



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE  
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA  
UNIDADE ACADÊMICA DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**OTIMIZAÇÃO DO RENDIMENTO DA ETAPA DE  
PRECIPITAÇÃO PARA AUMENTO DE PRODUTIVIDADE  
DO PROCESSO BAYER**

**MARIA BEATRIZ LEITE RAMOS RAFAEL**

**CAMPINA GRANDE  
2025**

**OTIMIZAÇÃO DO RENDIMENTO DA ETAPA DE PRECIPITAÇÃO PARA  
AUMENTO DE PRODUTIVIDADE DO PROCESSO BAYER**

**MARIA BEATRIZ LEITE RAMOS RAFAEL**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Prof. Dr. Luis Gonzaga Sales Vasconcelos (UFCG)

Orientador

**Campina Grande – PB**

**2025**

R136o

Rafael, Maria Beatriz Leite Ramos.

Otimização do rendimento da etapa de precipitação para aumento de produtividade do Processo Bayer / Maria Beatriz Leite Ramos Rafael. – Campina Grande, 2025.

95 f. : il. color.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2025.

"Orientação: Prof. Dr. Luis Gonzaga Sales Vasconcelos".

Referências.

1. Processo Bayer. 2. Precipitação do Hidróxido de Alumínio – Processo Bayer. 3. Alumina. 4. Aprendizado por Máquina. 5. Modelagem Híbrida. 6. Python. I. Vasconcelos, Luis Gonzaga Sales. II. Título.

CDU 666.762.11(043.3)

# OTIMIZAÇÃO DO RENDIMENTO DA ETAPA DE PRECIPITAÇÃO PARA AUMENTO DE PRODUTIVIDADE DO PROCESSO BAYER

**MARIA BEATRIZ LEITE RAMOS RAFAEL**

Dissertação apresentada em 02/06/2025

Banca Examinadora:

Documento assinado digitalmente  
 **LUIS GONZAGA SALES VASCONCELOS**  
Data: 11/07/2025 08:32:50-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

---

Prof. Dr. Luis Gonzaga Sales Vasconcelos

Documento assinado digitalmente  
 **WAGNER BRANDAO RAMOS**  
Data: 08/07/2025 15:35:46-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

---

Prof. Dr. Wagner Brandão Ramos

Documento assinado digitalmente  
 **LAERCIO GOMES DE OLIVEIRA**  
Data: 08/07/2025 11:08:45-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

---

Prof. Dr. Laercio Gomes de Oliveira

# DEDICATÓRIA

*Dedico este trabalho ao meu marido, Gabriel, por toda força,  
amor e dedicação à nossa família.*

## **AGRADECIMENTOS**

A Deus, por ter me proporcionado a luz, a paz e o amor, sem as quais eu não teria chegado ao fim deste Mestrado.

A Gabriel, meu amor, e a Laura, minha filha, que vêm me mostrando o real significado da palavra família, me dando a força necessária para realizar este trabalho.

Ao professor Luis Gonzaga, meu orientador, por toda confiança e todas as oportunidades. Uma pessoa que admiro e tenho como exemplo.

A todos os professores da Unidade Acadêmica de Engenharia Química que vem contribuindo de forma significativa para a minha formação acadêmica.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

RAFAEL, MARIA BEATRIZ LEITE RAMOS. **Otimização do Rendimento da Etapa de Precipitação para Aumento de Produtividade do Processo Bayer. 2025.** Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, 2025.

## RESUMO

O processo Bayer, principal rota para a produção de alumina, possui na etapa de precipitação um gargalo potencial para o aumento da produtividade global. A otimização do rendimento desta fase é crucial para aprimorar a eficiência e a economia do processo. O presente trabalho realiza a otimização do rendimento da etapa de precipitação do processo Bayer através do desenvolvimento de um modelo híbrido inovador. Esta abordagem combina os fundamentos da modelagem fenomenológica, que descreve os mecanismos físico-químicos subjacentes ao processo, com a capacidade preditiva de modelos baseados em técnicas de aprendizado de máquina para identificar condições operacionais otimizadas. Desta forma, tem-se a possibilidade de superar as limitações dos modelos puramente fenomenológicos, que podem apresentar dificuldades em lidar com a complexidade inerente aos processos industriais. A integração com técnicas de aprendizado de máquina permite a exploração de grandes volumes de dados operacionais e a identificação de padrões complexos, possibilitando a predição do rendimento da precipitação em função de diversas variáveis de processo. Para atingir o objetivo proposto, a metodologia adotada envolve a elaboração de um modelo fenomenológico detalhado da etapa de precipitação do processo Bayer, incorporando os principais fenômenos de nucleação, crescimento e aglomeração de partículas de hidróxido de alumínio. Para que o modelo fosse mais robusto e realista, foram consideradas a dissociação das espécies químicas e o pH. Em seguida, foi implementado um algoritmo de aprendizado de máquina em linguagem Python, utilizando dados sintéticos gerados a partir do modelo fenomenológico. Realizou-se a comparação de diferentes arquiteturas de modelagem híbrida: série, paralela e série-paralela. Através da análise comparativa das arquiteturas de modelagem híbrida, observa-se qual delas apresenta o melhor desempenho na predição do rendimento da precipitação. A implementação do modelo híbrido resulta em um aumento da produtividade, demonstrando o potencial da integração de modelagem fenomenológica e aprendizado de máquina para a otimização de processos químicos complexos.

**Palavras-chave:** Processo Bayer, Precipitação, Aprendizado de Máquina, Modelagem Híbrida, Python.

RAFAEL, MARIA BEATRIZ LEITE RAMOS. **Otimização do Rendimento da Etapa de Precipitação para Aumento de Produtividade do Processo Bayer. 2025.** Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, 2025.

## ABSTRACT

The Bayer process, the main route for alumina production, has a potential bottleneck for increasing overall productivity in its precipitation step. Optimizing the yield of this phase is crucial to improving the efficiency and economics of the process. The present work optimizes the yield of the precipitation step of the Bayer process through the development of an innovative hybrid model. This approach combines the fundamentals of phenomenological modeling, which describes the physicochemical mechanisms underlying the process, with the predictive capability of models based on machine learning techniques to identify optimized operational conditions. This way, it is possible to overcome the limitations of purely phenomenological models, which may have difficulties in dealing with the complexity and nonlinearities inherent in industrial processes. The integration with machine learning techniques allows for the exploration of large volumes of operational data and the identification of complex patterns, enabling the prediction of precipitation yield as a function of various process variables. To achieve the proposed objective, the adopted methodology first involves the elaboration of a detailed phenomenological model of the precipitation step of the Bayer process, incorporating the main phenomena of nucleation, growth, and agglomeration of aluminum hydroxide particles. For the model to be more robust and realistic, the dissociation of chemical species and pH were considered. Subsequently, a machine learning algorithm was implemented in Python, using synthetic data generated from the phenomenological model. A comparison of different hybrid modeling architectures was performed: series, parallel, and series-parallel. Through the comparative analysis of the hybrid modeling architectures, it is observed which one presents the best performance in predicting the precipitation yield. The implementation of the hybrid model results in an increase in productivity, demonstrating the potential of integrating phenomenological modeling and machine learning for the optimization of complex chemical processes.

