT nem sempre é clara, é comum a referência a soluções com até 89°Brix, o que é um equívoco, pois uma solução com esta concentração geraria cristais espontaneamente.

Apesar da importância da supersaturação no controle do processo de cristalização, esta variável não pode ser calculada através do sinal de BrxT disponível na planta. O acompanhamento da supersaturação ao longo da operação apenas seria possível com a medição do valor de Brx.

A Figura 6.34 mostra a abertura da válvula de controle e o perfil da estimativa da supersaturação (em percentagem) ao longo da batelada VIII calculada pelo modelo. É possível notar que com a abertura rápida da válvula de controle, por volta de 70 minutos, a concentração da solução cai, o que acarreta a diminuição da supersaturação.

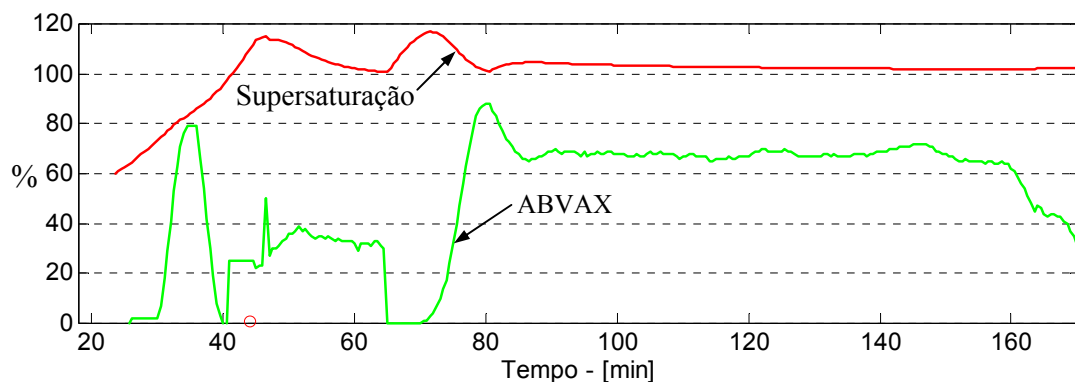


Figura 6.34: Evolução de *ABVAX* e da estimativa da supersaturação (%) da Batelada VIII.

A Figura 6.35 mostra um caso extremo que ocorre na batelada II, onde a diminuição da concentração levou, por pouco tempo, a solução para uma região de supersaturação menor que 1 (<100%). O mesmo problema pode ser visto nas bateladas que passaram por uma parada na operação: durante este período de interrupção os cristais continuaram a crescer, fazendo com que a supersaturação se aproximasse da unidade. Porém, com o retorno da operação normal a válvula de controle era aberta e atingia, em poucos minutos, uma grande abertura, fazendo com que a concentração, já baixa, caísse ainda mais. Em situações como estas, o modelo, que não prevê a dissolução dos cristais, assumia $G=0$.

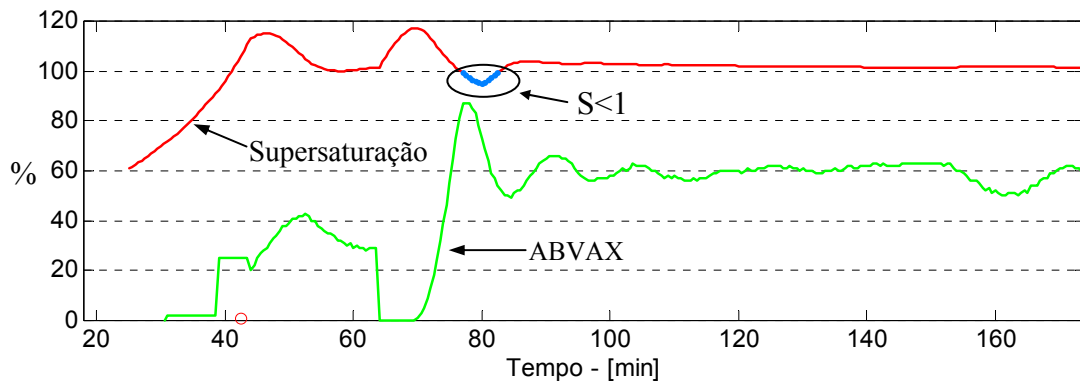


Figura 6.35: Evolução de *ABVAX* e da estimativa da supersaturação (%) da Batelada II.

A estimativa do modelo para a temperatura da massa cozida é mostrada para um caso típico na Figura 6.36. É de se esperar, pelas considerações feitas anteriormente, que o valor da temperatura calculada pelo modelo seja menor que a temperatura indicada na base de dados da usina, uma vez que não computa a elevação do ponto de ebulição devido à carga hidrostática, EPE_H . Em geral, o comportamento qualitativo da temperatura calculada acompanhou o da temperatura da planta em todas as bateladas.

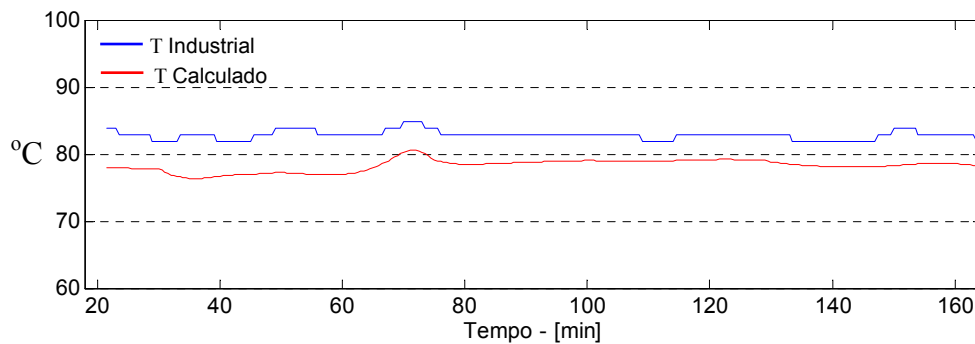


Figura 6.36: Comparação dos valores industriais e calculados da temperatura, T , para a Batelada V.

Em relação ao diâmetro médio mássico do cristal, AM , o modelo conseguiu, na maioria dos casos, gerar estimativas concordantes com os valores medidos experimentalmente, principalmente para aquelas amostras tomadas próximas do final das bateladas. Por sua vez, algumas amostras coletadas logo depois da semeadura foram representadas menos precisamente. As Figuras 6.37 e 6.38 apresentam as estimativas do diâmetro médio dos cristais para as bateladas III e IV.

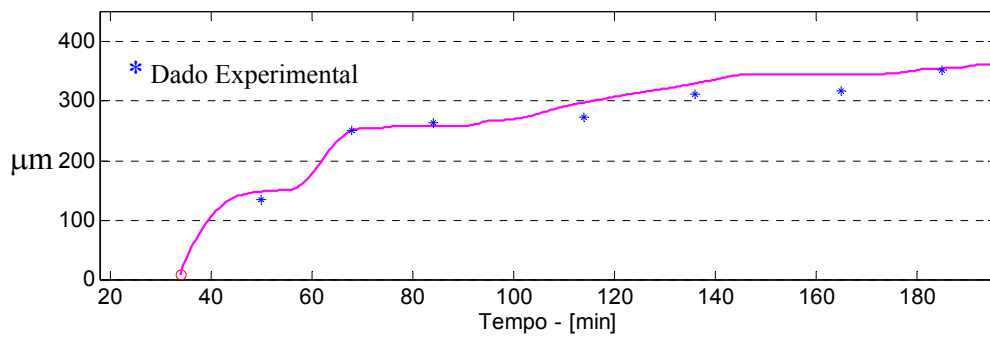


Figura 6.37: Estimativas do diâmetro médio dos cristais para a batelada III.

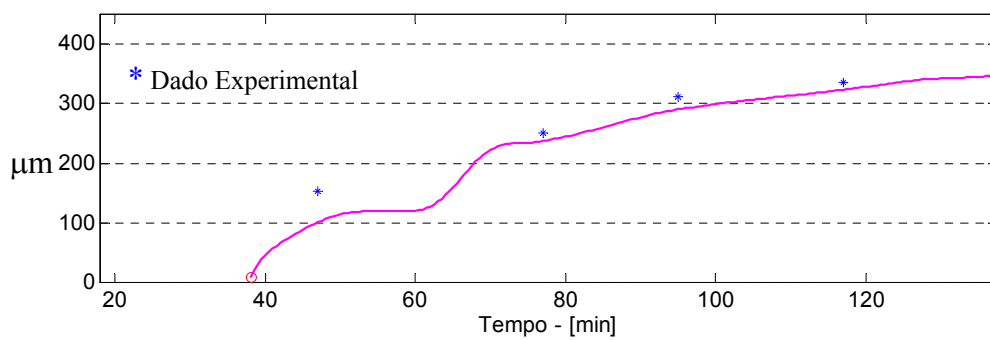


Figura 6.38: Estimativas do diâmetro médio dos cristais para a batelada IV.

O coeficiente de variação (CV) dos cristais coletados ao final de todas as bateladas é representado na Figura 6.39. Pode-se notar que o modelo é capaz de prever a faixa do CV com sucesso.

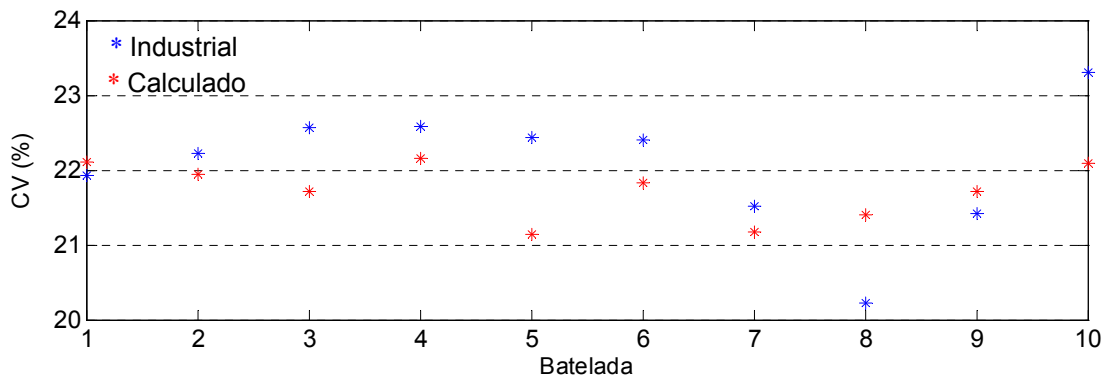


Figura 6.39: Estimativas do CV dos cristais ao final de todas as bateladas.

Uma variável estimada pelo modelo que obteve uma concordância apenas razoável com os valores experimentais foi a fração de cristais acompanhada ao longo da operação do cristalizador 10. As Figuras 6.40 e 6.41 mostram as estimativas do modelo e os pontos experimentais para as bateladas III e VIII.

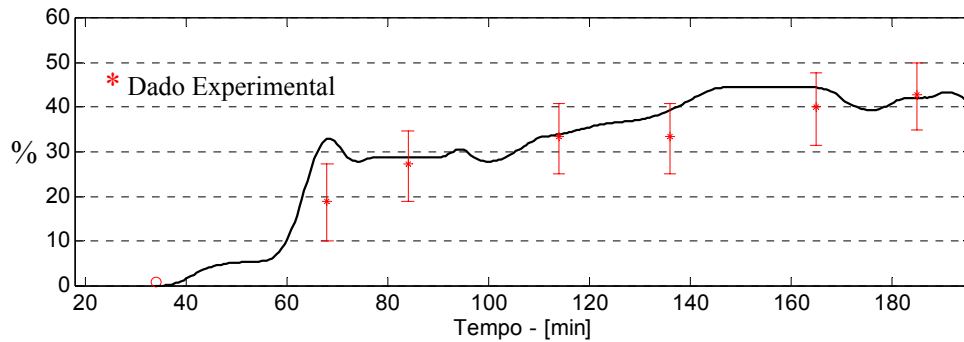


Figura 6.40: Estimativas da fração de cristais para a batelada III.

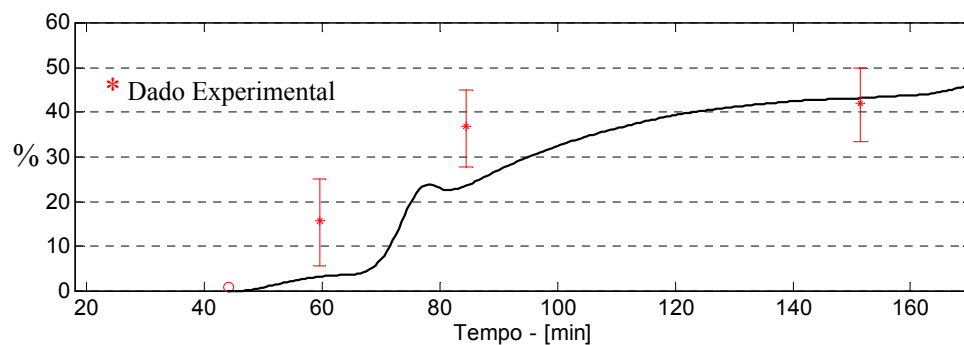


Figura 6.41: Estimativas da fração de cristais para a batelada VIII.

O motivo mais provável para este fato parece ser a incerteza dos valores utilizados pelo pesquisador no cálculo da determinação experimental da fração de cristais: a fração de cristais é estimada utilizando o valor de Brix Total da massa cozida e o valor de Brix do mel, através da definição de F_c ; $F_c = 100 * (BrxT - Brx) / (100 - Brx)$. Como citado anteriormente, a determinação do Brix traz, devido à diluição, uma incerteza de $\pm 1^\circ \text{Brix}$ que, quando incorporada nos cálculos, leva aos intervalos de valores representado na Figura 6.41.

Vários outros fatores não comentados até o momento, e que não estão previstos no modelo desenvolvido, podem afetar os resultados como, por exemplo, o modelo não faz nenhuma consideração a respeito da influência da movimentação da massa cozida sobre o desempenho da cristalização. Um momento em que este fator é importante é na retomada de operação após uma parada: a massa mais fria e compactada

irá necessitar de um certo período até atingir uma boa movimentação efetiva e, durante este período, tanto a troca térmica quanto a evaporação de água será prejudicada.

Um outro fator, visto como crítico, é a consideração de que um valor médio de U pode ser utilizado para representar esta variável que sofre influência das condições de operação, do estado de movimentação da massa cozida, da temperatura e da fração de cristais. Sabe-se que o valor de U decresce ao longo da batelada, sendo este efeito mais sentido em cristalizadores que não possuem agitadores mecânicos. Nesta situação, a utilização de correlações empíricas encontradas na literatura podem fornecer uma estimativa do comportamento desta variável.

Por fim, um fato que influencia negativamente o desempenho do cristalizador 10 é o comportamento observado da válvula de controle. As Figuras 6.42a e 6.42b mostram a correlação entre a ação de controle da válvula e a diferença entre o Brix medido e seu *setpoint* (representados nas figuras de forma escalonada). Pode-se notar que em alguns momentos a válvula, devido ao ajuste dos parâmetros do controlador, gera um comportamento oscilatório na concentração, o que sugere que o controlador deve ser sintonizado adequadamente.

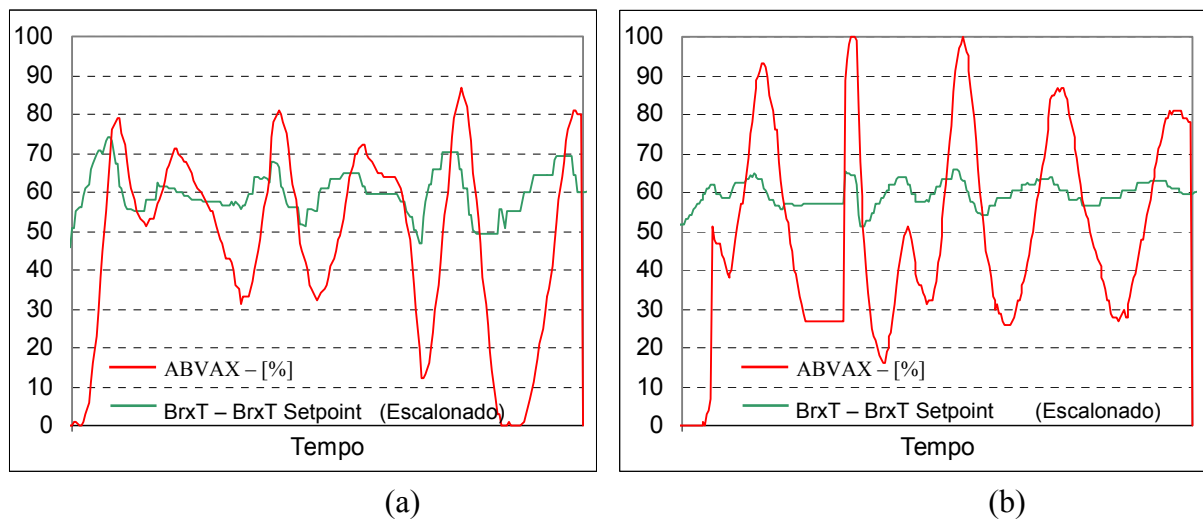


Figura 6.42: Correlação entre a ação de controle da válvula e a diferença entre o Brix medido e seu *setpoint*.

6.5. Implementação Visual do Modelo

O modelo matemático descrito nas seções anteriores foi implementado na forma de um programa gráfico (Figura 6.43) que possibilita a interação do usuário com as variáveis de um cristalizador. Os parâmetros deste cristalizador podem ser ajustados pelo usuário ou utilizar os valores advindos da análise dos dados coletados na Usina São Martinho.

O usuário interage com o programa manipulando a quantidade de vazão de alimentação, a vazão de vapor de aquecimento, a quantidade de sementes e o tempo no qual estas serão inseridas no equipamento. Como respostas, são mostradas, na forma de gráficos, a evolução do volume total de massa cozida, a supersaturação, o brix, a fração de cristais e o diâmetro médio dos cristais.