**Keywords:** Bayer process, Precipitation, Machine Learning, Hybrid Modeling, Python.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Fluxograma típico de uma refinaria de alumina (Torres, 2001).....	15
Figura 2 - Efeito da supersaturação na cristalização (GIULIETTI et. al., 2001).....	20
Figura 3 - Fluxograma geral da etapa de precipitação do processo Bayer (Golubev e Litvinova, 2021).....	22
Figura 4 - Ramos da Inteligência Artificial (Keppner, 2018).....	26
Figura 5 - Técnicas de aprendizado de máquina (Lima Júnior, 2019).....	27
Figura 6 - Representação esquemática da analogia entre neurônio biológico e neurônio artificial (Souza, 2011).....	28
Figura 7 - Arquiteturas de modelagem híbrida: (a) série, (b) paralela e (c) série-paralela (Bhutani et al., 2007).....	31
Figura 8 - Diagrama de blocos resumindo o modelo computacional de modelagem de um precipitador do processo Bayer.....	39
Figura 9 - Diagrama de blocos resumindo o modelo computacional para geração de dados sintéticos de um precipitador do processo Bayer.....	42
Figura 10 - Diagrama de blocos resumindo o modelo computacional para a arquitetura em série.....	44
Figura 11 - Diagrama de blocos resumindo o modelo computacional para a arquitetura em paralelo.....	46
Figura 12 - Diagrama de blocos resumindo o modelo computacional para a arquitetura em série-paralelo.....	47
Figura 13 - Concentrações de partículas em crescimento ( $N_g$ ) e aglomerados ( $N_a$ ) obtidas através da reprodução do modelo proposto por Golubev e Litvinova (2021).....	50
Figura 14 - Concentrações de partículas em crescimento ( $N_g$ ) e aglomerados ( $N_a$ ) obtidas pelo modelo modificado.....	51
Figura 15 - Distribuições granulométricas das partículas decantadas obtidas pelo modelo de Golubev e Litvinova (2021) e pelo modelo modificado.....	52
Figura 16 - Variação da Composição Química no Decantador.....	54
Figura 17 - Distribuição dos dados de concentrações iniciais dos reagentes.....	55

Figura 18 - Distribuição dos dados de parâmetros do modelo.....	56
Figura 19 - Matriz de correlação entre os parâmetros do modelo fenomenológico e as concentrações iniciais dos reagentes.....	57
Figura 20 - Comparação entre os valores previstos e os valores reais da concentração de partículas em crescimento ( $N_g$ ) utilizando a arquitetura híbrida em série.....	60
Figura 21 - Comparação entre os valores previstos e os valores reais da concentração de aglomerados ( $N_a$ ) obtidos pela modelagem híbrida em série.....	61
Figura 22 - Comparação entre os valores previstos e os valores reais da concentração de aglomerados ( $N_a$ ) obtidos pela modelagem híbrida em paralelo.....	63
Figura 23 - Comparação entre os valores previstos e os valores reais da concentração de partículas em crescimento ( $N_g$ ) obtidos pela modelagem híbrida em paralelo.....	64
Figura 24 - Comparação entre os valores previstos e os valores reais da concentração de aglomerados ( $N_a$ ) obtidos pela modelagem híbrida em série-paralelo.....	66
Figura 25 - Comparação entre os valores previstos e os valores reais da concentração de partículas em crescimento ( $N_g$ ) obtidos pela modelagem híbrida em série-paralelo.....	67

## LISTA DE TABELAS E QUADROS

Quadro 1 - Reações mais importantes que acontecem durante o contato da bauxita com o licor aquecido (Kotte, 1981).....	16
Quadro 2 - Resumo dos artigos científicos mais recentes sobre precipitação de gibbsita no Processo Bayer.....	24
Tabela 1 - Valores dos parâmetros utilizados por Golubev e Litvinova (2021) na resolução do modelo matemático proposto.....	35
Quadro 3 - Reações de dissociação das espécies químicas presentes no processo de precipitação.....	36
Tabela 2 - Métricas de desempenho do modelo híbrido em série.....	59
Tabela 3 - Métricas de desempenho do modelo híbrido em paralelo.....	62
Tabela 4 - Métricas de desempenho do modelo híbrido em série-paralelo.....	65

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

Símbolo	Descrição	Unidade
A	Fator pré-exponencial da equação de Arrhenius	1/s
Al(OH) <sub>3</sub>	Hidróxido de alumínio (gibbsite)	
Al(OH) <sub>4</sub> <sup>-</sup>	Íon aluminato	
ANN	Artificial Neural Network (Rede Neural Artificial)	
b <sub>0</sub>	Bias do neurônio artificial	
C	Concentração	mol/L
C_AlOH3	Concentração de Al(OH) <sub>3</sub>	mol/L
C_Na2CO3	Concentração de Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	mol/L
C_Na2SO4	Concentração de Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	mol/L
C_NaAlOH4	Concentração de NaAlO <sub>2</sub>	mol/L
C_NaCl	Concentração de NaCl	mol/L
C_NaOH	Concentração de NaOH	mol/L
C_eq	Concentração de equilíbrio do aluminato	mol/L
C_supersat	Supersaturação do licor	mol/L
CSV	Formato de arquivo Comma-Separated Values	
E <sub>a</sub>	Energia de ativação	J/mol ou kJ/mol
EDO	Equação Diferencial Ordinária	
f <sub>a</sub>	Fração de aglomerados: $N_a / (N_g + N_a)$	
FPM	Fenomenological Process Model (Modelo Fenomenológico)	
H <sup>+</sup>	Íon hidrogênio (próton)	
k <sub>1</sub> , k <sub>2</sub>	Constantes cinéticas da reação	1/(m <sup>3</sup> ·s)
k_aa	Constante de fragmentação de aglomerados	1/s
k_b	Constante de quebra de partículas	1/s

$k_{ga}$	Constante de aglomeração heterogênea	1/s
$k_{gc}$	Constante de crescimento de partículas	1/s
$k_{gg}$	Constante de aglomeração homogênea	1/s
$k_{n1}$	Constante de nucleação primária	$1/(m^3 \cdot s)$
$k_{n2}$	Constante de nucleação secundária	$1/(m^3 \cdot s)$
$L_{\square}$	Tamanho médio dos cristais	$\mu m$
MAE	Mean Absolute Error	
MLP	Multi-Layer Perceptron	
MSE	Mean Squared Error	
$N_a$	Concentração de aglomerados	Número de partículas/L
$N_{aa}$	Taxa líquida de crescimento de aglomerados	Número de partículas/(L · s)
$N_{a\beta}$	Perda de aglomerados por fragmentação	Número de partículas/(L · s)
$N_g$	Concentração de partículas em crescimento	Número de partículas/L
$N_{g_a}$	Número de partículas consumidas por aglomeração	Número de partículas/(L · s)
$N_{g\beta}$	Número de partículas produzidas por fragmentação	Número de partículas/(L · s)
$N_{g_{\square}}$	Número de partículas produzidas por nucleação	Número de partículas/(L · s)
$NaAlO_2$	Aluminato de sódio	
$NaCl$	Cloreto de sódio	
$NaOH$	Hidróxido de sódio	
$Na_2CO_3$	Carbonato de sódio	
$Na_2SO_4$	Sulfato de sódio	
$Ng_{final}$	Concentração final de partículas em crescimento	Número de partículas/L
$OH^-$	Íon hidroxila	

pH	Potencial hidrogeniônico	
R	Constante universal dos gases	J/(mol · K)
R <sup>2</sup>	Coefficiente de determinação	
RK45	Método de Runge-Kutta de quarta ordem com passo adaptativo	
RNA	Rede Neural Artificial	
RMSE	Root Mean Squared Error	
T	Temperatura	K
t	Tempo	s
$u_{\square}$	Soma ponderada das entradas no neurônio	
$v_{\square}$	Potencial local induzido (no neurônio)	
$x_{\square}$	Entrada j do neurônio	
$y_{\square}$	Saída do neurônio k	
$\phi$	Fator de crescimento de aglomerados	
$\varepsilon$	Erro residual	
$\mu$	Erro médio	
$\omega_{\square\square}$	Peso sináptico da RNA	

# SUMÁRIO

<b>1 - Introdução.....</b>	<b>9</b>
<b>2 - Objetivos.....</b>	<b>13</b>
2.1 Objetivo Geral.....	13
2.2 Objetivos Específicos.....	13
<b>3 - Revisão Bibliográfica.....</b>	<b>15</b>
3.1 O Processo Bayer.....	15
3.2 Precipitação do Hidróxido de Alumínio no Processo Bayer.....	17
3.2.1 Nucleação.....	19
3.2.2 Crescimento e Aglomeração.....	20
3.2.4 Descritivo do Processo.....	21
3.2.5 Estado da Arte.....	23
3.3 Aprendizado de Máquina.....	25
3.3.1 Redes Neurais Artificiais.....	27
3.3.2 Modelagem Híbrida.....	29
<b>4 - Metodologia.....</b>	<b>33</b>
4.1 Modelagem Fenomenológica do Precipitador.....	33
4.1.1 Método de Equilíbrio Populacional.....	33
4.1.2 Modelagem da Dissociação das Espécies Químicas.....	36
4.1.3 Modelagem Computacional.....	37
4.2 Geração de Dados Sintéticos.....	40
4.3 Modelagem Híbrida.....	42
4.3.1 Arquitetura em Série.....	42
4.3.2 Arquitetura em Paralelo.....	44
4.3.3 Arquitetura Série-Paralelo.....	46
<b>5 - Resultados e Discussões.....</b>	<b>49</b>
5.1 Modelagem Fenomenológica do Precipitador.....	49
5.1.1 Validação do Modelo.....	49
5.2 Geração de Dados Sintéticos.....	54