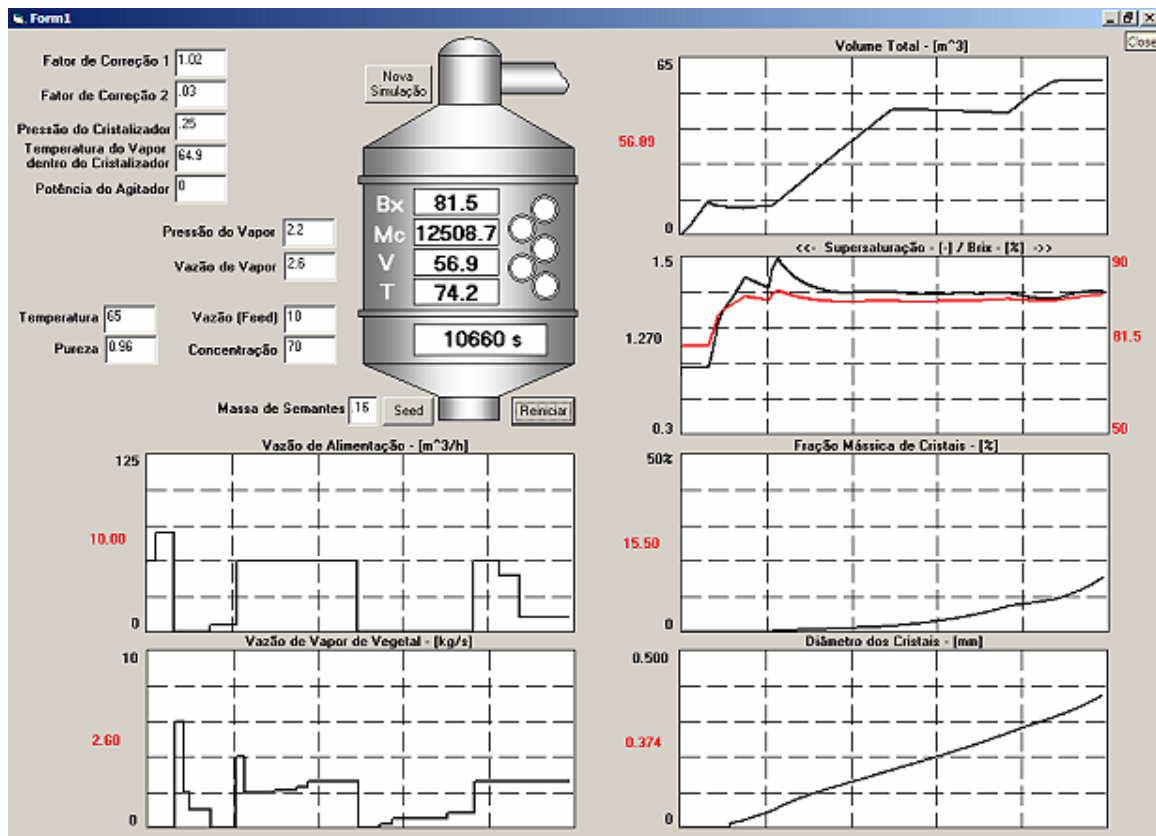


Figura 6.43: Tela de entrada do programa que calcula o modelo dinâmico do cristalizador.

6.6. Conclusões da Etapa de Cristalização

Assim como na etapa de evaporação a primeira fase do processo de modelagem do cristalizador foi a descrição detalhada do ambiente e do equipamento que seria o objeto do estudo.

Foi desenvolvido nesta fase do trabalho um modelo dinâmico de um cristalizador industrial capaz de, com dados da usina, inferir o perfil das variáveis de interesse ao longo dos ciclos de operação do equipamento. Vale observar que o modelo desenvolvido era baseado totalmente em uma abordagem determinística, o que é um fator complicador uma vez que o fenômeno da cristalização é complexo e dependente de muitas variáveis de processo, que no caso deste trabalho não se encontravam diretamente disponíveis no ambiente industrial.

Um fato marcante em relação à modelagem da cristalização do açúcar foi a grande dispersão de informações encontrada na literatura sobre os parâmetros a serem utilizados, o que fez com que a qualidade de predição do modelo fosse fortemente dependente do ajuste dos mesmos.

Mesmo valendo-se de fortes considerações simplificadoras e de aproximações no lugar de medidas exatas de variáveis chaves (como no caso da vazão de alimentação), o modelo desenvolvido foi capaz de gerar resultados comparáveis com aqueles obtidos durante a operação das bateladas que tiveram sua operação acompanhada. Os resultados sugerem que para que o modelo possa desenvolver toda sua potencialidade seria necessário que a vazão de entrada do xarope fosse medida na instalação industrial, uma vez que é esta variável a que mais insere incerteza nos cálculos.

O modelo mostrou-se útil ao determinar ao longo da operação do cristalizador variáveis que normalmente só são medidas pelo laboratório da usina ao final das bateladas. Este fato em si, abre muitas possibilidades de utilização do modelo para o monitoramento e controle do processo. Paralelamente, o programa visual desenvolvido pode ser utilizado para treinamento de pessoal e em simulações de novas estratégias de operação do equipamento.

6.7. Sugestões para Trabalhos Futuros na Área de Cristalização

A existência de um grande número de usinas produtoras de açúcar no Brasil e o pequeno número de trabalhos relativos ao desenvolvimento de modelos da etapa de cristalização desta indústria abre uma vasta gama de possibilidade de estudos. Baseando-se na experiência obtida neste trabalho podem ser sugeridos os seguintes tópicos como objetos de estudo:

- Estudo da influência das impurezas no crescimento dos cristais – teste e aprimoramento da metodologia utilizada para a obtenção dos parâmetros da equação do coeficiente de saturação, SC ;
- Desenvolvimento de modelos dinâmicos que tenham os parâmetros cinéticos da cristalização ajustados por estimadores ao longo do processo (filtros de Kalman ou através de redes neurais);
- Aplicação dos modelos em instalações industriais, gerando estimativas em paralelo com a aquisição das variáveis do processo;
- Desenvolvimento de modelos que incorporem os fenômenos populacionais da aglomeração, nucleação e dissolução dos cristais.
- Estudos de controle ótimo da operação do cristalizador pela determinação do perfil ótimo de alimentação do equipamento.
- Assim como na etapa de evaporação, realizar estudos no sentido de determinar o comportamento do coeficiente de troca térmica ao longo das bateladas, dada a extensão da influência deste parâmetro nos resultados do modelo.

7. CONCLUSÕES

Foi observado que existe uma grande dificuldade em se empregar os dados industriais da forma com que estes são armazenados nas usinas. Porém o pesquisador crê que este tipo de “problema” em parte é benéfico e surge somente no momento em que ocorre uma parceria entre o meio acadêmico e o industrial, como foi o caso deste trabalho. Dentro do ambiente da usina os dados gravados do processo possuem sentido e utilidade da forma em que se encontram, porém estes mesmos dados, sob a ótica da engenharia e do modelamento matemático, se mostram apenas relacionados com as grandezas que deveriam estar sendo medidas. Deste modo, um trabalho como este possui a característica de fazer com que estas duas visões se complementem e se adaptem mutuamente.

A metodologia de trabalho utilizada no desenvolvimento das atividades de pesquisa se mostrou adequada e pode servir de referência para futuros trabalho que envolvam a coleta de dados em usinas de açúcar e a modelagem das etapas do processo.

As abordagens utilizadas na modelagem da etapa de evaporação da Usina Santa Adélia tornaram possível a inferência das variáveis de estado do processo. A primeira abordagem (modelo do estado estacionário) foi capaz de gerar estimativas das vazões e concentrações dos efeitos intermediários dentro das faixas usuais encontradas na planta industrial. Um dos resultados relevantes foi a indicação de que, no período acompanhado, aproximadamente 73% da quantidade de vapor que era gerada nos pré-evaporadores era sangrada do EME para a fábrica. Incorporando o modelo estacionário, foi desenvolvida uma interface gráfica que representava esquematicamente o equipamento industrial. O modelo dinâmico desenvolvido também gerou boas estimativas da concentração da última caixa, além de permitir que todas as propriedades das correntes do processo fossem calculadas. Por fim, os resultados obtidos com as redes neurais foram encorajadores e sugerem que estas podem ser uma boa alternativa como *software* sensores da concentração do último efeito de evaporação.

Na etapa de cristalização da Usina São Martinho foi desenvolvido um modelo dinâmico, baseado em uma abordagem determinística, do cristizador de granagem. O modelo que foi capaz de, com dados da usina, inferir o perfil das variáveis de interesse ao longo dos ciclos de operação do equipamento, e também gerou

resultados comparáveis com aqueles obtidos durante a operação das bateladas que tiveram sua operação acompanhada; o que abre muitas possibilidades de sua utilização para o monitoramento e controle do processo. Os resultados também sugerem que para que o modelo possa mostrar toda sua potencialidade seria necessário que a vazão de entrada do xarope fosse medida na instalação industrial, uma vez que é esta variável a que mais insere incerteza nos cálculos. Assim como na etapa de evaporação, foi desenvolvido um programa visual com as rotinas do modelo do cristalizador. Este programa tem potencial para ser utilizado no treinamento de pessoal e em simulações de novas estratégias de operação do equipamento.

Os modelos e os programas desenvolvidos neste trabalho possuem uma ampla aplicabilidade: estimar ou confirmar o desempenho dos equipamentos, acompanhar variáveis que não são diretamente medidas no processo, estimar a quantidade de vapor sangrado dos evaporadores e a quantidade de vapor utilizado pelos cristalizadores, treinar os operadores para novas situações de operação, detectar erros e suas fontes, estimar parâmetros de processo, auxiliar em projetos de expansão de capacidade, ajudar nas tomadas de decisão, tanto técnicas como de gerenciamento da produção, etc

Pelo que foi exposto, este trabalho foi bem-sucedido em alcançar os objetivos inicialmente estabelecidos e os resultados obtidos revelaram o grande potencial de utilização dos modelos desenvolvidos para a inferência das variáveis mais importantes das etapas de evaporação e cristalização. Assim, a metodologia utilizada neste trabalho e os modelos aqui desenvolvidos abrem caminho para estudos mais específicos e aprofundados.

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGUIAR, H. C.; MACIEL FILHO, R. Neural network and hybrid model: a discussion about different modeling techniques to predict pulping degree with industrial data. *Chemical Engineering Science*, Vol. 56, pp. 565-570, 2001.
- ASSIS, A. J.; MACIEL FILHO, R. Soft sensors development for on-line bioreactor state estimation. *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 24, pp. 1099-1103, 2000.
- BENNE, M.; GRONDIN-PEREZ, B.; LAN-SUN-LUK, J. D.; CHABRIAT, J. P. Modelling cane sugar evaporation and crystallisation. Part 1: A new approach using neural networks. *Inst. Sugar Journal*, Vol. 101, No. 1208, pp. 418-422, 1999. (a)
- BENNE, M.; GRONDIN-PEREZ, B.; LAN-SUN-LUK, J. D.; CHABRIAT, J. P. Modelling cane sugar evaporation and crystallisation. Part 2: A new approach using neural networks. *Inst. Sugar Journal*, Vol. 101, No. 1209, pp. 457-461, 1999. (b)
- BOLMSTEDT, U. Simulation of the steady-state and dynamic behaviour of multiple effect evaporation plants - Part 2: dynamic behaviour. *Computer Aided Design*, v. 9, n. 1, p. 29-39. 1977.
- BRAGA FILHO, W. Transmissão de calor. Livro. Pg 7. Editora Pioneira Thomson Learning. 2004
- BRETSCHNEIDER, P. K.; DANDAR, A. La mesure et le calcul des propriétés physico-chimiques des solutions sucrées. *La Sucrierie Belge*, Vol. 100, pp. 45-59, 1981.
- CAMARGO, C. A. Manual de recomendações para conservação de energia na indústria do álcool e açúcar, IPT, 1990.
- EILERS, P.H.C. *A perfect smoother*. *Analytical Chemistry*, Vol. 75, No. 14, pg. 3631-3636, 2003.
- EVANS, L. B, Trearchis G. P., Jones, C. *Simulation of a vacuum pan sugar crystallizer - Part 1*. *Sugar y Azucar*, v. 65 (10), p.19-22, 1970 a.
- EVANS, L. B, Trearchis G. P., Jones, C. *Simulation of a vacuum pan sugar crystallizer - Part 2*. *Sugar y Azucar*, v. 65 (12), p.19-25 1970 b.
- FEYO DE AZEVEDO, S. e CHORÃO, J. On-line monitoring of white sugar crystallization through software sensors. *Sugar Inst. Tech. Paper 646*, 1993.
- FEYO DE AZEVEDO, S. F.; DAHM, B.; OLIVEIRA, F. R. Hybrid modelling of biochemical processes: a comparison with the conventional approach. *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 21 Suppl, pp. s751-s756, 1997.
- FONTAINE, J. L.; GERMAIN, A. Model-based neural networks. *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 25, pp. 1045-1054, 2001.

- FREITAS, A.M.B., LANDGRAF, F.J.G., NYVLT, J., GIULIETTI, M. *Effect of magnetic field on the crystallization of zinc sulfate*. Braz. J. Chem. Eng., Vol. 17, No 1, São Paulo, Março 2000.
- FRIEDMAN, P. & Perez de Alejo, H. The simulation of a sugar factory. International Sugar Journal. Havana, Cuba, v. 81, n. 963, p. 67-71, 1979.
- FU, P. C.; BARFORD, J. P. A hybrid neural network – first principles approach for modelling of cell metabolism. *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 20, No. 6/7, pp. 951-958, 1996.
- GARCIA, A. G. *Modelling and simulation of batch processes: crystallisation section of a sugar factory*. 1st Meeting of EcosimPro Users, UNED, Madrid, 3-4 May 2001
- GEORGIEVA. P.; MEIRELES, M. J.; FEYO DE AZEVEDO, S. Knowledge-based hybrid modelling of a batch crystallization when accounting for nucleation, growth and agglomeration phenomena. *Chemical Engineering Science*, vol. 58, pp. 3699-3713, 2003.
- GROS, H. & NURMI, H. Studies on industrial crystalization of sugar - II Deterministic simulation of vacuum pan sugar boiling. *Kemia-Kemi*, Turku- Finlândia, v. 6, n. 10, 534-541, 1979.
- GUO, B.; SHEN, Y.; LI, D.; ZHAO, F. Modelling coal gasification with a hybrid neural network. *Fuel*, Vol. 76, No. 12, pp. 1159-1164, 1997.
- HASSANI, N.S.A., SAIDI, K. BOUNAMIDI, T. *Steady state modeling and simulation of an industrial sugar continuous crystallizer*. *Computers and Chemical Engineering*, 25, pg 1351-1370, 2001.
- HEFFELS, S.K. *Product Size Distributions in Continuous and Batch Sucrose Crystallizers*. PhD. Thesis. Delft Univ. of Tech., The Netherlands, 1990.
- HUSSAIN, M. A. Review of the applications of neural networks in chemical process control – simulation and online implementation. *Artificial Intelligence in Engineering*, Vol. 13, pp. 55-68, 1999.
- INSTRUCTION MANUAL FOR SEEDMASTER SOFTWARE*. K-Patents Product. Document/Revision No. INMS/3 Março 2002
- ISHIKAWA, F. Y. Modelamento do sistema de evaporação múltiplo efeito para produção de açúcar. *Trabalho de Graduação*, pp 14-16, São Carlos, UFSCar, 1997.
- JESUS, C.D.F. Desenvolvimento de simulador dinâmico do processo de produção de açúcar. Dissertação de Mestrado, São Carlos, UFSCar, 2000.
- JESUS, C.D.F. e ALMEIDA, P.I.F. Simulação do Controle do Processo de Evaporação de Múltiplo Efeito Utilizado na Fabricação de Açúcar . Anais do II ENPROMER (Engenharia de Processos do Mercosul), 1999.
- JANCIC, S.J., GROOTSCHOLTEN, P.A.M. *Industrial crystallization*. Delft University Press, Delft, Holland, 1984.

- KADLEC, P., DANDAR, A. La mesure et le calcul des propriétés physico-chimiques des solutions sucrées. La sucrerie Belge. Bélgica, v. 100, p. 45-59. 02\1981.
- LAURET, P., BOYER H., Gatina, J.C. *Hybrid Modelling of a sugar boiling process*. Control Engineering Practice, Vol. 8, pg. 299-310, 2000.
- LINKO, S.; LUOPA, J.; ZHU, Y. H. Neural networks as 'software sensors' in enzyme production. *Journal of Biotechnology*, Vol. 52, pp. 257-266, 1997.
- LOPES, C. H. & PARAZZI, C. Introdução à tecnologia de produção de açúcar. Apostila Técnica. Araras, UFSCar, p. 14-35. 05/1992.
- MADSEN, R. F. A new programme for calculating sugar factory energy balances. *International Sugar Journal*. Nakskov- Dinamarca, v. 98, n. 1167, p. 134-137. 1996.
- MATTHEWS III, H.B. *Model identification and control of batch crystallization for an industrial chemical system*. PhD. Thesis. University of Wisconsin-Madson, EUA, 1997.
- MEIRELES, M.J.C.G. *Modelização e simulação computacional de uma unidade industrial de cristalização de açúcar*. Tese de Doutorado. Universidade do Porto, 1996.
- MELEIRO, L. A. C.; MACIEL FILHO, R. A self-tuning adaptive control applied to an industrial large scale ethanol production. *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 24, pp. 925-930, 2000.
- MELEIRO, L. A. C.; MACIEL FILHO, R.; CAMPELLO, R. J. G. B.; AMARAL, W. C. Chapter 8 - Hierarchical neural fuzzy models as a tool for process identification: a bioprocess application. *Neural Networks in Process Engineering*, 2001.
- MHLONGO, A.Z., ALPORT M. J. *Application of artificial neural network techniques for measuring grain sizes during sugar crystallization*. In Anais do Sasta 2002.
- MILANIC, S.; SEL, D.; HVALA, N.; STRMCNIK, S.; KARBA, R. Applying artificial neural network models to control a time variant chemical plant. *Computers Chemical Engineering*, Vol. 21 Suppl, pp. s637-s642, 1997.
- MOLGA, E.; CHERBANSKI, R. Hybrid first-principle-neural-network approach to modelling of the liquid-liquid reacting system. *Chemical Engineering Science*, Vol. 54, pp. 2467-2473, 1999.
- NIVIÈRE, V. ET AL. Intelligent simulation of plant operation in the wine industry . *Food Control*. France, v. 5 , n. 2, p. 91-95. 1994.
- OLIVEIRA, E. R. Esgotamento do mel final de algumas usinas da região açucareira de Piracicaba. Piracicaba, USP, p. 23-28 (Tese). 1964.
- PARAZZI, C . Matéria-Prima para a indústria do açúcar e do álcool. Instituto do açúcar e do álcool - regional sul, p. 10-20, 1984.