5.3 Modelagem Híbrida.....	58
5.3.1 Arquitetura em Série.....	58
5.3.2 Arquitetura em Paralelo.....	61
5.3.3 Arquitetura em Série-Paralelo.....	64
<b>6 - Conclusão.....</b>	<b>69</b>
<b>7 - Referências Bibliográficas.....</b>	<b>72</b>
<b>Apêndice 1 - Códigos.....</b>	<b>76</b>
A - Reprodução o modelo de Golubev e Litivnova (2021).....	76
B - Código modificado considerando as dissociações dos compostos químicos e pH.....	78
C - Código da Modelagem Híbrida em Série.....	82
D - Código da Modelagem Híbrida em Paralelo.....	85
E - Código da Modelagem Híbrida em Série-Paralelo.....	88

# Capítulo 1

## Introdução

## 1 - Introdução

O alumínio, um metal leve e resistente com uma ampla variedade de aplicações, é utilizado em diversas áreas, dentre elas equipamentos aeroespaciais, onde substitui o aço em motores e estruturas metálicas, na indústria automobilística, onde a incorporação de alumínio nas estruturas e motores têm contribuído significativamente para a redução do consumo de combustível e, conseqüentemente, para a diminuição das emissões de gases de efeito estufa. Além disso, o óxido de alumínio ( $Al_2O_3$ ), conhecido como alumina, é a matéria-prima para a produção do alumínio e encontra aplicação em produtos como creme dental, catalisadores heterogêneos, pigmentos, vidro, abrasivos e muito mais (Rodrigues, 2018).

O alumínio para a indústria é obtido a partir de minerais de bauxita, produtos de rochas que contêm minerais de alumínio em sua composição e que passaram por processos de intemperismo e lixiviação. A bauxita é um minério composto principalmente pela alumina, mas também contém uma mistura de outros óxidos, incluindo óxido de ferro ( $Fe_2O_3$ ), sílica ( $SiO_2$ ) e titânio ( $TiO_2$ ), entre outros.

As reservas globais de bauxita totalizam, em média, 34 bilhões de toneladas, com cerca de 10% desse montante (equivalente a 3,4 bilhões de toneladas) localizadas no Brasil, o que coloca o país como o terceiro maior detentor de reservas desse recurso natural no mundo. A grande maioria, aproximadamente 90%, das reservas brasileiras está concentrada nos estados do Pará e Amazonas, onde são exploradas por empresas como a Alunorte. A produção dessas minas é principalmente voltada para a indústria metalúrgica (Departamento Nacional de Produção Mineral, 2022).

Os principais métodos de beneficiamento da bauxita incluem o processo Bayer, que transforma a bauxita em óxido de alumínio, e o processo *Hall-Héroult*, que converte o óxido de alumínio em alumínio metálico. No processo Bayer, as etapas fundamentais são: (i) a digestão da bauxita em uma solução cáustica; (ii) a clarificação e filtração dos produtos resultantes da digestão; (iii) a cristalização e precipitação do hidróxido de alumínio através da introdução de sementes de cristais de alumina; e, por fim, (vi) a calcinação, que é crucial para a obtenção do óxido de alumínio, usado na produção de alumínio metálico.

Dentre as etapas do processo Bayer, a que apresenta maior complexidade e poucos estudos é o processo de cristalização e precipitação do hidróxido de alumínio. Devido a sua

complexidade, eram poucos os pesquisadores que desenvolviam trabalhos sobre essa etapa. Contudo, com o avanço das tecnologias de pesquisa e instrumentos de bancada, esse processo tem ganhado maiores recursos para pesquisa. A etapa de precipitação do hidróxido de alumínio é de fundamental importância, pois determina a eficiência de todo o processo industrial, uma vez que o material não precipitado retorna ao processo de digestão, no início do ciclo. Por isso, quanto mais eficiente for o processo de precipitação, mais eficiente será o processo Bayer (Lindsay, 2005).

A utilização de aprendizado de máquina tem se destacado como uma ferramenta valiosa na modelagem e simulação da etapa de precipitação do processo Bayer na produção de alumina (Golubev et. al., 2021). Esta etapa é crucial para determinar a qualidade do produto final e otimizar a eficiência operacional. As técnicas de aprendizado de máquina permitem analisar uma ampla gama de variáveis, como temperatura, pressão, concentração de reagentes e características da semente de cristal, para prever com uma maior precisão o comportamento da precipitação. Além disso, os algoritmos de aprendizado de máquina podem ser treinados com dados históricos de processos reais, identificando padrões e relações complexas que podem não ser evidentes por métodos tradicionais. Isso possibilita a otimização em tempo real das condições de precipitação, maximizando o rendimento e a qualidade do hidróxido de alumínio produzido no processo Bayer.

Com a capacidade de identificar padrões complexos e relações sutis nos dados do processo, esses algoritmos têm o potencial de melhorar ainda mais a eficiência, reduzir o desperdício e aumentar a competitividade da indústria do alumínio. Além disso, ao aprimorar a previsão e o controle da etapa de precipitação, os algoritmos de aprendizado de máquina contribuem para a redução dos custos de produção e o uso mais eficiente dos recursos naturais, promovendo práticas mais sustentáveis na indústria. Assim, eles desempenham um papel fundamental na melhoria contínua dos processos industriais e na busca por soluções mais eficazes e amigáveis ao meio ambiente.

A etapa de precipitação do processo Bayer é fundamental para a eficiência global da produção de hidróxido de alumínio, sendo diretamente responsável pelo rendimento do processo. No entanto, a complexidade das reações envolvidas, aliada às variáveis operacionais, torna difícil prever e otimizar seu comportamento utilizando apenas abordagens tradicionais. Nesse sentido, a combinação de modelos fenomenológicos com técnicas de aprendizado de máquina surge como uma estratégia inovadora e eficaz, permitindo representar tanto os fundamentos físico-químicos quanto as variabilidades observadas em dados reais ou simulados. O desenvolvimento e análise de diferentes arquiteturas de modelos

híbridos possibilitam uma compreensão mais aprofundada do processo, contribuindo para a definição de condições operacionais mais eficientes. Assim, este trabalho se justifica pela necessidade de aprimorar a representação matemática do processo de precipitação, proporcionando uma ferramenta robusta para tomada de decisão e controle operacional, com impacto direto na produtividade, na economia de insumos e na redução de impactos ambientais.

# Capítulo 2

## Objetivos

## **2 - Objetivos**

### **2.1 Objetivo Geral**

Esta pesquisa tem como objetivo geral utilizar modelagem híbrida, integrando um modelo fenomenológico e um modelo baseado em dados, para realizar a otimização do rendimento da etapa de precipitação do processo Bayer, aumentando, assim, sua produtividade.

### **2.2 Objetivos Específicos**

- Realizar a modelagem fenomenológica do processo Bayer.
- Implementar, em linguagem Python, o algoritmo de Aprendizado de Máquina.
- Comparar as arquiteturas de modelagem híbrida: série, paralela e série-paralela; e verificar qual traz os melhores resultados.