- PATIENCE, D.B. *Crystal engineering through particle size and shape monitoring, modeling, and control*. PhD. Thesis. University of Wisconsin-Madson, EUA, 2002.
- PEACOCK, S. Predicting physical properties of factory juices and syrups. *Inst. Sugar Journal*, Vol. 97, No. 1162, 1995.
- QIN, S. J. Neural networks for intelligent sensors and control – practical issues and some solutions. Em *Neural Networks for Control*, D. Elliott, Ed. Academic Press, 1996. Chapter 8.
- RANDOLPH, A. D. & LARSON, M. A. *Theory of particulate process and technology of continuous crystallization*. Academic Press. 1988.
- SHA, Z.; LOUHI-KULTANEN, M.; PALOSAARI, S. Neural network simulation for non-MSMPR crystallization. *Chemical Engineering Journal*, Vol. 81, pp. 101-107, 2001.
- TAHAL, T. V. *New models for sugar vacuum pans - Individual Inquiry*. University of Queensland, Austrália, 2000.
- TURNER, P.; MONTAGUE, G.; MORRIS, J. Dynamic neural network in non-linear predictive control (na industrial application). *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 20, pp. 937-942, 1996.
- VALENTIN, N.; DENOEU, T.; FOTOOHI, F. An hybrid neural network based system for optimization of coagulant dosing in a water treatment plant.. *Proceedings of the International Joint Conference on Neural Networks Washington D.C., July 1999*. *IEEE ou citeseer.nj.nec.com/article/valentin01neural.html* .
- VAN DER POEL, P. W.; SCHIWECK, H.; SCHWARTZ, T. *Beet and cane sugar manufacture*. CAP. 11 - 1ª Edição.
- WANG, H.; OH, Y.; YOON, E. S. Strategies for modeling and control of nonlinear chemical processes using neural networks. *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 22, pp. 823-826, 1998.
- XU, X.; HINES, W.; UHRIG, R. Sensor validation and fault detection using neural networks. No banco de dados do ResearchIndex no endereço: <http://citeseer.nj.nec.com/317319.html>
- ZIEGLER J. G. *Sugar Boiling: Some Useful Strategies* in www.zieglerassociates.com/strat/strategy.htm. INTERNET, 1999.

ANEXO A



ANEXO - A

Equações e correlações utilizadas nos cálculos das propriedades físicas da solução de açúcar e do vapor.

→ Densidade da solução - (Peacock, 1995)

$$\rho_{sol}^* = \left(1000 + BxSol * \frac{200 + BxSol}{54} \right) * \left(1 - 0,036 * \frac{T-20}{160-T} \right) \quad [\text{kg/m}^3]$$

com T em [°C]

→ Densidade da solução impura (Georgieva *et al*, 2003)

$$\rho_{sol} = \rho_{sol}^* + 1000(-1 + \exp[(-6,927 \cdot 10^{-6} Brx_{sol}^2 - 1,164 \cdot 10^{-4} Brx_{sol})(P-1)]) \quad [\text{kg/m}^3]$$

→ Densidade do cristal

$$\rho_C = 1580 \quad [\text{kg/m}^3]$$

→ Densidade da solução com os cristais - Balanço Material

$$\rho_{\text{Solucao + Cristais}} = \frac{\rho_{sol} \rho_C}{\rho_C - Fc(\rho_C - \rho_{sol})} \quad [\text{kg/m}^3]$$

→ Elevação do ponto de ebulição devido à concentração - (Ishikawa, 1997)

$$EPEX = \frac{(0,03 + 0,018P)(T_{VAP} + 84)Brx}{100 - Brx} \quad [^{\circ}\text{C}]$$

com T_{VAP} (temperatura do vapor saturado dentro do equipamento) em [°C]

→ Capacidade calorífica da solução (Feyo de Azevedo e Chorão, 1993 *apud* Dittl *et al*, 1990)

$$Cp = 4186,8 - 29,7 * Bx + 4,16 * Bx * P_{Sol} + 0,075 * Bx * T \quad [\text{J/kg } ^{\circ}\text{C}]$$

com T em [°C]

→ Capacidade calorífica dos cristais

$$Cp_C = 1155,6 + 3,768 * T \quad [\text{J/kg } ^{\circ}\text{C}]$$

com T em [°C]

→ Entalpia da solução

$$Hl = C_{p_{Sol}} * T \quad [\text{J/kg}]$$

com T em [°C]

→ Calor latente de vaporização do vapor de escape

$$\Delta H_{vst} = 2263280 - 58210 * \log(P_s) \quad [\text{J/kg}]$$

onde P_s é a pressão do vapor de escape em [bar]

→ Calor latente de vaporização do vapor no cristalizador - Tabela Termodinâmica

$$\Delta H_v = 2257510 - 85950 * \log(P_{vac}) \quad [\text{J/kg}]$$

onde P_{vac} é a pressão do vapor em [bar]

→ Entalpia do vapor no cristalizador - Tabela Termodinâmica

$$H_v = 1766,07 * (99,65 + 27,55 * \log(P_{vac}) + 1,8 * \log(P_{vac})^2) + 2501800 \quad [\text{J/kg}]$$

onde P_{vac} é a pressão do vapor em [bar]

→ Volume total de cristais

$$V_c = \frac{M_c}{\rho_c} \quad [\text{m}^3]$$

onde M_c é a massa de cristais em [kg]

→ Volume total de massa dentro do cristalizador

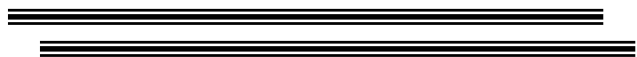
$$V_m = \frac{M_w + M_l + M_a + M_c}{\rho_{\text{Solucao + Cristais}}} \quad [\text{m}^3]$$

→ Velocidade de crescimento linear dos cristais (Feyo de Azevedo e Chorão, 1993)

$$G = 100 * \exp\left(\frac{-57000}{8.315 * (T + 273)}\right) * (S-1) * \exp(-8 * (1-P)) * \left(1 + 2 * \frac{V_c}{V_m}\right) \quad [\text{m/s}]$$

com T em [°C]

ANEXO B



ANEXO - B

A menos da Figura B.1, que representa a concentração da última caixa de evaporação, as onze figuras seguintes representam os perfis das variáveis selecionadas para serem as entradas das redes utilizadas na etapa de evaporação. Os gráficos (a) e (b) que aparecem nas figuras são relativos aos dados das Bases 01 e 02, respectivamente.

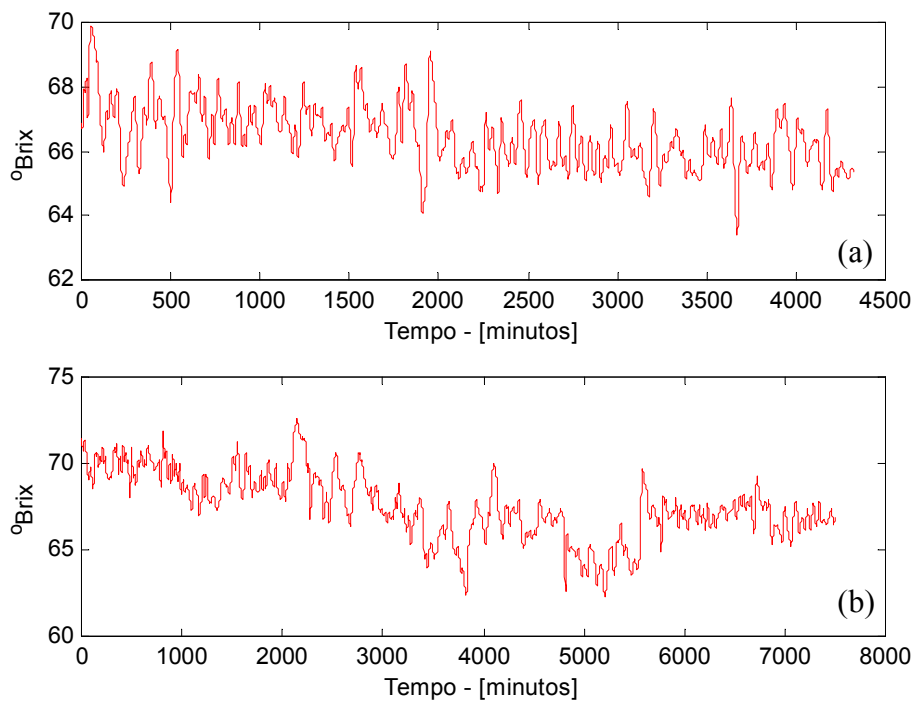


Figura B.1: Concentração do xarope da última caixa de evaporação.

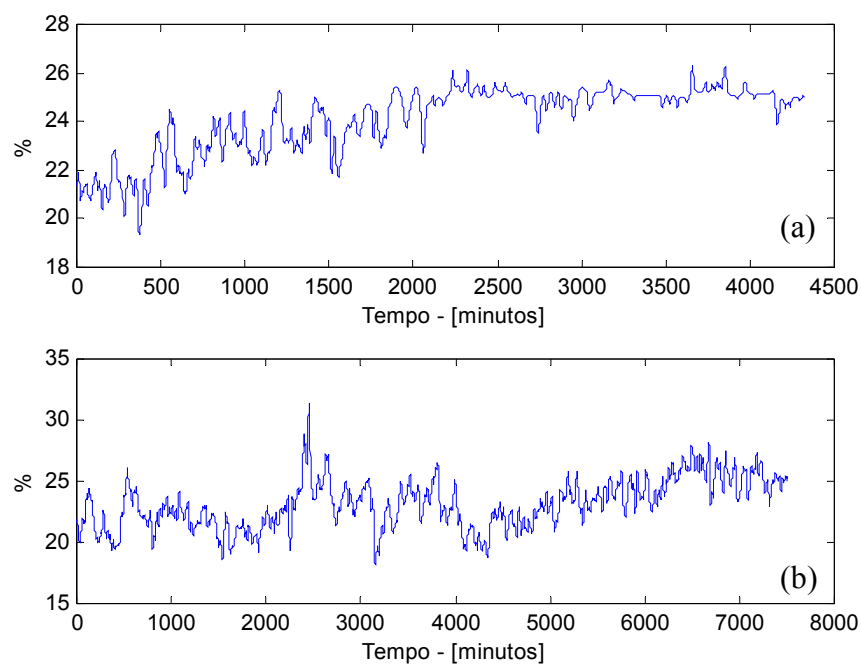


Figura B.2: Perfil da variável NN_1 - MV Nível Pré-Evaporador 02.

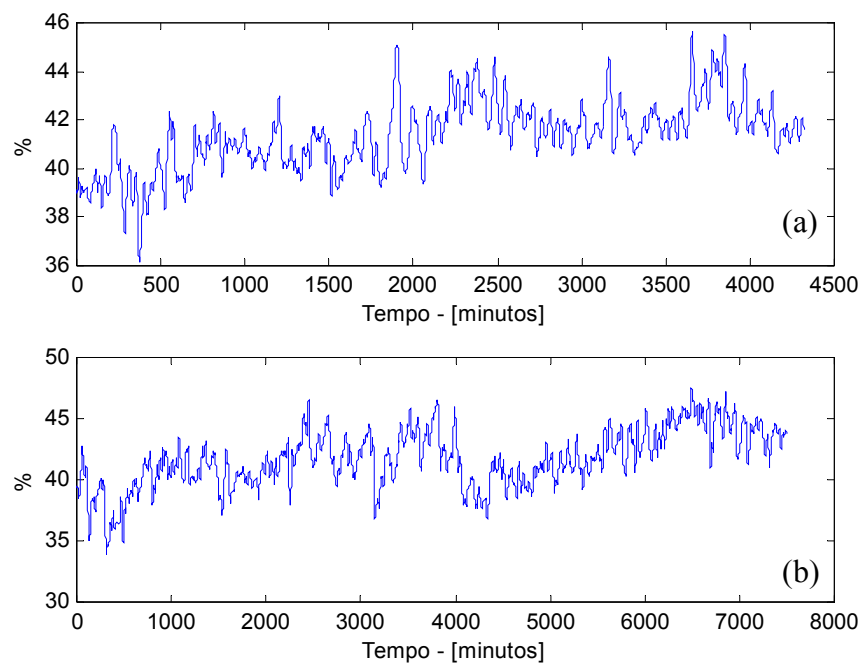


Figura B.3: Perfil da variável NN_2 - MV Nível Pré Evaporador 03.

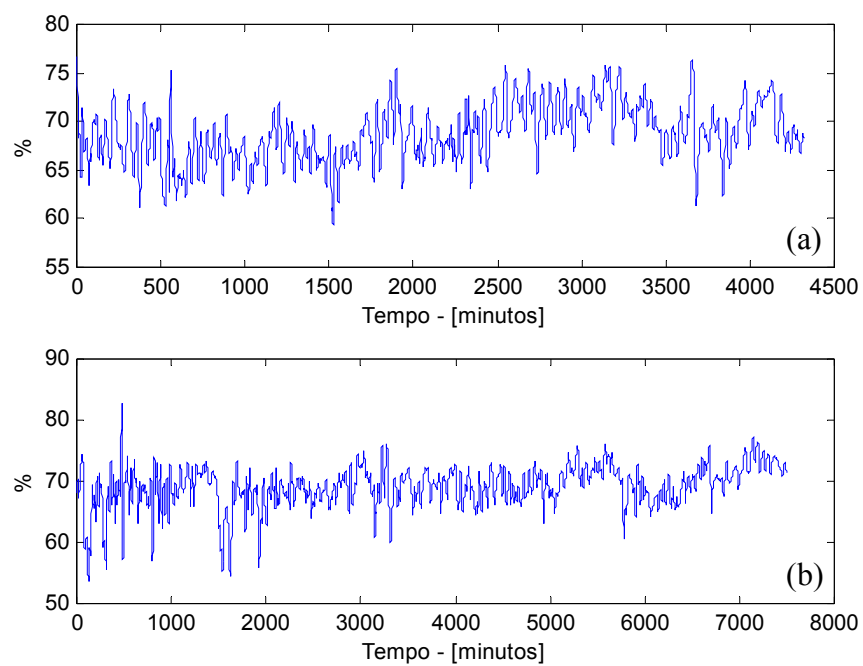


Figura B.4: Perfil da variável NN_3 - MV Nível Caixa 03.

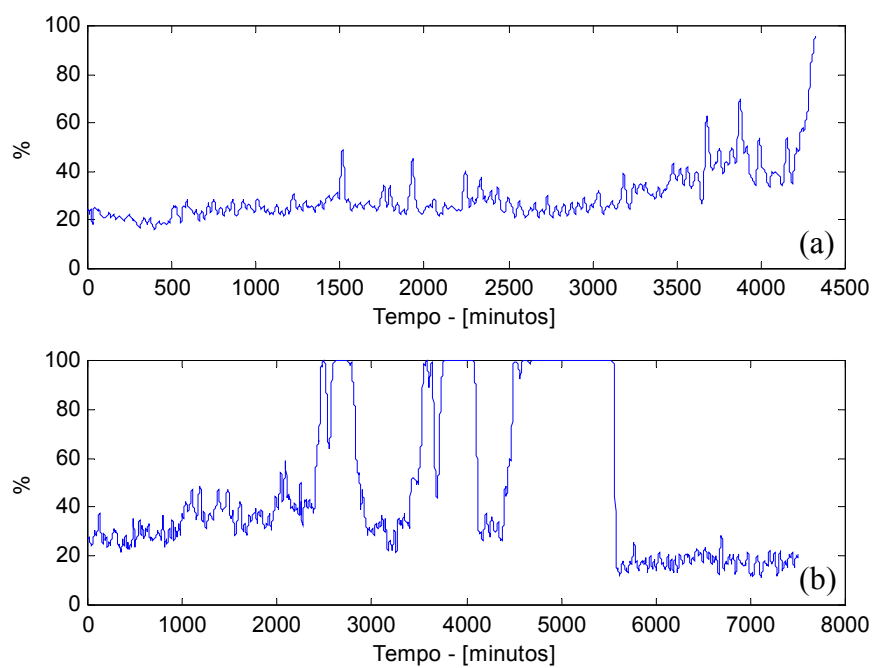


Figura B.5: Perfil da variável NN_4 - MV Pressão Caixa 02.

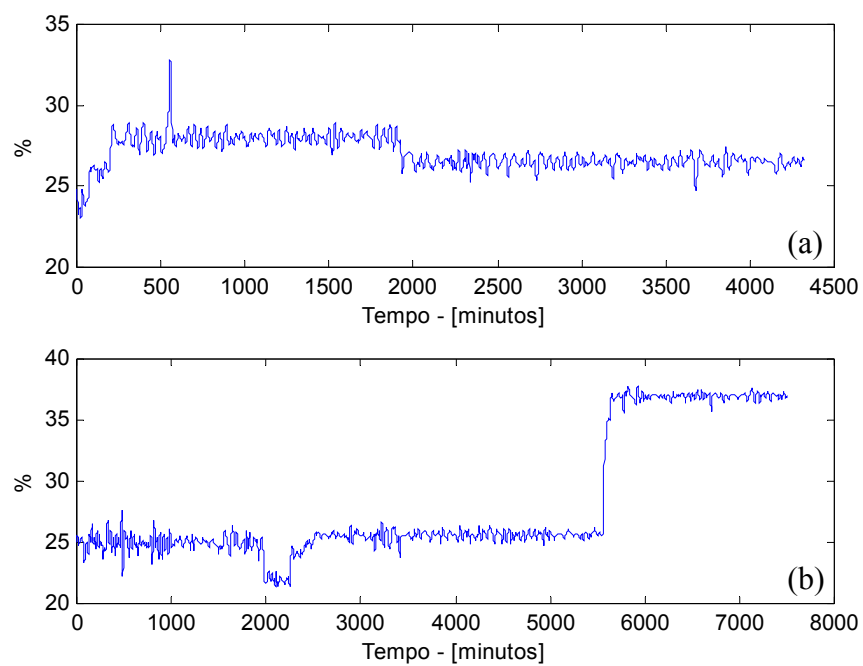


Figura B.6: Perfil da variável NN_5 - Nível da caixa 03.