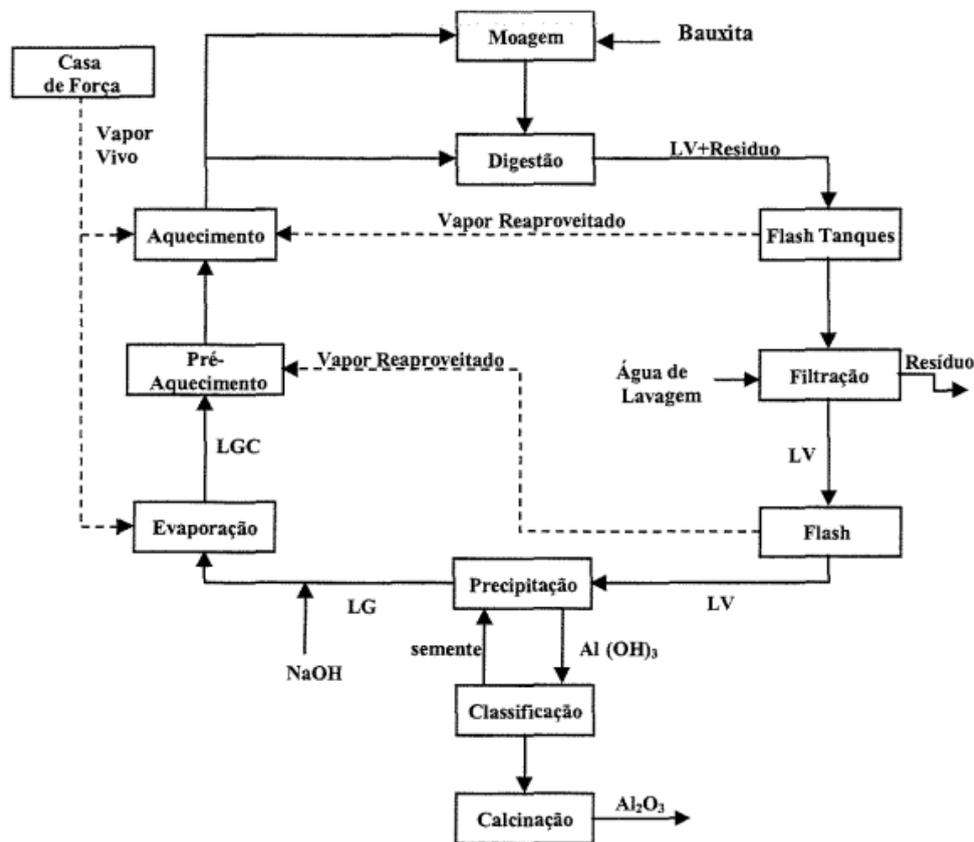
# **Capítulo 3**

## **Revisão Bibliográfica**

### 3 - Revisão Bibliográfica

#### 3.1 O Processo Bayer

O processo Bayer desempenha um papel fundamental na produção mundial de alumina, com o objetivo principal de purificar a alumina contida na bauxita. Para atingir esse propósito, utiliza-se o licor, uma solução concentrada de soda cáustica com uma fração de aluminato de sódio. Este licor passa por uma série de processos, detalhados na Figura 1, onde LV é o licor verde, LG o licor gasto e LGC é o licor gasto corrigido. As principais matérias-primas empregadas no processo incluem soda cáustica, bauxita, cal, combustível e aditivos, como floculantes e redutores de incrustações.



**Figura 1** - Fluxograma típico de uma refinaria de alumina (Torres, 2001).

Nota-se que esse processo inclui quatro etapas principais: digestão, clarificação, precipitação e calcinação. A bauxita é retirada da jazida e então estocada na fábrica, onde ocorre o primeiro procedimento básico de limpeza e separação de rochas e vegetais, ou

impurezas desse porte. Encaminha-se, então, o produto para o moinho de martelos em uma esteira, e nesse percurso, ele é submetido a eletroímãs que retiram outros metais indesejados ou inúteis.

De acordo com Rodrigues (2018), temos as seguintes caracterizações das etapas do processo Bayer:

### **I. Digestão:**

Essa fase do processo é a responsável por retirar o material desejado de sua matriz mineral. A fase não se refere somente aos digestores, reatores de tanque contínuos e bem agitados, onde as reações características do processo acontecem, mas também a algumas outras operações que são necessárias para esse fim. A digestão inicia na alimentação da bateria de evaporadores, e vai até a descarga do flasheamento do licor.

No Quadro 1 estão as reações mais importantes que acontecem durante a digestão, no contato da bauxita com o licor aquecido.

**Quadro 1** - Reações mais importantes que acontecem durante o contato da bauxita com o licor aquecido (Kotte, 1981).

1	Dissolução da gibsita.
2	Dissolução da boemita.
3	Dissolução da diáspora.
4	Conversão de alumino-goetita para hematita e alumina dissolvida.
5	Conversão da gibsita para boemita.
6	Conversão da boemita para diáspora.
7	Dissolução da caulinita.
8	Dissolução do quartzo.
9	Precipitação do produto da dessilicação (DSP – Desilication Product).
10	Transformação do fosfato em hidroxiapatita.

### **II. Clarificação:**

A seção de clarificação tem como finalidade, separar o licor (fase líquida) do resíduo (fase sólida) e também, lavar esse resíduo de modo que o mínimo de soda cáustica seja liberada ao meio ambiente. O circuito de clarificação consiste em um conjunto de decantadores, lavadores e filtros (Laros e Baczek, 2009).

O resíduo do processo Bayer, a lama vermelha, é tipicamente enviado para lagos ou depósitos de resíduos sólidos, dependendo do processo adotado pela refinaria em questão. Tal material é tópico recorrente nas pesquisas da área, dado que a produção é alta e não há, até então, usos para ele na proporção em que é produzido.

### **III. Precipitação:**

O licor rico clarificado é então alimentado à região de precipitação. A corrente de licor rico passa por um processo de resfriamento em evaporadores a vácuo e trocadores de calor do tipo placa, onde troca calor com as correntes de licor pobre ou com a corrente de água procedente das torres de resfriamento para, em seguida, ser alimentada à linha de precipitação. É nessa fase do processo que o produto é obtido e qualquer precipitação de gipsita fora dessa zona resulta em perda de eficiência.

Tipicamente, uma carga de sementes de menor granulometria é adicionada no primeiro tanque para estimular aglomeração e, nos tanques posicionados a frente, adiciona-se a parcela de semente de maior granulometria para alcançar a concentração de sólidos e a área superficial especificada pelo processo (Hudson et al., 2000). As variáveis pertinentes para o controle desta etapa do processo são: vazão de licor alimentado, quantidade de semente adicionada e temperatura alcançada durante o circuito, já que a reação é exotérmica.

### **IV. Calcinação:**

Etapa final em que a alumina é submetida, a lavagem para retirada de qualquer resquício do licor (ou da soda cáustica), em seguida é seca. Posteriormente, calcina-se a alumina a aproximadamente 1000°C, para que os cristais se desidratem e formem novos, apenas de alumina (brancos e arenosos).

## **3.2 Precipitação do Hidróxido de Alumínio no Processo Bayer**

A cristalização do hidróxido de alumínio ( $Al(OH)_3$ ) a partir da solução de aluminato cáustico é a etapa determinante na velocidade dentro do processo Bayer, que é usada na produção de alumina primária. O controle da distribuição do tamanho de partículas, através da manipulação das condições de solução, é necessário para minimizar a produção de partículas (LI et. al., 2005).

A Cristalização é uma operação de separação, onde partindo de uma mistura líquida se obtêm cristais de um dos componentes da mistura. Na cristalização criam-se as condições

termodinâmicas que levam as moléculas a aproximarem-se e a agruparem-se em estruturas altamente organizadas, os cristais. Por vezes, as condições operacionais não permitem obter cristais 100% puros verificando-se a existência, nos cristais, de impurezas de moléculas que também têm grande afinidade para o soluto (MACIEL, 2015).

A força motriz para a cristalização é a existência de supersaturação na mistura líquida, ou seja, a existência de uma concentração de soluto na solução superior à concentração de saturação (limite de solubilidade). Este estado é naturalmente muito instável, daí ser possível a nucleação. Contudo, para haver cristalização é necessário ocorrer agitação ou circulação da mistura líquida, a qual provoca a aproximação e choque entre as moléculas, ocorrendo transferência de quantidade de movimento (MACIEL, 2015).

Muitas vezes, para tornar o processo de cristalização mais rápido, podem-se introduzir sementes (núcleos) no cristalizador, esse processo é chamado de nucleação secundária, uma vez formado o núcleo o cristal começa a crescer, e essa etapa é o de crescimento do cristal. A velocidade de agitação ou circulação no cristalizador, o grau de supersaturação e a temperatura são parâmetros operacionais que condicionam a velocidade de crescimento dos cristais e as características do produto final. Além disso, uma das características do processo de cristalização é a de que o mesmo composto pode dar origem a formas cristalinas diferentes (polimorfismo) dependendo das condições de operação. Os diferentes tipos de cristais, que correspondem a condições termodinâmicas, no estado sólido, diferentes para o mesmo composto, terão propriedades distintas e, como tal, correspondem a produtos diferentes (MACIEL, 2015).

A precipitação é uma forma particular de cristalização que ocorre em elevados níveis de supersaturação de solução de aluminato de sódio. O processo de precipitação não semeado tende a ser gelatinoso ou formar cristais muito pequenos que são difíceis de serem filtrados e lavados. Processos semeados, no entanto, formam partículas de tamanhos bem maiores que são mais convenientes de serem manuseados em processos subsequentes (GROENEWEG, 1972).

A precipitação é uma operação importante dentro do processo Bayer, na qual ocorre a separação do tri-hidróxido de alumínio contida no licor na forma solúvel. Esta acontece através dos cristais de semente de hidrato previamente precipitado que se depositam sobre a alumina em solução, ou seja, os íons de aluminato migram para a superfície de cristais de sementes para serem incorporados como parte do sólido, reduzindo o tempo necessário para

precipitação e sendo uma medida de controle sobre o tamanho de partícula do produto (AZEVEDO JÚNIOR, 2015).

A precipitação industrial, fundamental para o processo Bayer, é uma etapa complexa que pode ser dividida em três etapas principais: nucleação, crescimento e aglomeração. As partículas de  $Al(OH)_3$  crescem por meio das etapas de crescimento e da aglomeração, no entanto, novas partículas são geradas, simultaneamente, através da nucleação.

### 3.2.1 Nucleação

Segundo GIULIETTI et al. (2001), a nucleação primária acontece quando a formação inicial dos cristais acontece na ausência de cristais pré-existentes. Se a solução é completamente pura, a nucleação se dá por meio de um mecanismo homogêneo. Todavia, se houver a presença de impurezas sólidas no meio a nucleação ocorre de maneira heterogênea.

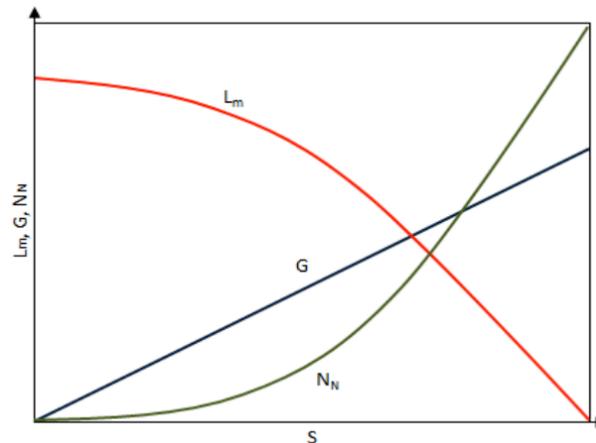
Na nucleação primária as próprias superfícies sólidas do cristalizador podem ser agentes de nucleação. Uma vez formados os primeiros cristais, pequenos fragmentos desses cristais podem transformar-se também em novos núcleos (MACIEL, 2015).

A nucleação secundária ocorre pelo processo de colisão, causando quebras entre as partículas e agindo sobre os cristais semente e está fortemente associada com o mecanismo de crescimento de cristal pela nucleação superficial (de superfície). Quando a área superficial dos cristais semente é insuficiente para permitir as taxas de crescimento que a supersaturação do sistema pode suportar, altas concentrações de íons aluminato formam-se nas superfícies dos cristais semente, mais rápido do que a sua incorporação na rede cristalina (AMARAL, 2004).

Quando a nucleação secundária ocorre, o número de cristais novos gerados é usualmente muito maior que o número de cristais semente presentes. Assim sendo, para um controle efetivo na distribuição do tamanho de partículas é necessário estar apto a controlar a taxa de nucleação secundária (AMARAL, 2004)

A formação de núcleos cristalinos, a nucleação, é um processo que define o tamanho dos cristais do produto, suas propriedades físicas e pureza. De acordo com GIULIETTI et al. (2001), o requisito fundamental para a operação de um processo de cristalização é o controle do número de cristais gerados, isto é, da velocidade de nucleação. A Figura 2 mostra que com o aumento da supersaturação (S), a velocidade ou taxa de crescimento cristalino (G) aumenta

quase linearmente e a velocidade ou a taxa de nucleação ( $N_N$ ), inicialmente desprezível, cresce rapidamente em supersaturação maior. Essa dependência se reflete no tamanho médio dos cristais ( $L_m$ ), de forma que, para supersaturação maior, o tamanho médio dos cristais diminui significativamente.



**Figura 2** - Efeito da supersaturação na cristalização (GIULIETTI et. al., 2001).

### 3.2.2 Crescimento e Aglomeração

O crescimento de cristais é um processo de difusão modificado pelo efeito de superfícies sólidas em que o crescimento ocorre. As moléculas ou íons do soluto atingem as faces de um cristal em crescimento por difusão, através da fase líquida. O crescimento dos cristais acontece através do aumento do cristal em um período de tempo, pela deposição de novas camadas, ou seja, o acúmulo de material cristalino na superfície da semente. As taxas de crescimento são em geral baixas levando a elevados tempos de residência na precipitação. Todas as partículas crescem à mesma taxa linear, normalmente relacionado a uma face do cristal, esta taxa é favorecida positivamente pela temperatura e supersaturação (AZEVEDO JÚNIOR, 2015).

Aglomeração é um importante estágio do processo Bayer, onde o tamanho inicial das partículas começa a aumentar. É o processo através do qual pequenas partículas colidem e aderem umas às outras, formando partículas maiores. A sementação das partículas aderidas ocorre por deposição de partículas entre elas (MACIEL, 2015).

Quanto maior a supersaturação, maior o número de colisões entre as partículas e, conseqüentemente, maior a aglomeração. Este processo também envolve forças de atração

entre as partículas, dependendo diretamente da facilidade de deslocamento das partículas no meio. Assim, aumentando-se a temperatura, a viscosidade do licor diminui e facilita a interação entre as partículas, auxiliando a aglomeração. A diminuição da temperatura, em contrapartida, desfavorece a aglomeração e torna o licor mais viscoso (AZEVEDO JÚNIOR, 2015).

### **3.2.4 Descritivo do Processo**

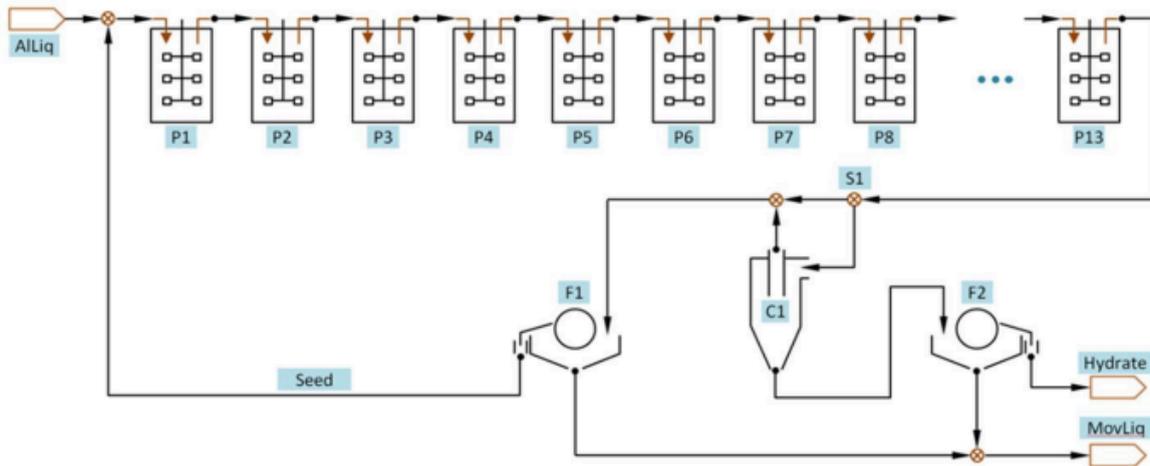
A precipitação, no processo produtivo de alumina, é uma etapa crucial que visa a recuperação máxima de alumina do licor rico e a obtenção de um hidrato de alumina cristalino com tamanho de partícula adequado. Este hidrato é essencial para as etapas subsequentes de calcinação e redução, que culminam na produção de alumínio primário. A pureza do produto é de grande importância, uma vez que a principal fonte de impurezas na alumina produzida reside na contaminação do hidrato durante a precipitação. Logo, um controle rigoroso do processo de precipitação é indispensável para garantir a qualidade do produto final (Moraes et al., 2013).