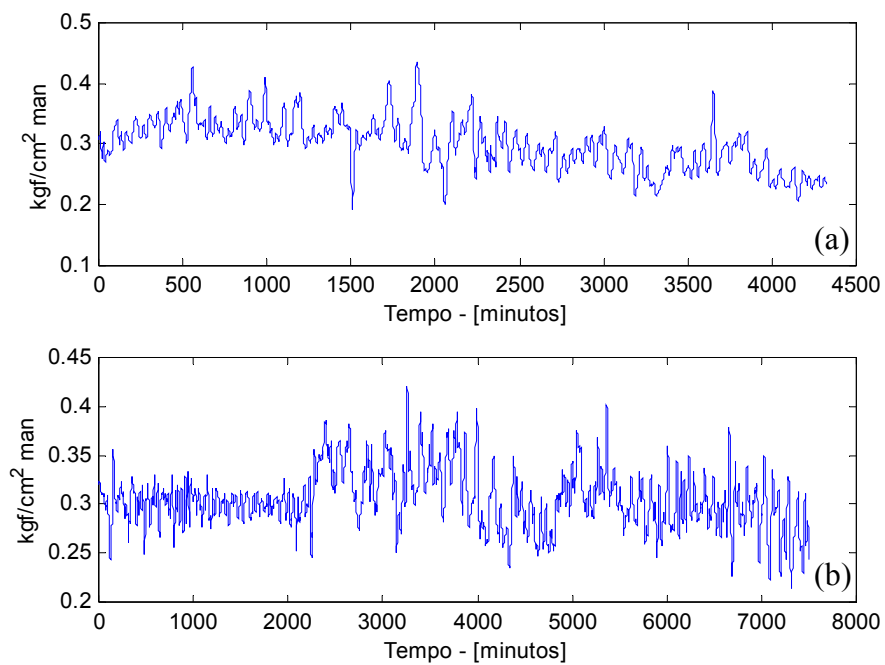


Figura B.7: Perfil da variável NN_6 - Pressão caixa 01.

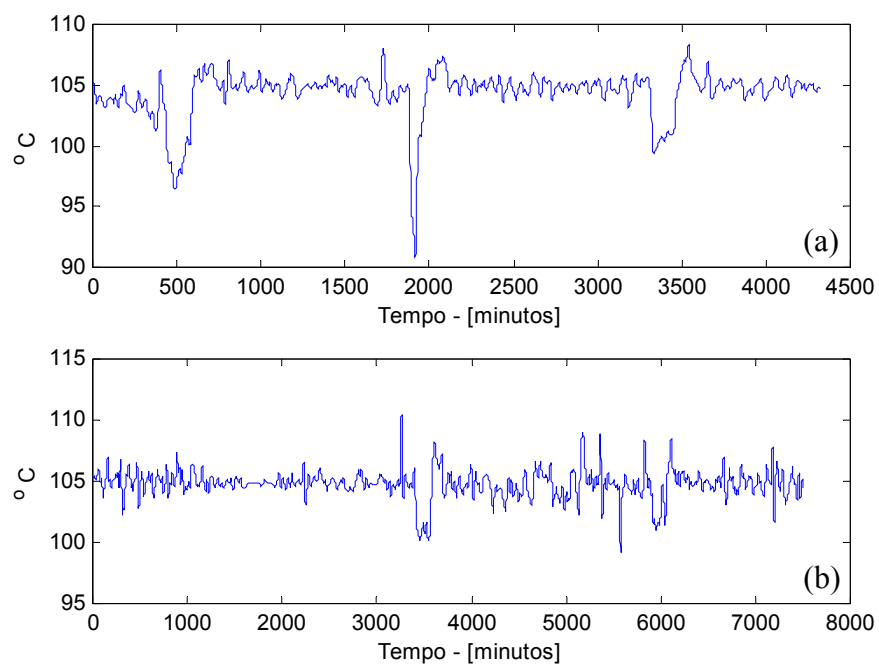


Figura B.8: Perfil da variável NN_7 - Temperatura Caldo Fábrica.

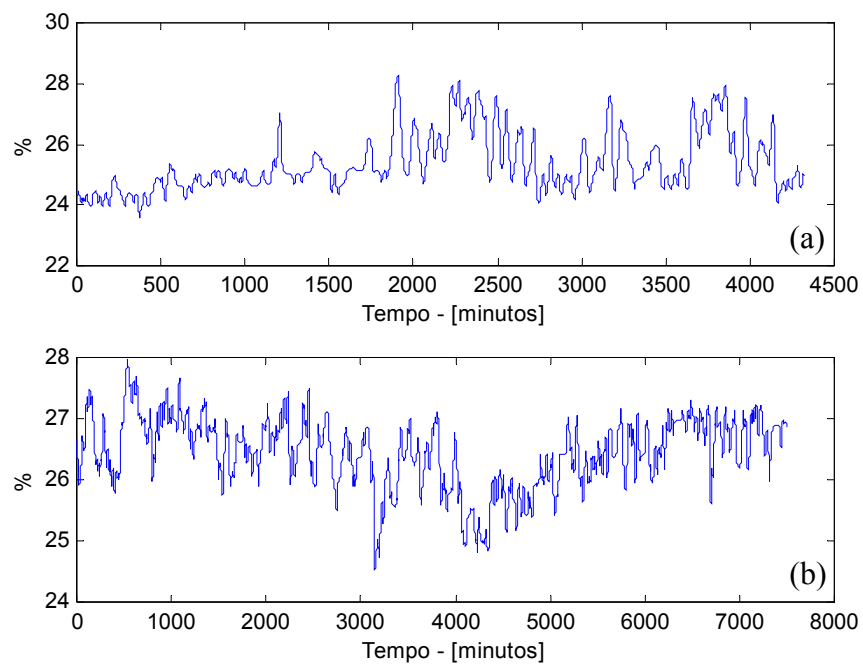


Figura B.9: Perfil da variável NN_8 - Nível do pré-evaporador 02.

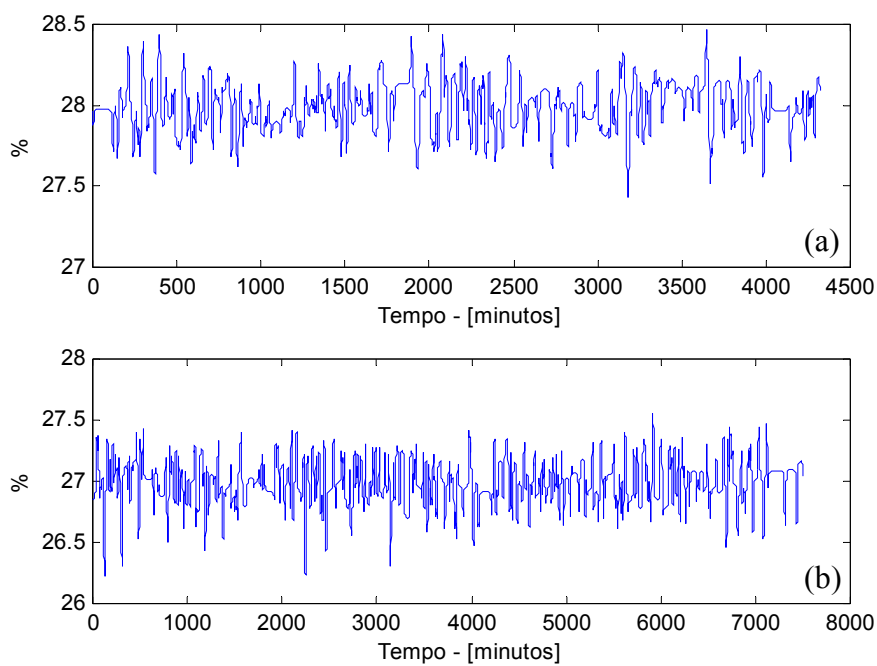


Figura B.10: Perfil da variável NN_9 - Nível do pré-evaporador 03.

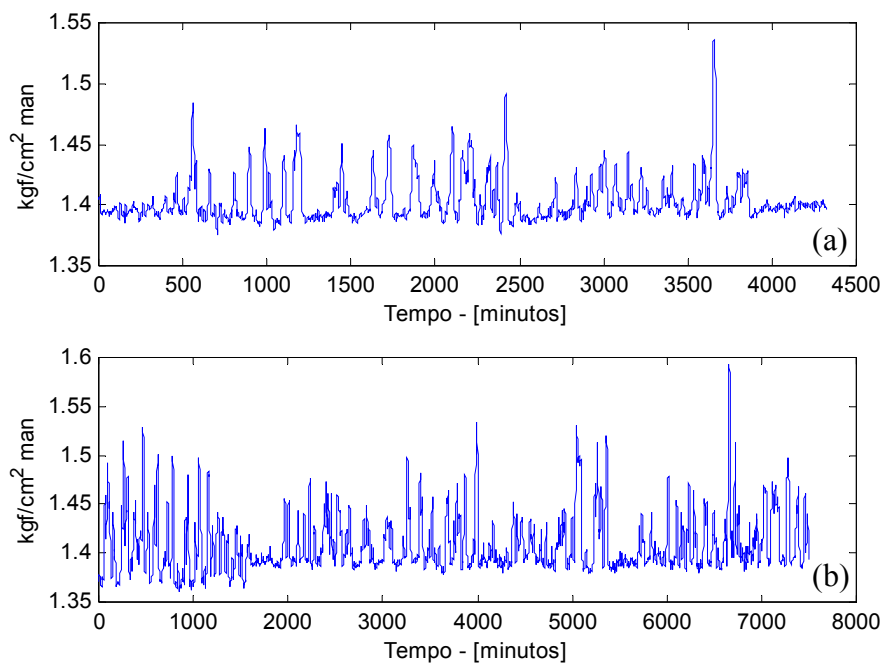


Figura B.11: Perfil da variável NN_10 - Pressão do vapor de escape.

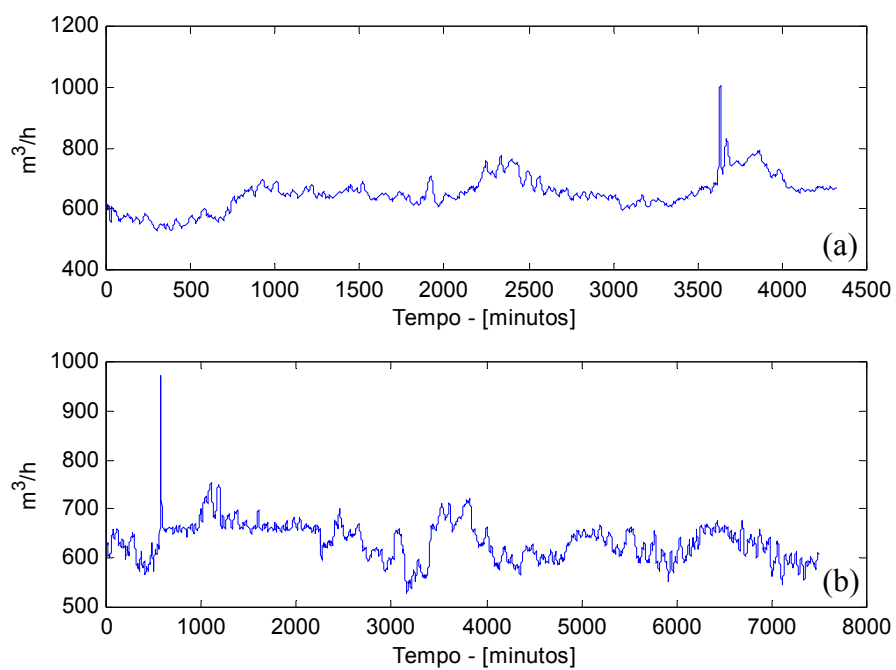
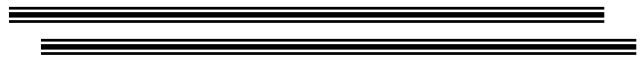


Figura B.12: Perfil da variável NN_11 - Vazão de água multijato.

ANEXO C



ANEXO - C1

Distribuições de Tamanho de Cristais (DTC) das sementes utilizadas nas Bateladas de 1 a 3.

Diâmetro (µm)	% em número
0,859	0,032
0,913	0,111
0,980	0,254
1,051	0,508
1,127	0,888
1,209	1,428
1,297	2,221
1,392	2,998
1,493	3,855
1,602	4,806
1,718	5,599
1,843	6,250
1,977	6,726
2,121	6,900
2,276	6,837
2,441	6,535
2,618	5,964
2,809	5,282
3,013	4,441
3,232	3,537
3,467	2,808
3,720	2,348
4,281	2,538

Diâmetro (µm)	% em número
4,592	2,728
4,926	2,681
5,284	2,395
5,669	2,030
6,081	1,570
6,524	1,206
6,998	0,920
7,508	0,746
8,054	0,650
8,640	0,565
9,268	0,458
9,943	0,331
10,666	0,249
11,439	0,211
12,272	0,173
13,050	0,127
18,000	0,042
20,000	0,023
22,000	0,014
24,000	0,008
26,000	0,005
28,000	0,002
---	---

ANEXO - C2

Distribuições de Tamanho de Cristais (DTC) das sementes utilizadas nas Bateladas de 4 a 10.

Diâmetro (µm)	% em número
0,921	0,047
0,980	0,125
1,051	0,296
1,127	0,576
1,209	0,966
1,297	1,558
1,392	2,212
1,493	2,929
1,602	3,817
1,718	4,580
1,843	5,281
1,977	5,842
2,121	6,154
2,276	6,247
2,441	6,138
2,618	5,764
2,809	5,219
3,013	4,534
3,232	3,677
3,467	3,007
3,720	2,571
3,990	2,571
4,281	2,960
4,592	3,241
4,926	3,241

Diâmetro (µm)	% em número
5,284	2,976
5,669	2,602
6,081	2,119
6,524	1,683
6,998	1,355
7,508	1,153
8,054	0,997
8,640	0,844
9,268	0,647
9,943	0,505
10,666	0,413
11,439	0,335
12,272	0,248
13,164	0,184
14,122	0,133
15,150	0,092
16,110	0,069
18,000	0,041
20,000	0,023
22,000	0,014
24,000	0,008
26,000	0,005
28,000	0,002
30,000	0,000
32,000	0,000

ANEXO D



ANEXO – D

As figuras a seguir mostram o comportamento das principais variáveis monitoradas do cristalizador ao longo das bateladas.

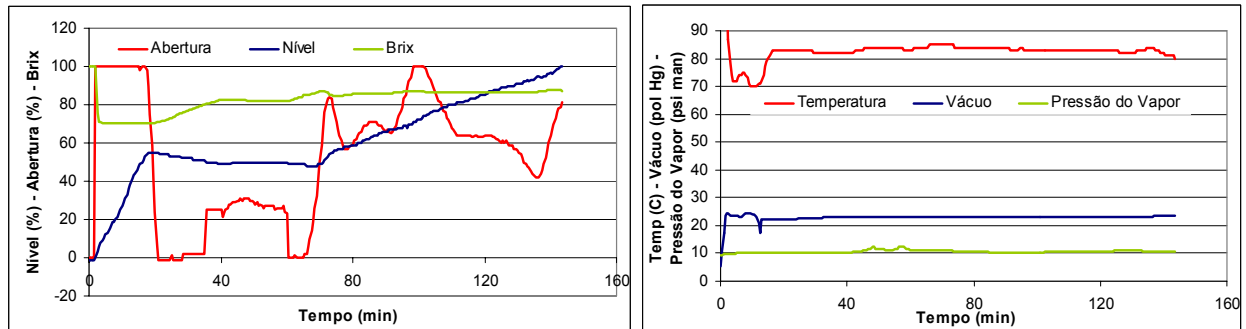


Figura D-1: Comportamento das principais variáveis monitoradas ao longo da Batelada I.