A etapa de classificação é composta por unidades de separação centrífuga primária e secundária, além de um espessador terciário, responsável pela remoção de partículas finas. O circuito de precipitação possui uma fase de aglomeração, na qual o primeiro e os últimos precipitadores desempenham um papel fundamental na formação e consolidação dos agregados. A fase de crescimento compreende doze tanques, enquanto a etapa de classificação conta com um tanque adicional.

A temperatura nos reservatórios correspondente aos estágios iniciais, intermediários e finais de crescimento é monitorada, possibilitando o controle térmico de determinados tanques. Além disso, a dissipação de calor ocorre predominantemente por convecção natural com o meio ambiente.

Uma corrente contendo licor rico, solução supersaturada isenta de sólidos, é introduzida no circuito de alimentação. A massa resultante percorre os tanques de mudanças, promovendo o aumento da massa cristalina. O efluente do último reservatório de crescimento é direcionado para o separador centrífugo primário, cuja função é segregar o produto cristalino da fração reciclada. O produto final é removido do sistema, enquanto a fração reciclada passa por uma nova etapa de classificação, na qual as partículas de maior dimensão são separadas

no separador centrífugo secundário. Por fim, as partículas mais finas são removidas da solução por meio de um processo gravitacional em um espessador terciário. Os sólidos sedimentados nessa unidade são reaproveitados como sementes finas, enquanto o líquido clarificado é descartado como solução esgotada. Na Figura 3 está apresentado o fluxograma geral da etapa de precipitação do processo Bayer.



**Figura 3** - Fluxograma geral da etapa de precipitação do processo Bayer (Golubev e Litvinova, 2021).

O precipitador é um equipamento amplamente utilizado em processos industriais cujo princípio de funcionamento baseia-se na separação de sólidos formados por reações químicas em meio líquido, geralmente por meio de nucleação e crescimento de partículas. No contexto do processo Bayer, utilizado para a extração de alumina a partir da bauxita, o precipitador desempenha papel essencial na etapa de recuperação da alumina em forma de  $\text{Al}(\text{OH})_3$ , a partir de soluções supersaturadas de  $\text{NaAlO}_2$ . A operação do precipitador envolve a indução da precipitação controlada de  $\text{Al}(\text{OH})_3$ , que ocorre por meio de mecanismos físico-químicos como nucleação primária, para a formação de novos cristais, crescimento de cristais existentes e aglomeração de partículas, promovendo o aumento de massa e o posterior decaimento por gravidade ou filtração.

O desempenho de um precipitador está intimamente ligado a parâmetros operacionais como supersaturação da solução, temperatura, pH, tempo de residência, e características hidrodinâmicas internas. A supersaturação atua como força motriz para a nucleação e o crescimento das partículas, enquanto o pH afeta diretamente os equilíbrios químicos e a solubilidade do hidróxido de alumínio. O controle adequado dessas variáveis permite otimizar

a eficiência da precipitação, assegurando a formação de cristais com tamanho e morfologia desejados, o que impacta significativamente na qualidade do produto final e na eficiência energética do processo. Dessa forma, o entendimento dinâmico do funcionamento de um precipitador é fundamental para a modelagem, simulação e eventual otimização da operação industrial da etapa de precipitação.

### **3.2.5 Estado da Arte**

A etapa de precipitação de gibbsita ( $\text{Al}(\text{OH})_3$ ) no processo Bayer representa uma fase crítica na produção industrial de alumina, responsável por grande parte da eficiência energética e da qualidade do produto final. Historicamente, a modelagem dessa etapa tem evoluído de abordagens empíricas simples para modelos cinéticos baseados em balanços populacionais, incorporando os mecanismos fundamentais de nucleação, crescimento e aglomeração dos cristais.

Nas últimas décadas, a compreensão dos fenômenos físico-químicos envolvidos no processo de precipitação tem avançado significativamente, possibilitando o desenvolvimento de modelos matemáticos mais robustos e representativos. Entre 2020 e 2025, diversos estudos reforçaram a importância de se considerar simultaneamente os efeitos da semente (seed), das condições operacionais e da hidrodinâmica do sistema sobre a cinética de precipitação.

Por exemplo, o trabalho de Ribeiro et al. (2020) apresentou uma abordagem fenomenológica aplicada à refinaria da Companhia Brasileira de Alumínio (CBA), considerando o efeito das sementes sobre a distribuição do tamanho de partículas. O estudo demonstrou a relevância de se modelar a aglomeração de cristais como uma variável crítica para o controle do produto. Da mesma forma, Kolesnikov et al. (2021) realizaram uma simulação dinâmica de um circuito industrial, empregando equações de balanço populacional para capturar a evolução temporal da distribuição de cristais em diferentes tanques, com ênfase na estabilidade operacional e na otimização do tempo de residência.

Complementando esses esforços, Li et al. (2023) e Zhou et al. (2024) exploraram o uso de sementes aglomeradas e condições de escala reduzida para intensificar o processo de precipitação. Esses estudos evidenciam que a modificação intencional da morfologia das sementes pode acelerar a precipitação e alterar significativamente o perfil granulométrico, o que reforça a necessidade de modelos que integrem tais complexidades.

**Quadro 2** - Resumo dos artigos científicos mais recentes sobre precipitação de gibbsita no Processo Bayer.

<b>Título do Artigo</b>	<b>Autores e Ano</b>	<b>Resumo</b>
Quantifying the Effect of Seeds on Gibbsite Crystallization - Mathematical Modelling of Particle Size Distribution	Ribeiro et al., 2020	Este estudo brasileiro desenvolveu um modelo matemático para analisar a distribuição do tamanho de partículas na precipitação de gibbsita, considerando o efeito das sementes no crescimento e aglomeração dos cristais.
Dynamic Simulation of Industrial-Scale Gibbsite Crystallization Circuit	Kolesnikov et al., 2021	Este artigo apresenta uma simulação dinâmica de um circuito industrial de cristalização de gibbsita, utilizando equações de balanço populacional para modelar o crescimento, nucleação e aglomeração dos cristais. A pesquisa oferece insights valiosos para o controle e otimização do processo em escala industrial.
Enhanced Precipitation of Gibbsite from Sodium Aluminate Solution by Adding Agglomerated Active $\text{Al}(\text{OH})_3$ Seed	Li et al., 2023	Este estudo investigou a possibilidade de acelerar a precipitação de gibbsita a partir de solução de aluminato de sódio, utilizando sementes de hidróxido de alumínio aglomerado. Os resultados indicaram uma redução significativa no tempo de precipitação e a formação de partículas com área superficial elevada, potencialmente melhorando a eficiência do processo.
Enhancement of the Precipitation Extent of $\text{Al}(\text{OH})_3$ Crystals in the Bayer Process within a Down-Scaled Tank	Zhou et al., 2024	Este trabalho utilizou um modelo matemático para investigar os principais parâmetros que afetam a estabilidade operacional de circuitos de precipitação de gibbsita, incorporando classificação de sólidos e reciclo de sementes. A pesquisa destacou a importância do tempo de residência e das condições operacionais na eficiência do processo.
Kinetics of Agglomeration of Gibbsite $\text{Al}(\text{OH})_3$ Crystals in the Precipitation Stage of the Bayer Process	Zhang et al., 2021	Este artigo examinou a cinética de aglomeração dos cristais de gibbsita durante a etapa de precipitação, fornecendo dados importantes para o entendimento dos mecanismos envolvidos e para o desenvolvimento de modelos mais precisos do processo.

Dynamic simulation of industrial-scale gibbsite crystallization circuit	Golubev, V., Litvinova T. E., 2021	O artigo apresenta uma análise matemática da cinética de crescimento de partículas em sistemas coloidais com agregação limitada por difusão. Os autores desenvolvem modelos baseados em equações diferenciais para descrever o comportamento dinâmico de aglomerados, considerando condições iniciais e limites específicas.
---	------------------------------------	--

Nesse contexto, o modelo desenvolvido por Golubev e Litvinova (2021) se destaca como o mais abrangente e confiável para a modelagem da etapa de precipitação de gibbsita. Este modelo considera não apenas os mecanismos clássicos de nucleação homogênea e heterogênea, mas também incorpora cinéticas de aglomeração com dependência explícita da supersaturação e da área superficial específica dos cristais, além de parametrizar a influência da recirculação de sementes e da hidrodinâmica do tanque sobre o crescimento e a quebra de partículas.

Diferentemente de abordagens empíricas ou simplificadas, o modelo de Golubev e Litvinova (2021) é fundamentado em princípios físico-químicos e estruturado a partir de um balanço populacional rigoroso, o que permite a predição acurada da distribuição do tamanho de partículas ao longo do tempo. Além disso, sua aplicação em estudos industriais, como demonstrado por Golubev et. al. (2022), mostrou-se eficaz na reprodução de dados experimentais e na proposição de estratégias de otimização operacional.

Em síntese, a literatura recente evidencia um avanço substancial na modelagem da etapa de precipitação de gibbsita, com destaque para abordagens que integram múltiplos fenômenos acoplados. Nesse cenário, o modelo de Golubev e Litvinova (2021) emerge como a ferramenta mais robusta, versátil e aderente à realidade industrial, oferecendo subsídios valiosos para o controle preditivo e a intensificação do processo Bayer.

### 3.3 Aprendizado de Máquina

De acordo com Russell e Norvig (2020), a Inteligência Artificial (IA) é definida como a ciência de fazer com que os computadores ajam de maneira inteligente, ou seja, executem tarefas que, quando realizadas por seres humanos, exigiriam inteligência. A IA busca

desenvolver softwares que possam pensar, aprender e tomar decisões de maneira semelhante à humana, ou seja, simular a inteligência humana em diversas tarefas e domínios.

A Inteligência Artificial inclui uma ampla gama de técnicas e abordagens, tais como o aprendizado de máquina, que utiliza algoritmos para permitir que os sistemas computacionais aprendam a partir de dados, façam previsões ou tomem decisões sem serem explicitamente programados, melhorando seu desempenho ao longo do tempo. A Figura 4 ilustra os diversos ramos da inteligência artificial, dentre eles, o aprendizado de máquina se destaca como uma área vibrante e promissora, com aplicações em diversos problemas de alta complexidade.

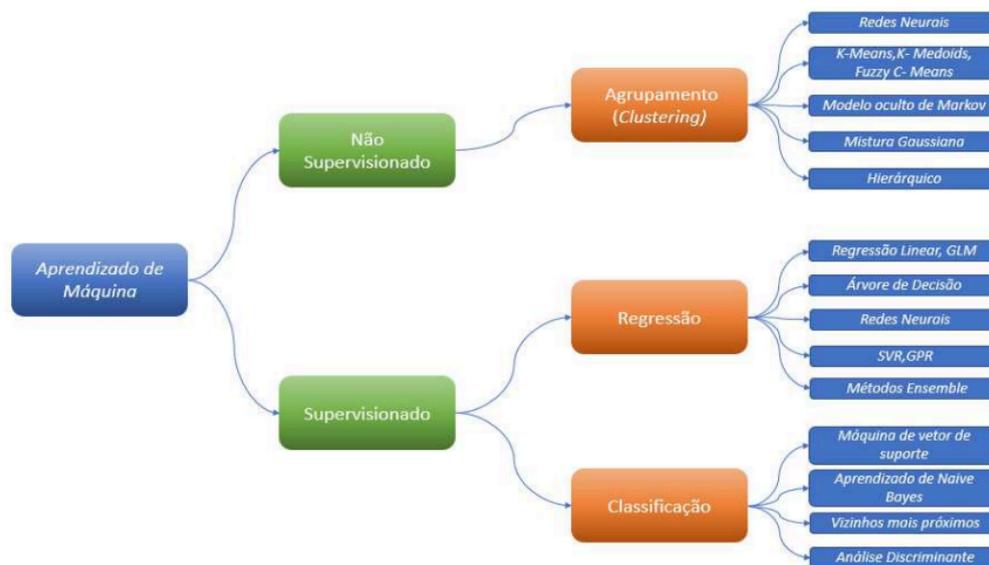


**Figura 4** - Ramos da Inteligência Artificial (Keppner, 2018).

Aprendizado de máquina é utilizado com sucesso em várias aplicações de otimização de processos, monitoramento, controle da produção e manutenção preditiva em diferentes indústrias. As técnicas de aprendizado de máquina fornecem um potencial promissor para o controle de sistemas de manufatura, especialmente em ambientes complexos de manufatura em que a detecção das causas dos problemas é difícil. (DOLTSINIS; FERREIRA; LOHSE, 2012).

Com base na literatura contemporânea, é comum adotar uma categorização que divide os diversos tipos de algoritmos de aprendizado de máquina em duas classes distintas. Essas categorias incluem: algoritmos supervisionados e algoritmos não supervisionados (BISHOP, 2006).

Os algoritmos supervisionados são aplicados geralmente em problemas de classificação ou regressão de funções complexas e para que sejam criados modelos adequados é necessário a existência de padrões de entrada e de saída devidamente rotulados para realização do ajuste do modelo. Já os algoritmos não supervisionados são utilizados mais frequentemente em problemas de agregação de dados (clusterização), redução de dimensionalidade, seleção automatizada, dentre outros. Nestes problemas não há pares de dados correspondentes a entrada e saída do sistema, mas sim definições de quantidades de classes ou padrões distintos para que os algoritmos encontrem similaridades e padrões implícitos de categorização dos dados (BRAVO et al., 2014). Figura 5 apresenta as principais técnicas de aprendizado de máquina para cada tipo de aprendizado.



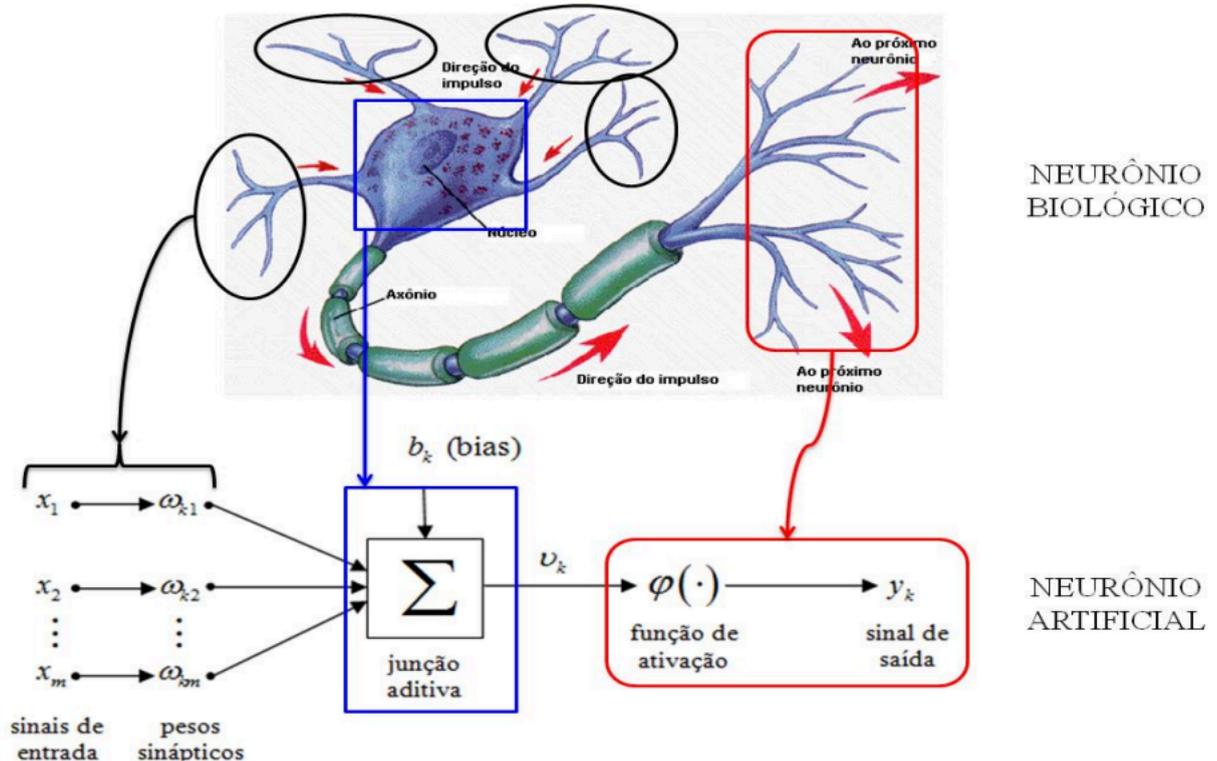
**Figura 5** - Técnicas de aprendizado de máquina (Lima Júnior, 2019).