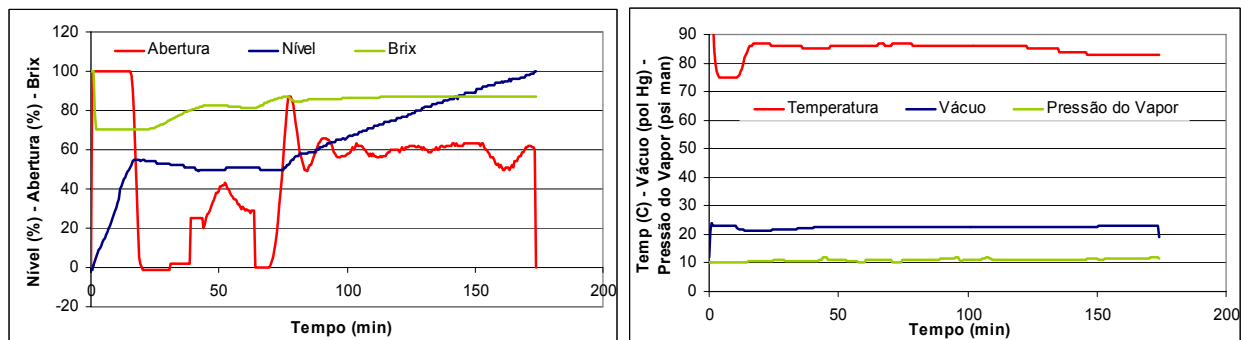


Figura D-2: Comportamento das principais variáveis monitoradas ao longo da Batelada II

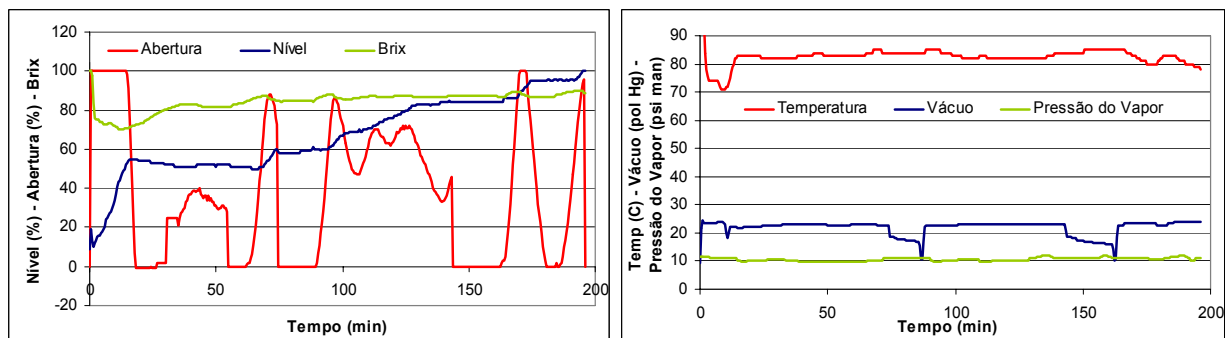


Figura D-3: Comportamento das principais variáveis monitoradas ao longo da Batelada III.

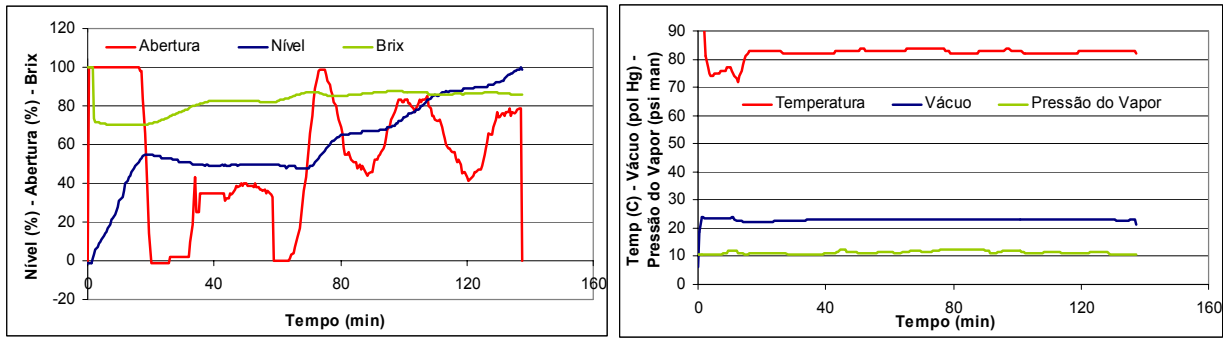


Figura D-4: Comportamento das principais variáveis monitoradas ao longo da Batelada IV.

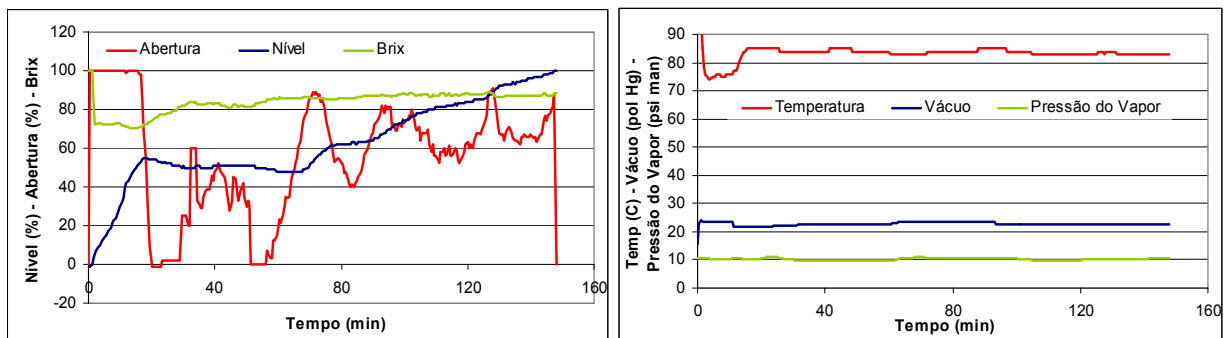


Figura D-5: Comportamento das principais variáveis monitoradas ao longo da Batelada V.

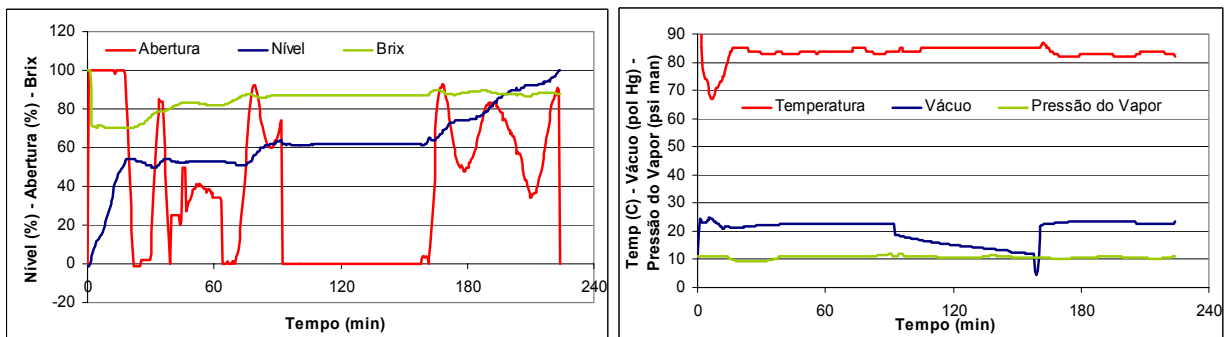


Figura D-6: Comportamento das principais variáveis monitoradas ao longo da Batelada VI.

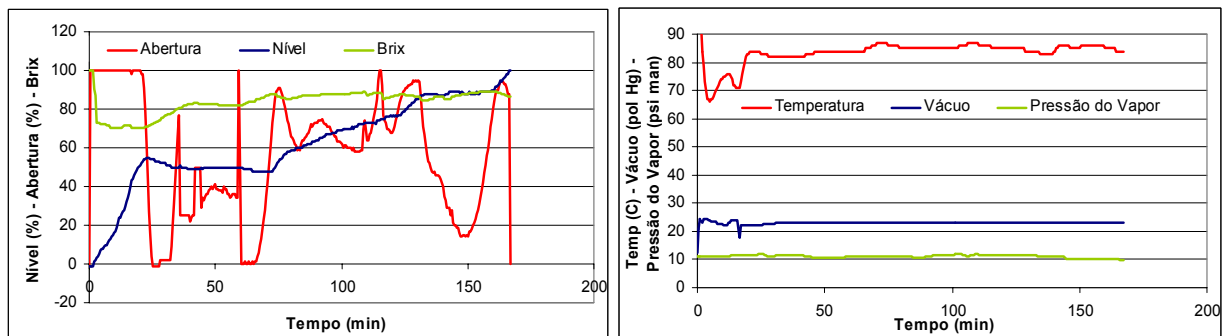


Figura D-7: Comportamento das principais variáveis monitoradas ao longo da Batelada VII.

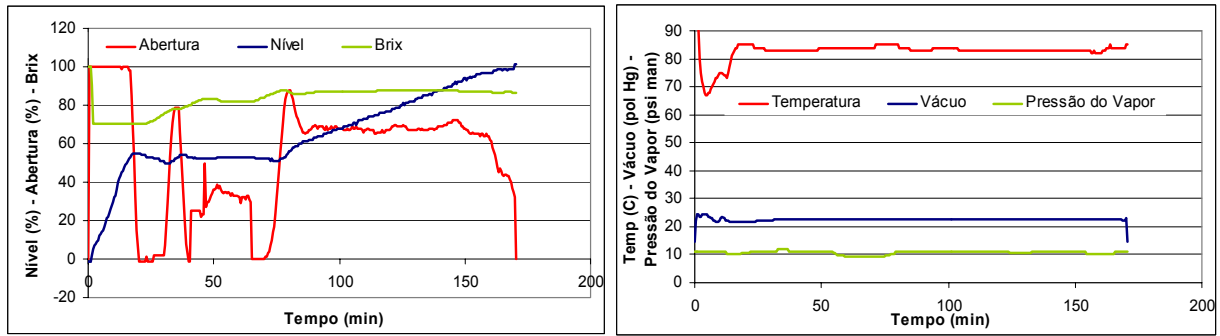


Figura D-8: Comportamento das principais variáveis monitoradas ao longo da Batelada VIII.

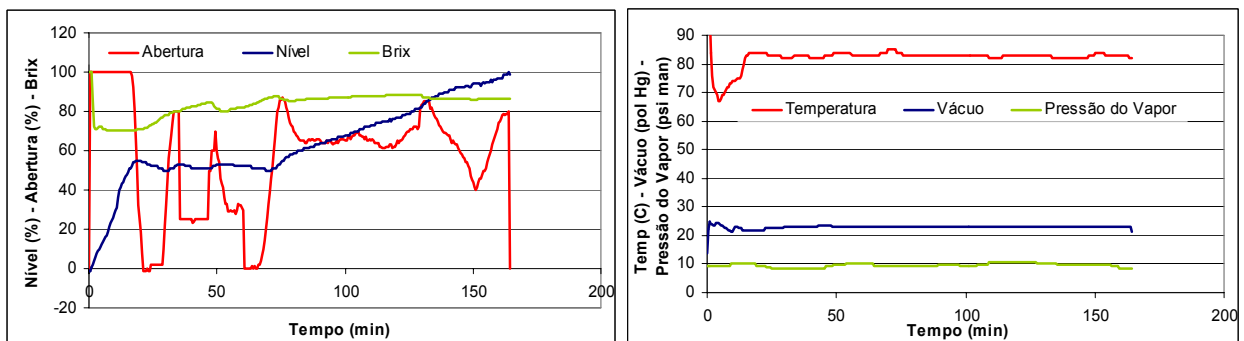


Figura D-9: Comportamento das principais variáveis monitoradas ao longo da Batelada IX.

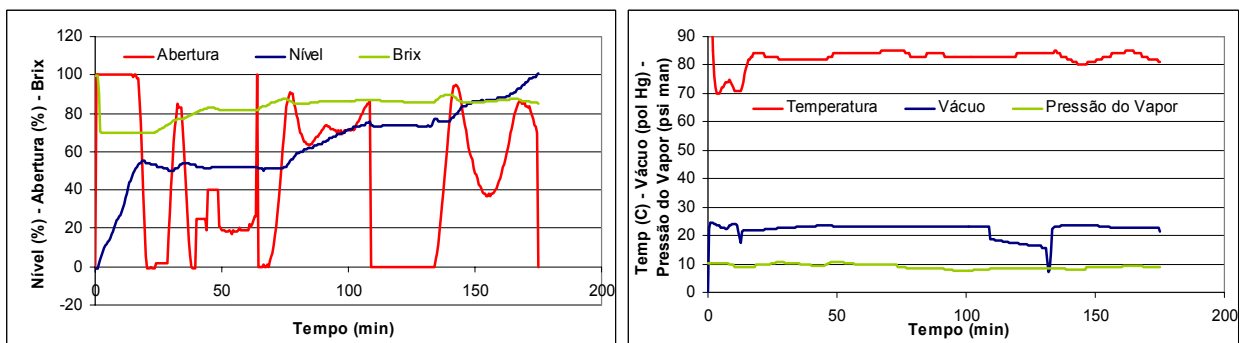
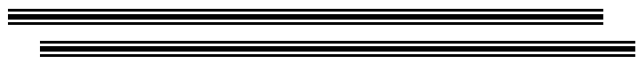


Figura D-10: Comportamento das principais variáveis monitoradas ao longo da Batelada X.

ANEXO E



ANEXO - E1

BATELADA I

Tabela E1-1: Dados Experimentais Coletados da Batelada I:

Tempo (min)	Brix Total (°Brix)	Brix (°Brix)	Diâmetro (µm)
2,5	67	0	—
78,5	82	0	—
96,5	83	79	273,5
114,5	84	...	321,9
138,5	86,32	80,262	374,9
160,5	86	79	—

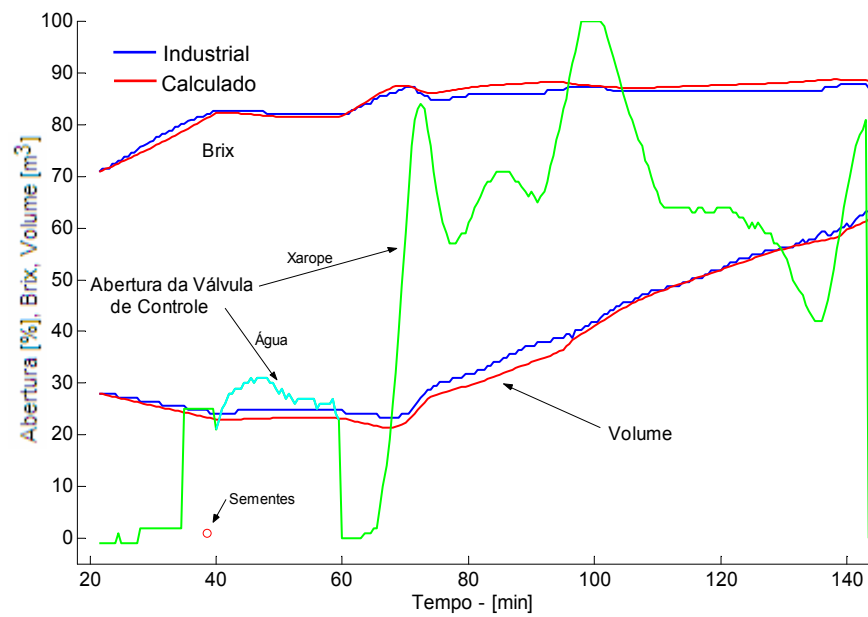


Figura E1-1: Evolução das estimativas de Vm e BrxT para a batelada I.

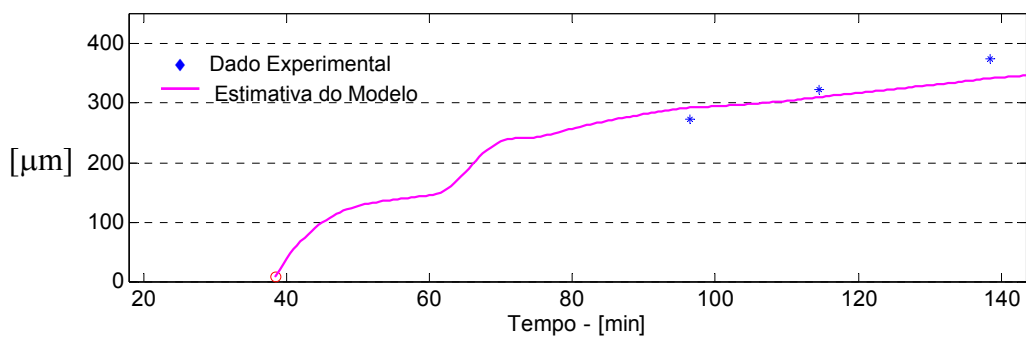
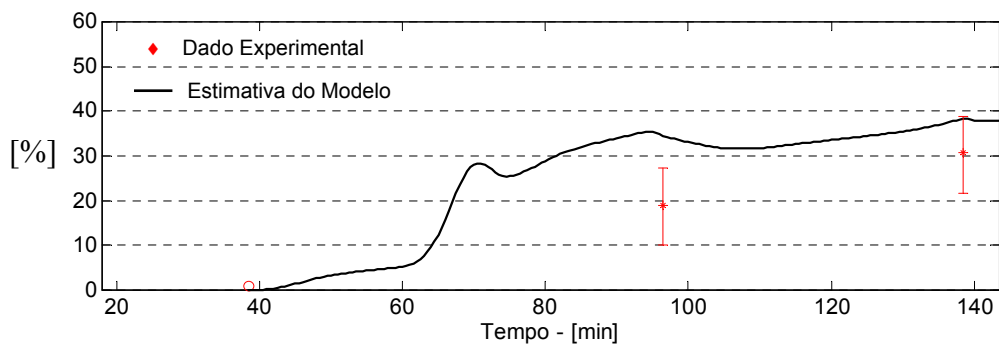
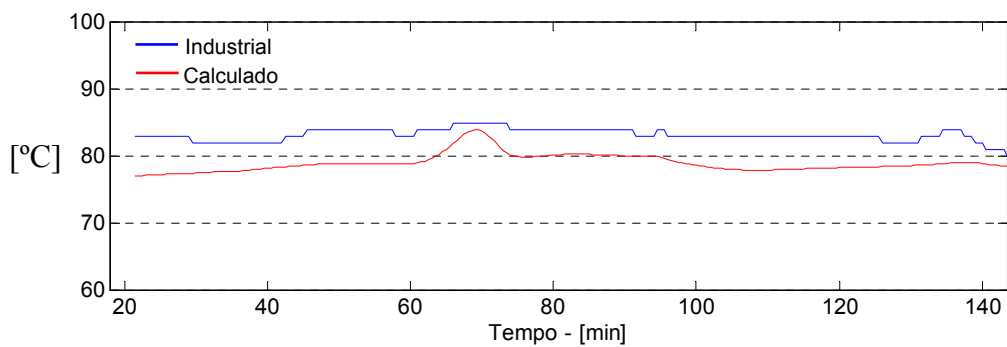


Figura E1-2: Estimativas do diâmetro médio dos cristais para a batelada I.



FiguraE1-3: Estimativas da fração de cristais para a batelada I.



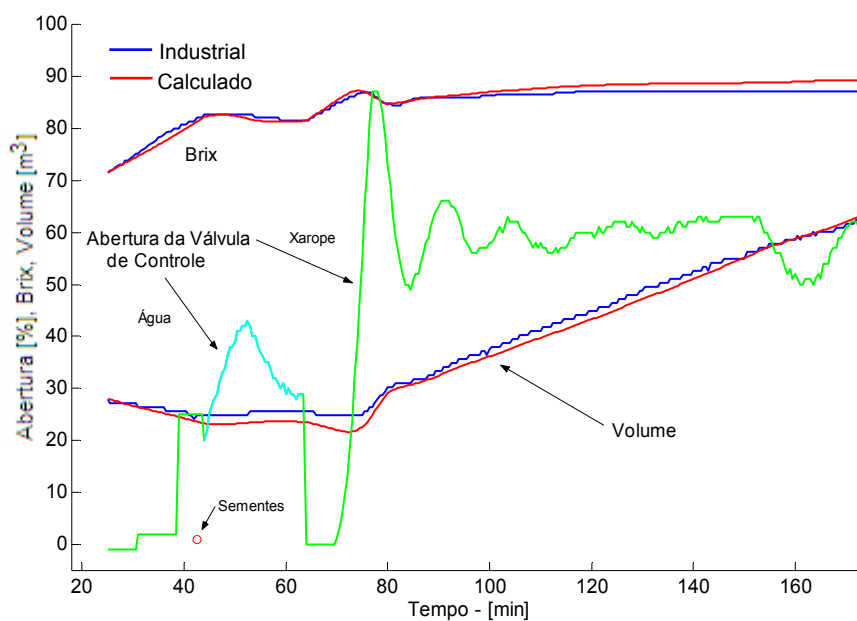
FiguraE1-4: Comparação dos valores industriais e calculados da temperatura, T , para a batelada I.

ANEXO - E2

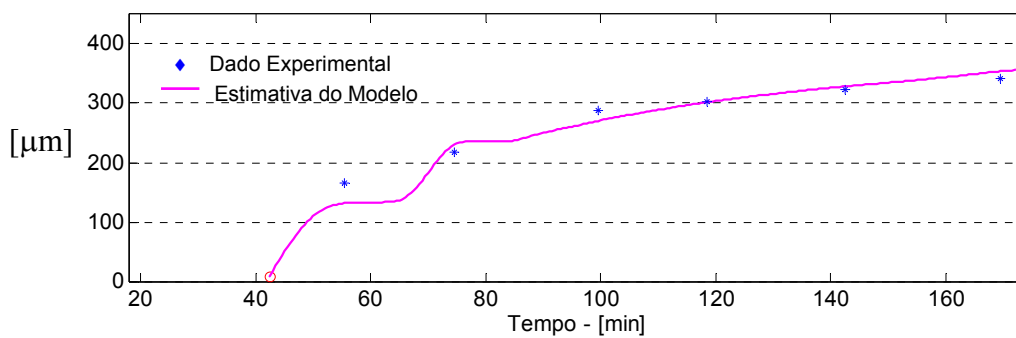
BATELADA II

Tabela E2-1: Dados Experimentais Coletados da Batelada II:

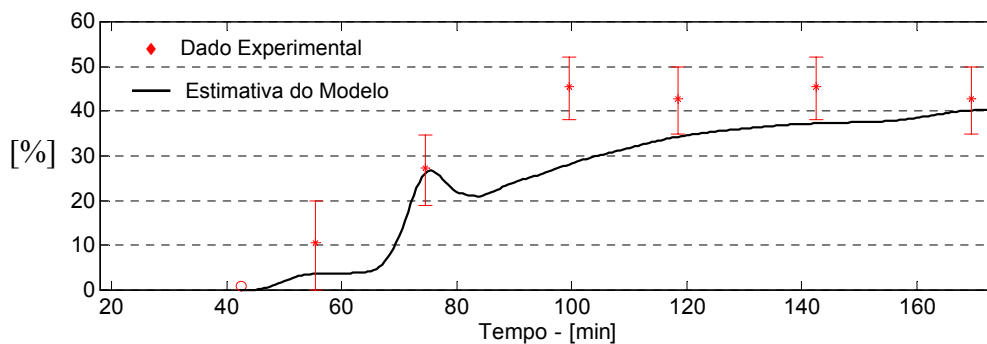
Tempo (min)	Brix Total (°Brix)	Brix (°Brix)	Diâmetro (µm)
5,5	66	0	—
35,5	79	0	—
43,5	77	0	—
55,5	83	81	165,32
74,5	84	78	218,52
99,5	88	78	287,52
118,5	88	79	303,21
142,5	88	78	322,89
169,5	88	79	340,29
170,5	66	0	—



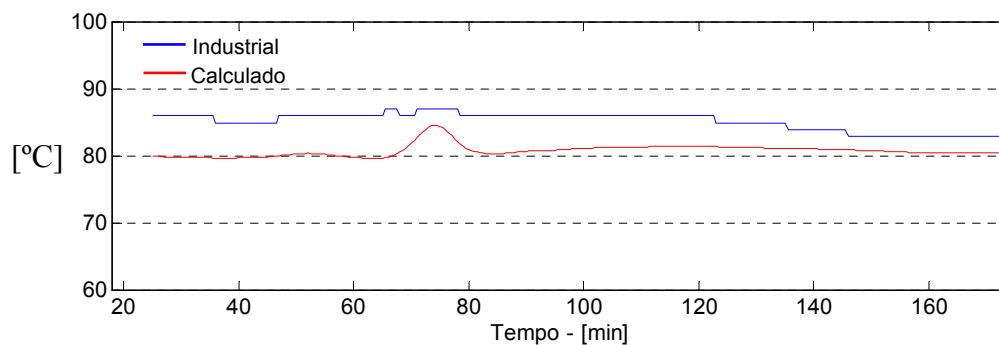
FiguraE2-1: Evolução das estimativas de V_m e Brx_T para a batelada II.



FiguraE2-2: Estimativas do diâmetro médio dos cristais para a batelada II.



FiguraE2-3: Estimativas da fração de cristais para a batelada II.



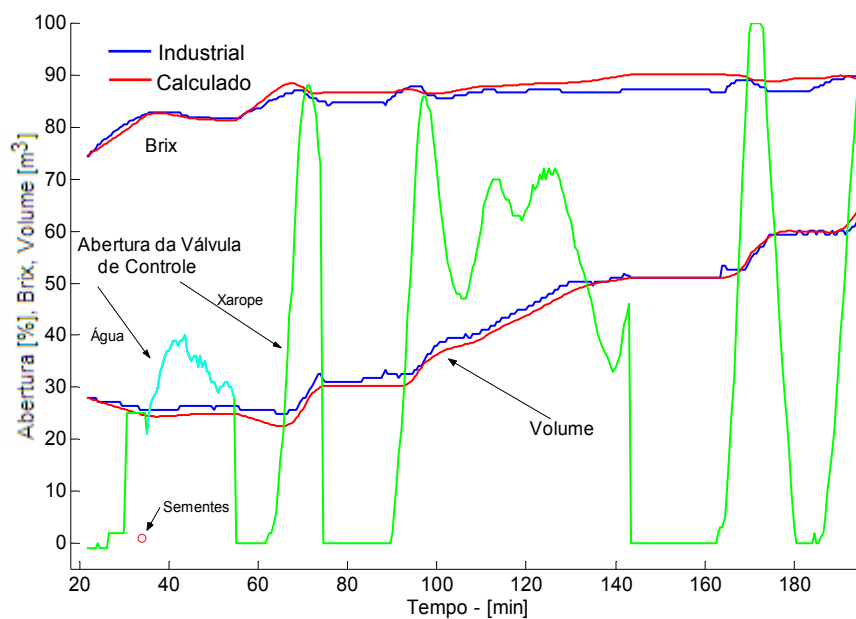
FiguraE2-4: Comparação dos valores industriais e calculados da temperatura, T , para a batelada II.

ANEXO - E3

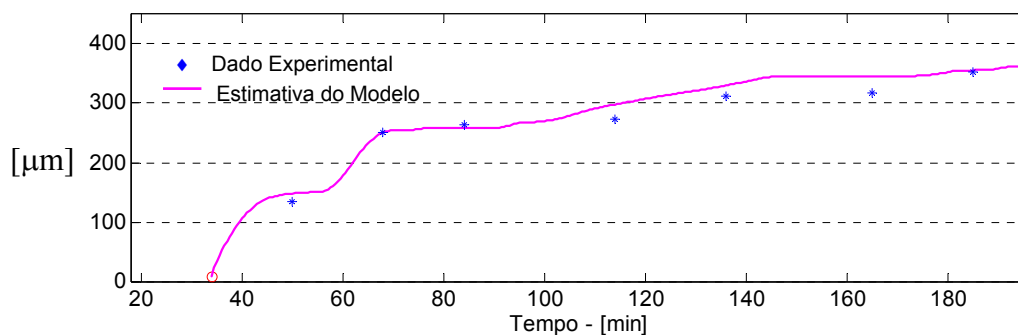
BATELADA III

Tabela E3-1: Dados Experimentais Coletados da Batelada III:

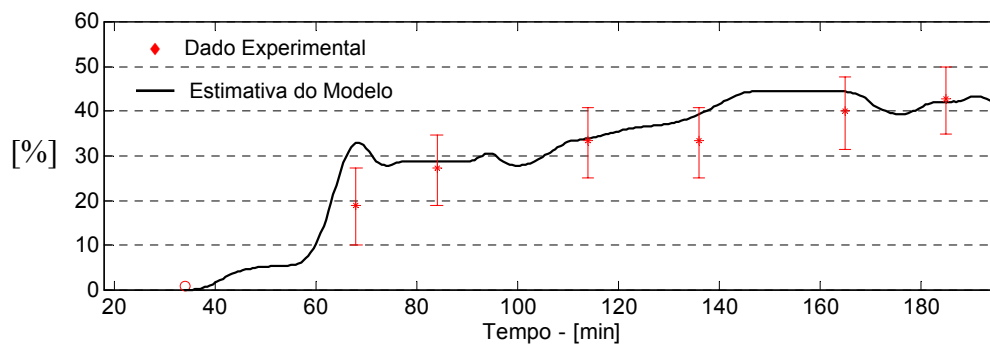
Tempo (min)	Brix Total (°Brix)	Brix (°Brix)	Diâmetro (µm)
28	68	0	—
50	79	0	135,50
68	83	79	250,17
84	84	78	264,20
114	86	79	272,14
136	86	79	312,14
165	88	80	317,17
185	88	79	352,78
186	68	0	—



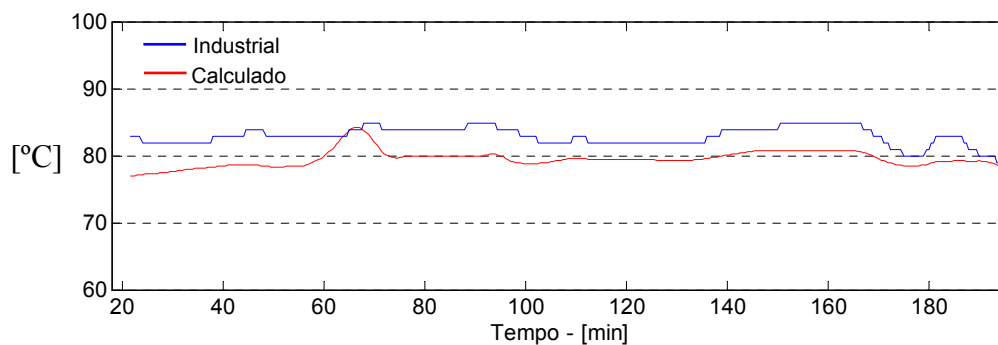
FiguraE3-1: Evolução das estimativas de Vm e BrxT para a batelada III.



FiguraE3-2: Estimativas do diâmetro médio dos cristais para a batelada III.



FiguraE3-3: Estimativas da fração de cristais para a batelada III.



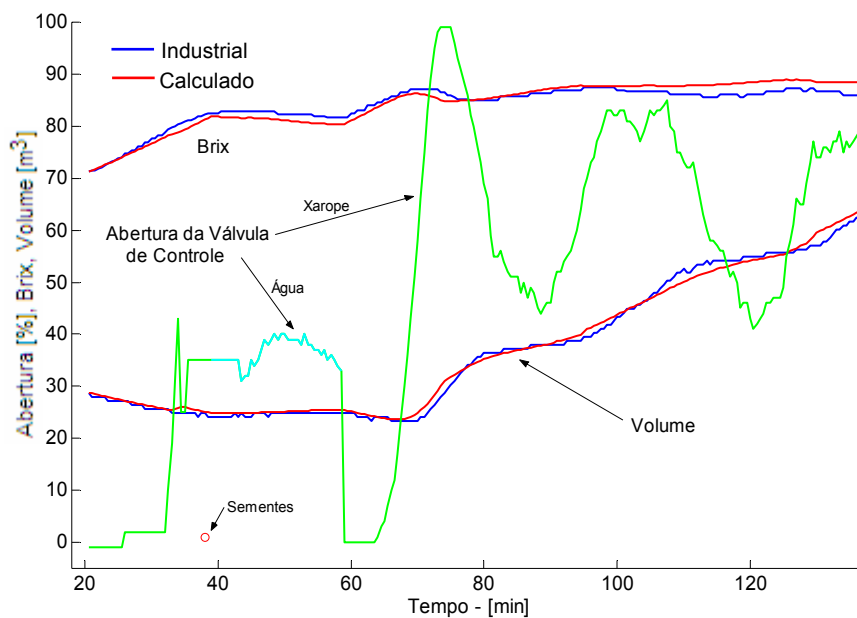
FiguraE3-4: Comparação dos valores industriais e calculados da temperatura, T , para a batelada III.

ANEXO - E4

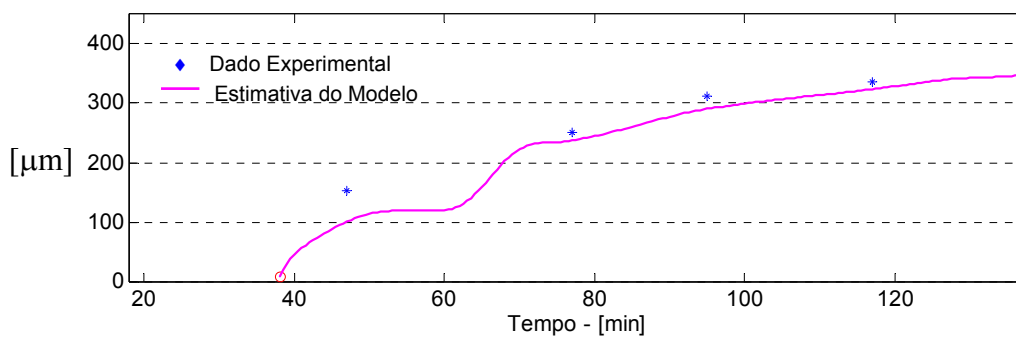
BATELADA IV

Tabela E4-1: Dados Experimentais Coletados da Batelada IV.

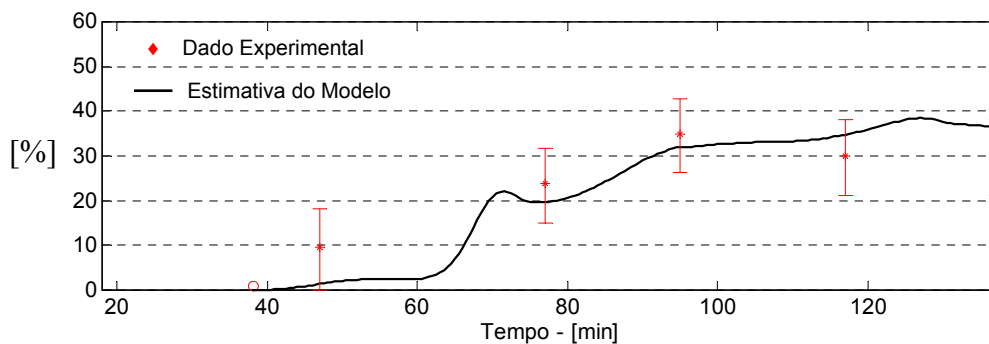
Tempo (min)	Brix Total (°Brix)	Brix (°Brix)	Diâmetro (µm)
5	69	0	—
24	75	0	—
34	80	0	—
47	81	79	152,94
64	83
77	84	79	251,61
95	87	80	311,46
117	86	80	335,56
137	86	80	344,56
157	70	0	—



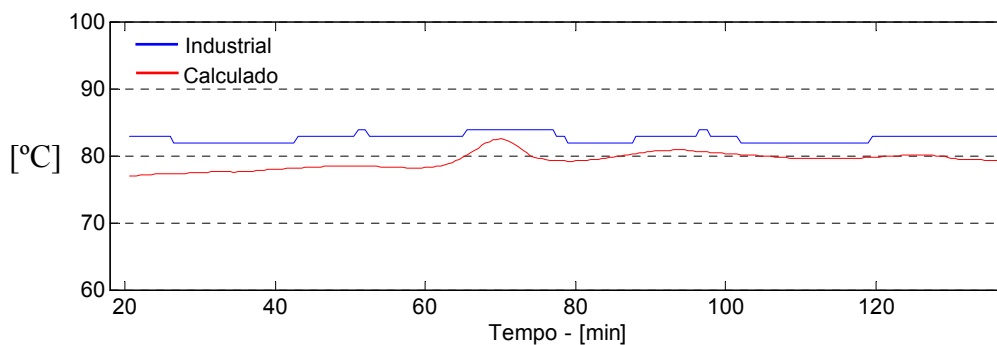
FiguraE4-1: Evolução das estimativas de Vm e BrxT para a batelada IV.



FiguraE4-2: Estimativas do diâmetro médio dos cristais para a batelada IV.



FiguraE4-3: Estimativas da fração de cristais para a batelada IV.



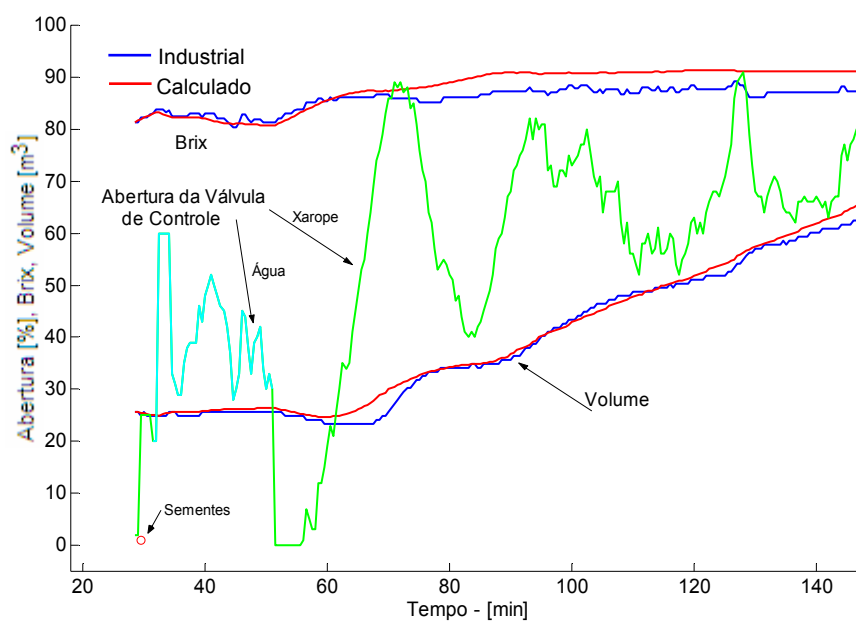
FiguraE4-4: Comparação dos valores industriais e calculados da temperatura, T , para a batelada IV.

ANEXO - E5

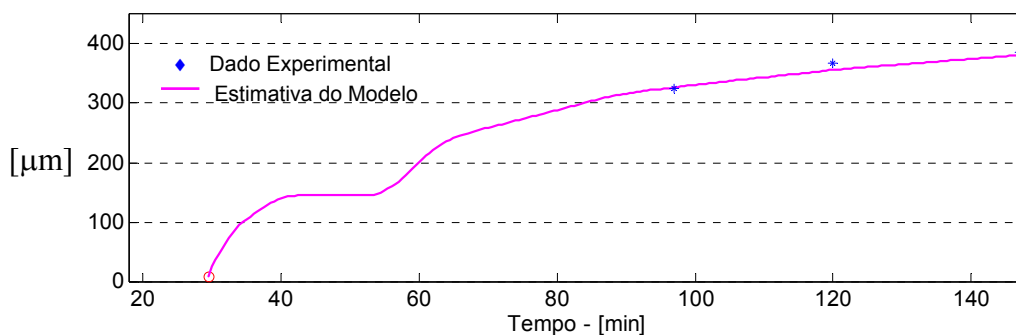
BATELADA V

Tabela E5-1: Dados Experimentais Coletados da Batelada V.

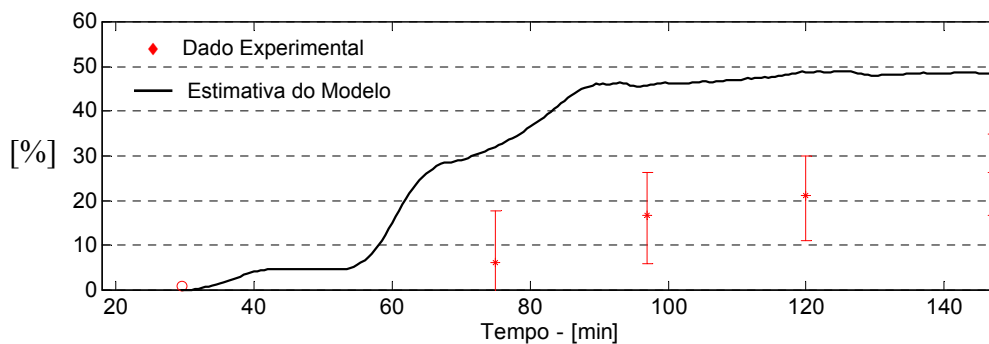
Tempo (min)	Brix Total (°Brix)	Brix (°Brix)	Diâmetro (µm)
3	69	0	—
18	73	0	—
26	78	0	—
37	81	0	—
75	85	84	—
97	85	82	323,81
120	85	81	367,77
147	86	81	385,04
190	71	0	0



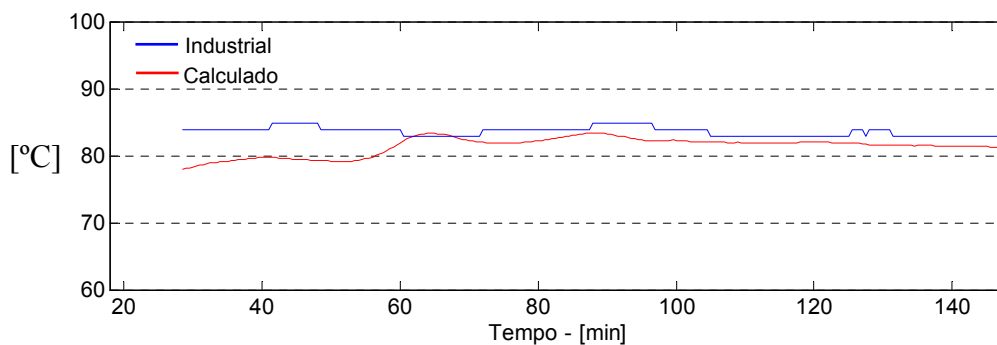
FiguraE5-1: Evolução das estimativas de Vm e BrxT para a batelada V.



FiguraE5-2: Estimativas do diâmetro médio dos cristais para a batelada V.



FiguraE5-3: Estimativas da fração de cristais para a batelada V.



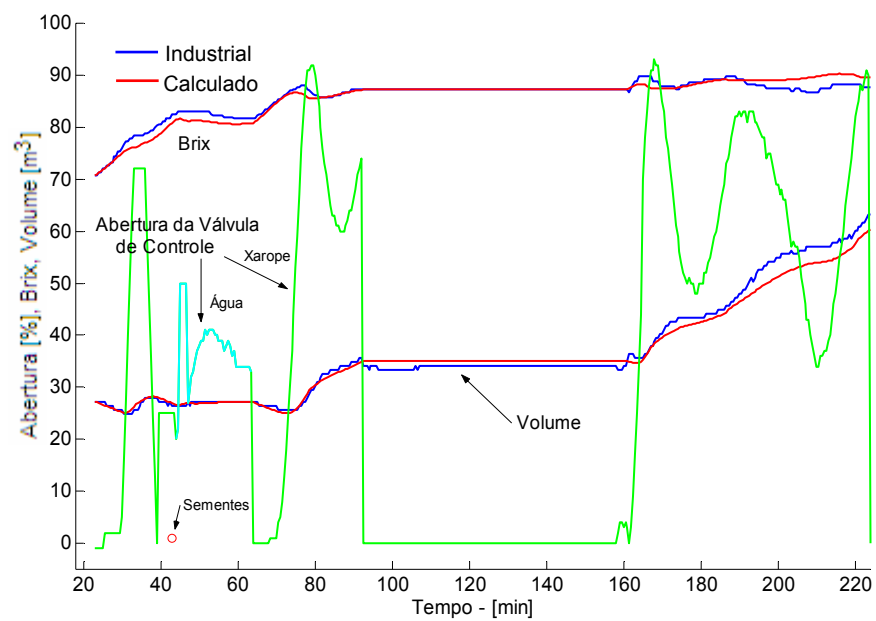
FiguraE5-4: Comparação dos valores industriais e calculados da temperatura, T , para a batelada V.

ANEXO - E6

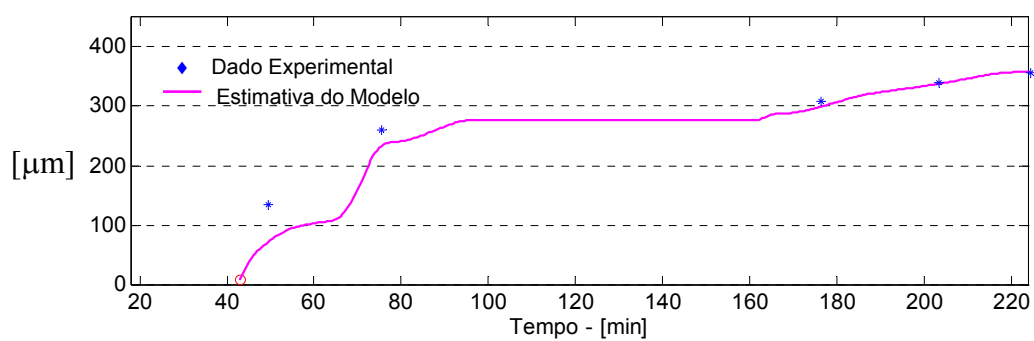
BATELADA VI

Tabela E6-1: Dados Experimentais Coletados da Batelada VI.

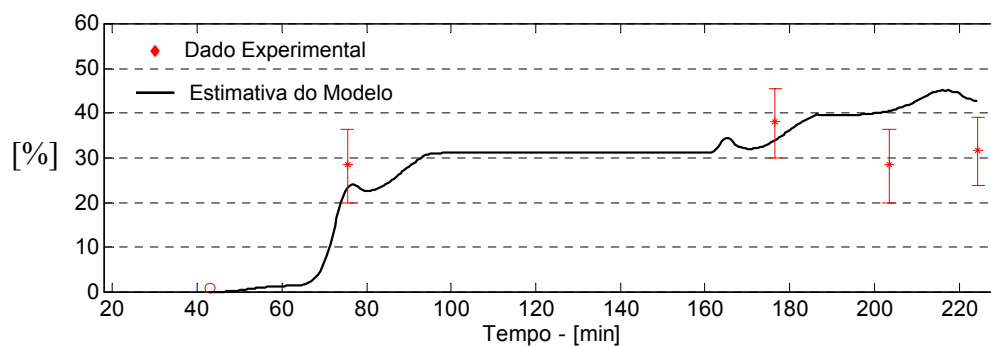
Tempo (min)	Brix Total (°Brix)	Brix (°Brix)	Diâmetro (µm)
1,5	65	0	—
15,5	71	0	—
26,5	77	0	—
36,5	80	0	—
49,5	82	0	135,50
75,5	85	79	259,41
176,5	87	79	308,89
203,5	85	79	338,71
224,5	85	78	355,50



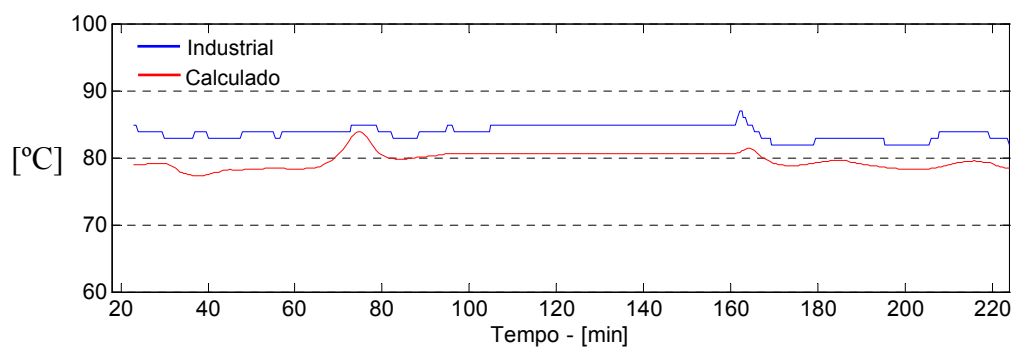
FiguraE6-1: Evolução das estimativas de Vm e BrxT para a batelada VI.



FiguraE6-2: Estimativas do diâmetro médio dos cristais para a batelada VI.



FiguraE6-3: Estimativas da fração de cristais para a batelada VI.



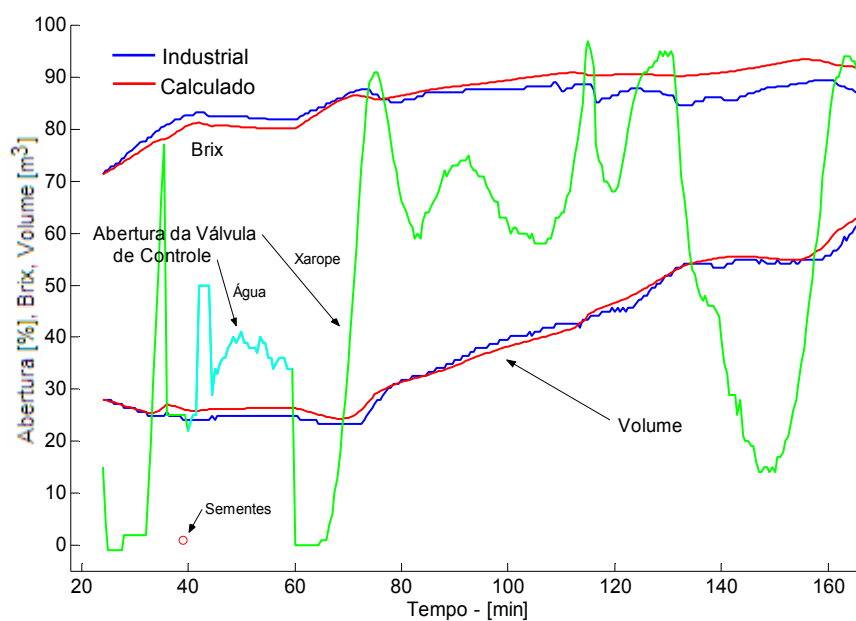
FiguraE6-4: Comparação dos valores industriais e calculados da temperatura, T , para a batelada VI.

ANEXO - E7

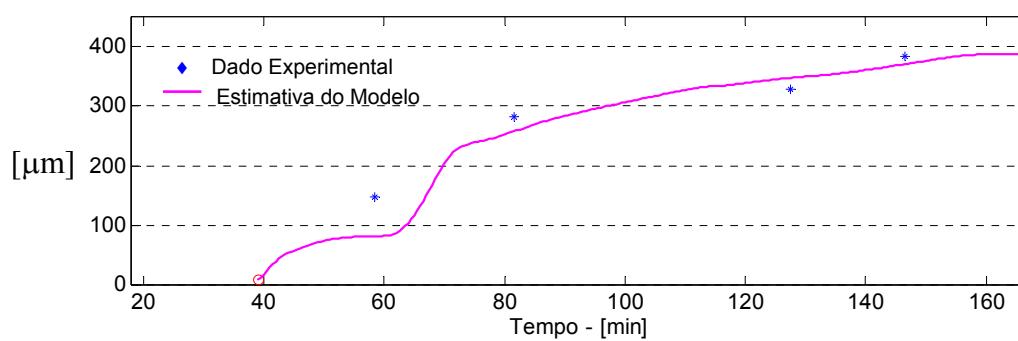
BATELADA VII

Tabela E7-1: Dados Experimentais Coletados da Batelada VII.

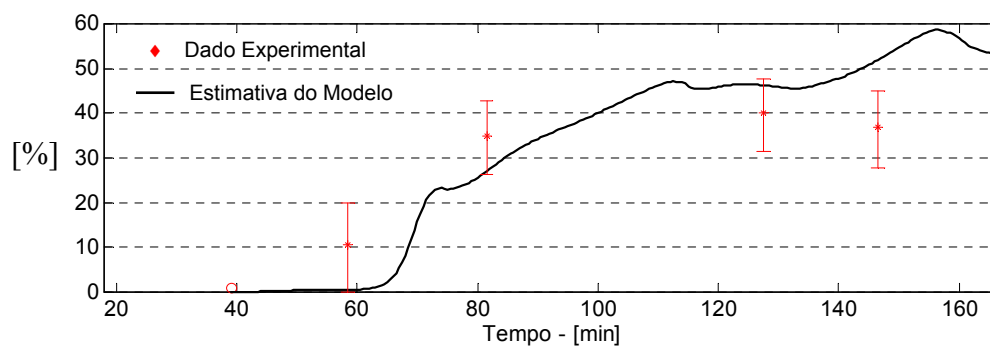
Tempo (min)	Brix Total (°Brix)	Brix (°Brix)	Diâmetro (µm)
9,5	68	0	—
25,5	75	0	—
36,5	80	0	—
46,5	82	0	—
58,5	83	81	147,04
81,5	87	80	281,31
127,5	88	80	327,36
146,5	88	81	384,19
169,5	87	79	406,88



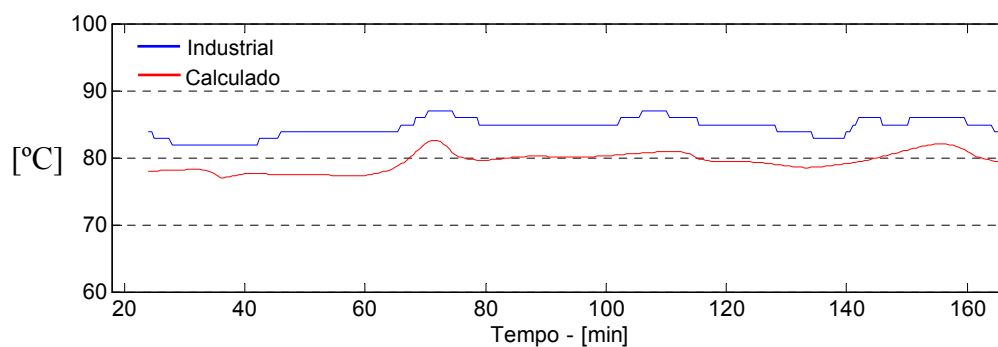
FiguraE7-1: Evolução das estimativas de V_m e Brx_T para a batelada VII.



FiguraE7-2: Estimativas do diâmetro médio dos cristais para a batelada VII.



FiguraE7-3: Estimativas da fração de cristais para a batelada VII.



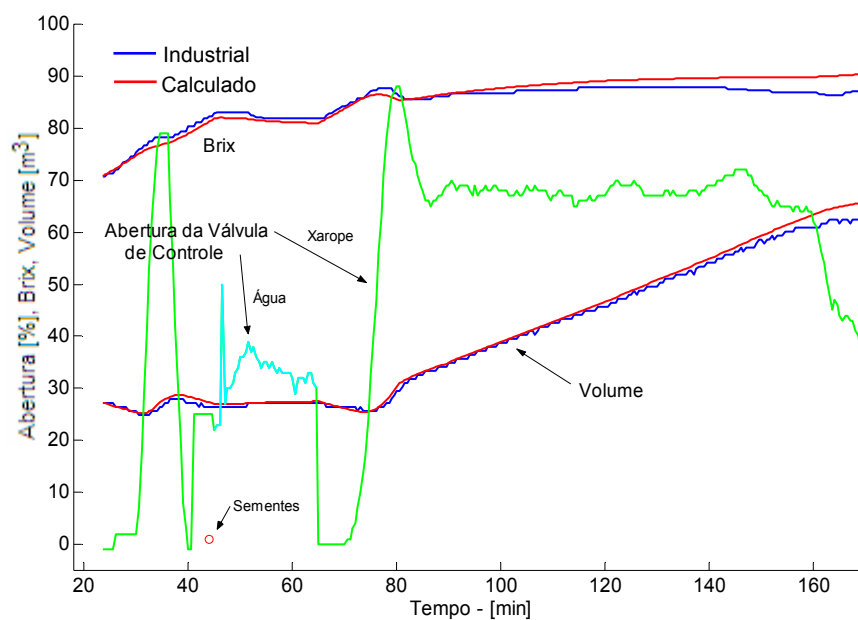
FiguraE7-4: Comparação dos valores industriais e calculados da temperatura, T , para a batelada VII.

ANEXO - E8

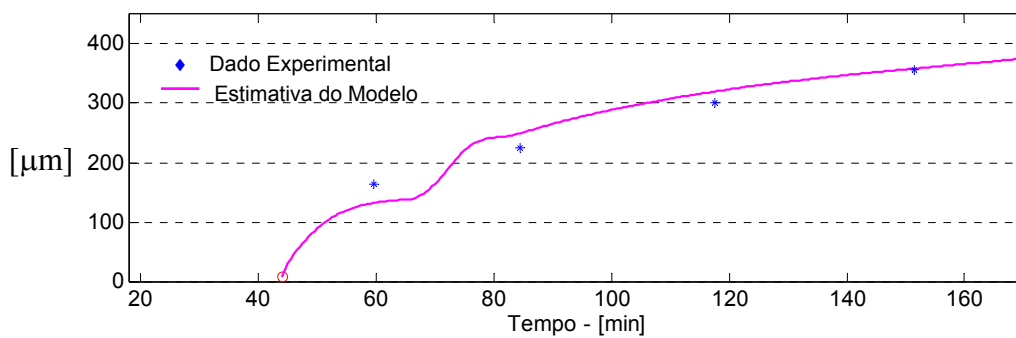
BATELADA VIII

Tabela E8-1: Dados Experimentais Coletados da Batelada VIII.

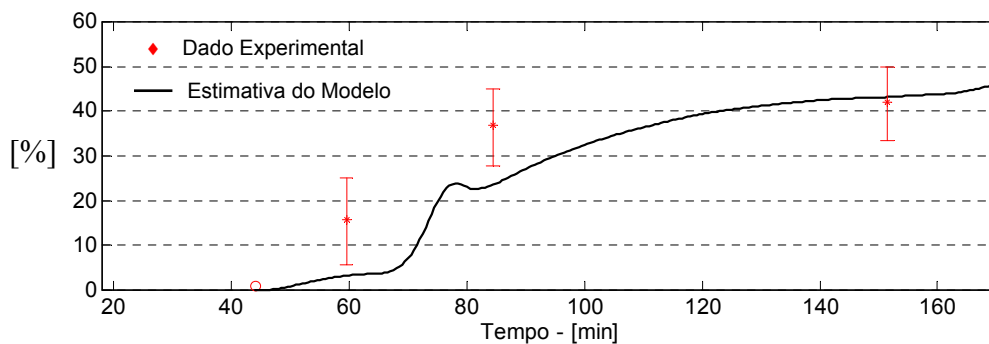
Tempo (min)	Brix Total (°Brix)	Brix (°Brix)	Diâmetro (µm)
11,5	67	0	—
21,5	73	0	—
31,5	79	0	—
42,5	83	0	—
59,5	84	81	164,35
84,5	88	81	224,68
117,5	88	81	299,76
151,5	89	81	356,08
173,5	88	81	352,14
233,5	69	0	—



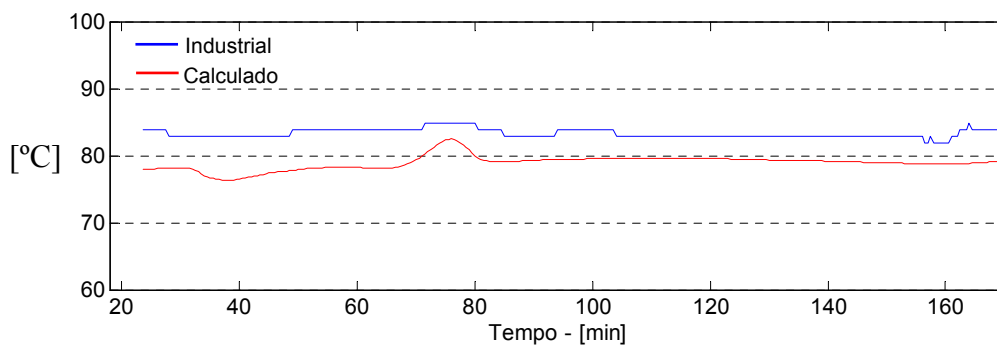
FiguraE8-1: Evolução das estimativas de Vm e BrxT para a batelada VIII.



FiguraE8-2: Estimativas do diâmetro médio dos cristais para a batelada VIII.



FiguraE8-3: Estimativas da fração de cristais para a batelada VIII.



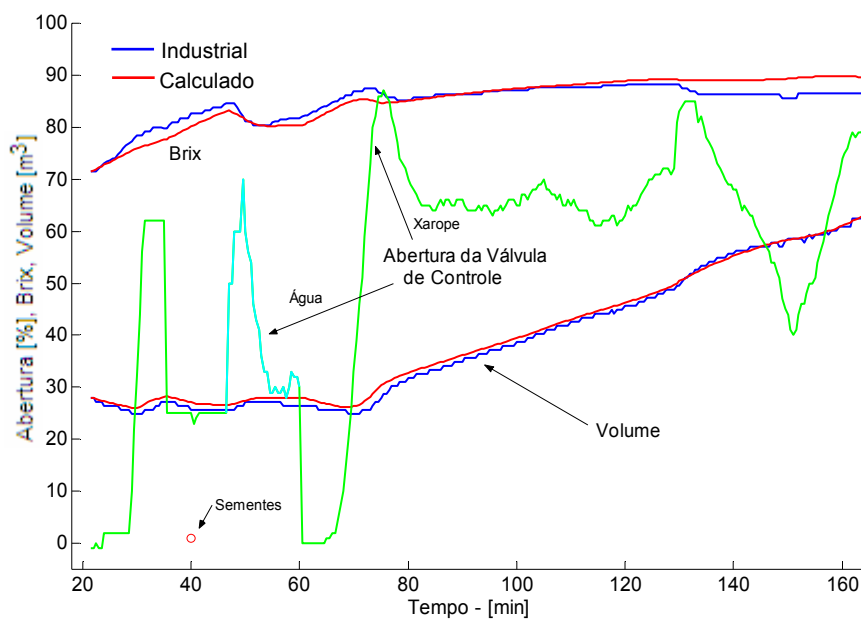
FiguraE8-4: Comparação dos valores industriais e calculados da temperatura, T , para a batelada VIII.

ANEXO - E9

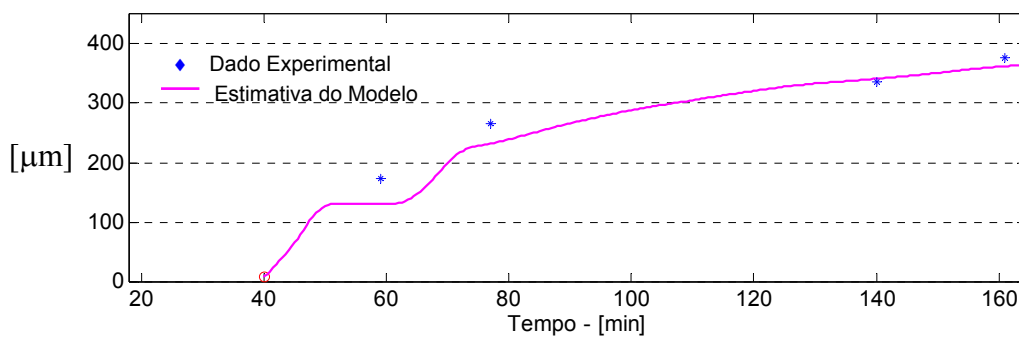
BATELADA IX

Tabela E9-1: Dados Experimentais Coletados da Batelada IX.

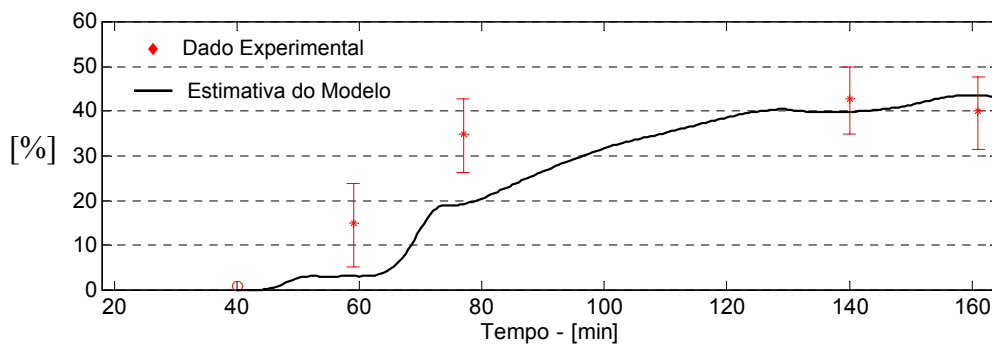
Tempo (min)	Brix Total (°Brix)	Brix (°Brix)	Diâmetro (µm)
8	67	0	—
21	74	0	—
33	80	0	—
59	83	80	172,91
77	87	80	266,26
140	88	79	334,76
161	88	80	375,83
191	88
211	67	0	—



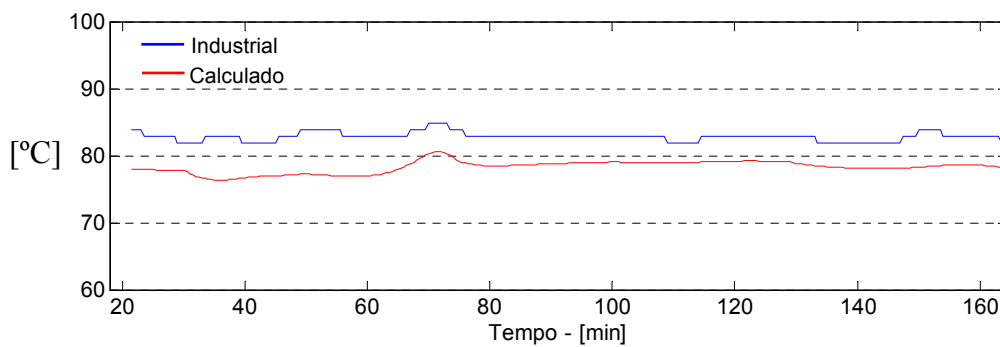
FiguraE9-1: Evolução das estimativas de Vm e BrxT para a batelada IX.



FiguraE9-2: Estimativas do diâmetro médio dos cristais para a batelada IX.



FiguraE9-3: Estimativas da fração de cristais para a batelada IX.



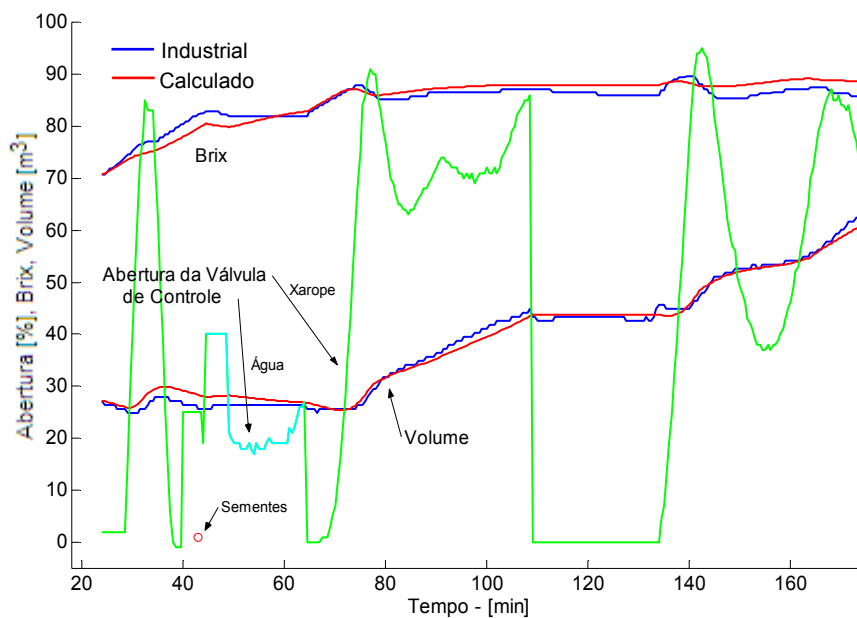
FiguraE9-4: Comparação dos valores industriais e calculados da temperatura, T , para a batelada IX.

ANEXO - E10

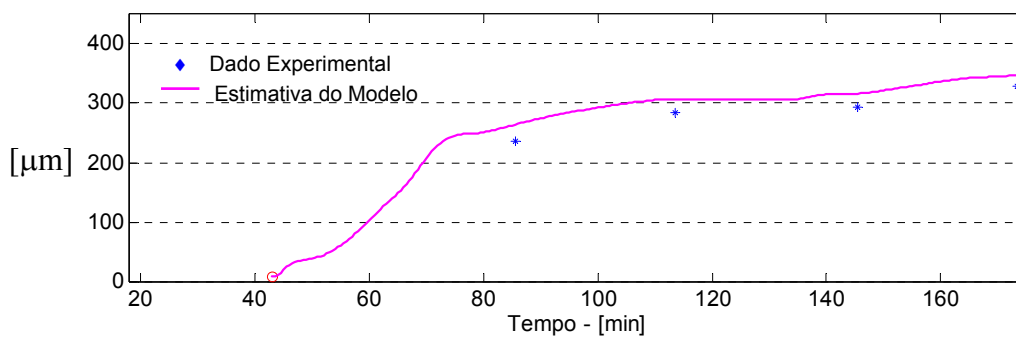
BATELADA X

Tabela E10-1: Dados Experimentais Coletados da Batelada X.

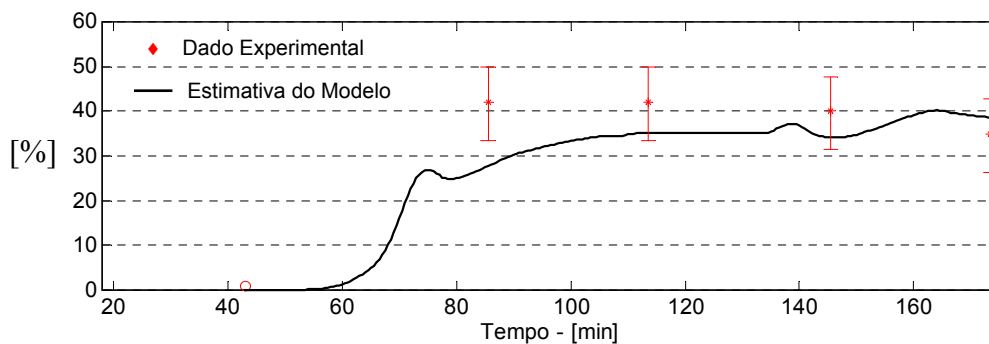
Tempo (min)	Brix Total (°Brix)	Brix (°Brix)	Diâmetro (µm)
4,5	67	0	—
20,5	72	0	—
30,5	78	0	—
38,5	81	0	—
85,5	89	81	236,25
113,5	89	81	283,80
145,5	88	80	292,33
173,5	87	80	327,63
205,5	87	80	329,84
208,5	68	0	—



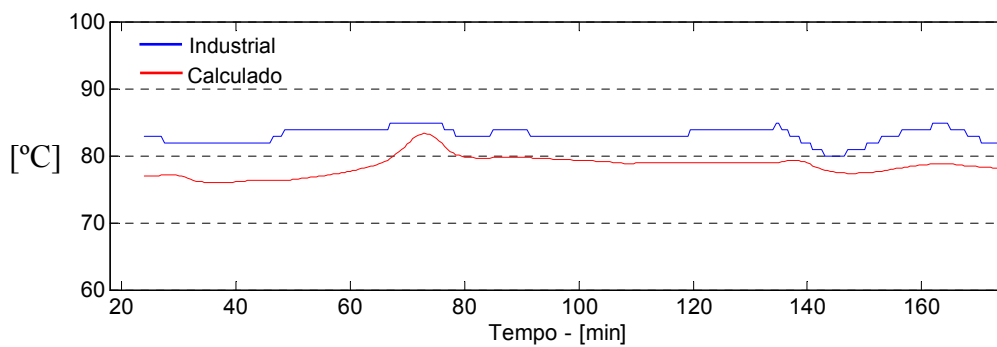
FiguraE10-1: Evolução das estimativas de Vm e BrxT para a batelada X.



FiguraE10-2: Estimativas do diâmetro médio dos cristais para a batelada X.



FiguraE10-3: Estimativas da fração de cristais para a batelada X.



FiguraE10-4: Comparação dos valores industriais e calculados da temperatura, T , para a batelada X.