### 3.3.1 Redes Neurais Artificiais

As Redes Neurais Artificiais (RNAs), sistemas computacionais inspirados nas funções biológicas do cérebro humano, são técnicas que adquirem conhecimento através da experiência. Uma grande rede neural possui centenas ou milhares de unidades de processamento, já o cérebro de um mamífero pode ter bilhões de neurônios, como afirma Llinas (1989).

Por mais diversas que sejam as aplicações existentes de RNAs, o aspecto comum a todas é a capacidade de estabelecerem associações entre as entradas e saídas conhecidas, através da experimentação de um grande número de situações. As informações de entrada são

colocadas em uma rede de nódulos que interagem matematicamente entre si. Baseado nessas informações surge um mapeamento do modelo entrada-saída, ou seja, as interações entre os nódulos são bem definidas e ajustadas até que as relações entrada-saída desejadas sejam apropriadamente obtidas (Marques, 2011). A Figura 6 mostra estas relações de entrada-saída através de uma analogia com o neurônio biológico.



**Figura 6** - Representação esquemática da analogia entre neurônio biológico e neurônio artificial (Souza, 2011).

O modelo do neurônio artificial apresentado por Souza (2011) na Figura 6 pode ser representado matematicamente por:

$$y_k = \varphi(v_k) \quad (1)$$

Sendo:

$$v_k = u_k + b_k \quad (2)$$

$$u_k = \sum_{j=1}^m \omega_{kj} x_j \quad (3)$$

Onde  $v_k$  é o campo local induzido ou potencial de ativação e  $u_k$  é a saída do combinador linear devida aos sinais de entrada.

De acordo com Souza (2011), podem ser identificados os seguintes elementos básicos no neurônio artificial:

- Um conjunto de sinapses, ou conexões sinápticas, cada uma caracterizada por um peso  $\omega_{km}$  ou força própria;
- Uma junção aditiva para somar os sinais de entrada  $x_j$  ponderados pelas respectivas sinapses do neurônio;
- Um bias  $b_k$  aplicado externamente, que tem o efeito de aumentar ou diminuir a entrada líquida da função de ativação, permitindo realizar um aprimoramento durante o treinamento da RNA;
- Uma função de ativação  $\varphi(\cdot)$ , para restringir a amplitude da saída de um neurônio. A função de ativação é também referida como uma função restritiva, já que restringe o sinal de saída a um intervalo de menor amplitude;
- Um campo local induzido, ou potencial de ativação, k entrada ponderados  $v_k$  devido ao bias e aos sinais de entrada ponderados  $u_k$ .

### 3.3.2 Modelagem Híbrida

Os modelos híbridos combinam um modelo mecanicista com abordagens baseadas em dados para capturar conhecimento a partir de dados, bem como de princípios físicos. Existem duas abordagens principais encontradas na literatura para combinar os modelos fenomenológicos com modelos baseados em dados para obter modelos híbridos (Duarte et al., 2004). São os arranjos em série e em paralelos dos modelos fenomenológico e baseado em dados. Essas estruturas geralmente seguem a abordagem fenomenológica para equilíbrios macroscópicos, ou seja, balanços de massa, energia e momento, e empregam os modelos baseados em dados para modelar o comportamento não linear de fenômenos físicos complexos.

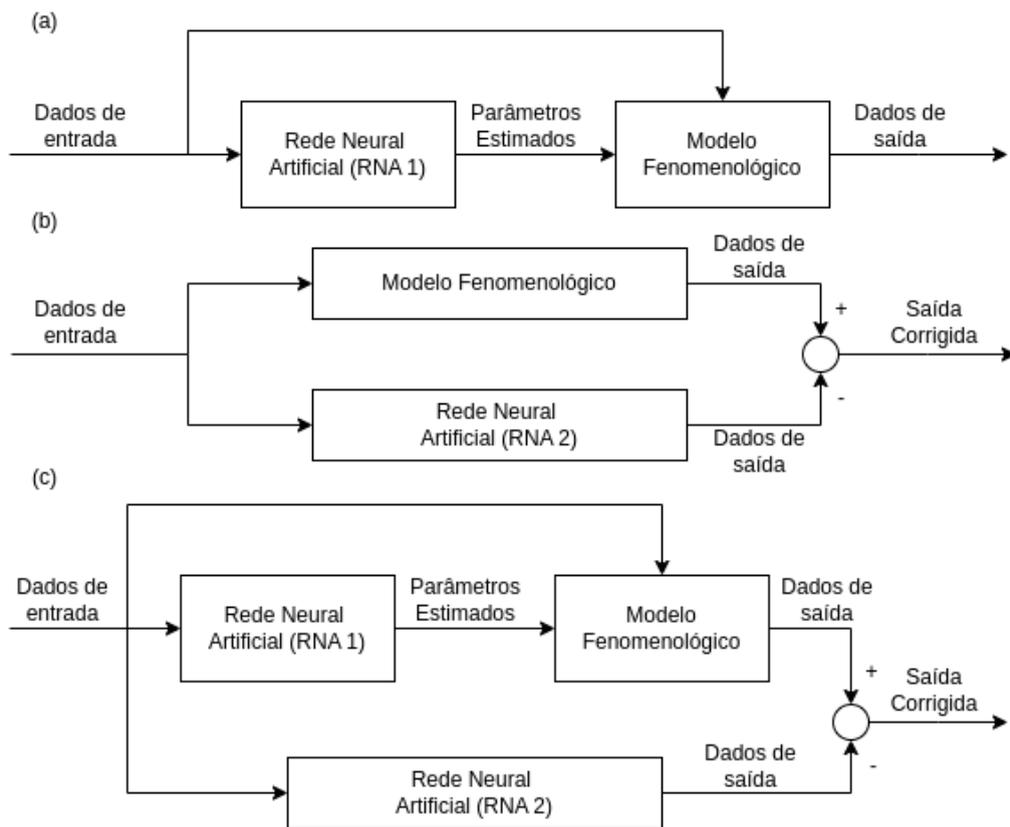
Modelos híbridos têm vantagens significativas sobre os modelos fenomenológicos e, às vezes, têm vantagens sobre os modelos baseados em dados. Eles permitem a integração do conhecimento contido nos balanços de massa, energia e momento, com as informações valiosas presentes nos dados operacionais. Mas o desempenho de tais modelos depende da capacidade de uma determinada arquitetura híbrida capturar características subjacentes do

sistema, sua complexidade arquitetônica e extrapolação necessária, se houver. Portanto, eles podem ou não ser melhores que os modelos baseados em dados.

Na estrutura do modelo híbrido em série, parâmetros incertos, como coeficientes de transferência de calor e massa, parâmetros cinéticos variantes no tempo são modelados com RNAs. Conforme mostrado na Figura 7a, o modelo RNA conectado em série com o FPM fornece estimativas dos parâmetros incertos ao FPM para previsão futura.

Já na modelagem em paralelo, um modelo fenomenológico tenta capturar o comportamento do sistema, enquanto um modelo empírico para resíduos, prevê correções para adicionar aos resultados do modelo fenomenológico para previsão futura. O modelo RNA2 (Figura 7b), treinado para esses resíduos, compensa as incertezas que surgem de variações comuns do processo e cinética complexa não linear (Su et al., 1992; van Can et al., 1996; Thomson e Kramer 1994; Côte et al., 1995).

Na abordagem série-paralela, dois modelos de RNA: ANN1, treinado anteriormente para modelo de série e ANN3, treinado para resíduos entre dados de planta e previsões de modelo de série, são combinados com o modelo fenomenológico de forma série-paralela (Figura 7c). Observe que os resíduos neste caso são diferentes daqueles do modelo paralelo e, portanto, necessitam de um modelo RNA3 separado para correção nas saídas do modelo fenomenológico conectado em série com a RNA1.



**Figura 7** - Arquiteturas de modelagem híbrida: (a) série, (b) paralela e (c) série-paralela (Bhutani et al., 2007).

# Capítulo 4

## Metodología

## 4 - Metodologia

### 4.1 Modelagem Fenomenológica do Precipitador

#### 4.1.1 Método de Equilíbrio Populacional

O modelo matemático implementado no presente trabalho é baseado no artigo de Golubev e Litvinova (2021) e descreve a dinâmica da nucleação, crescimento, aglomeração e fragmentação de partículas no processo Bayer, utilizando um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs). As equações representam a evolução temporal da concentração de partículas em crescimento ( $N_g$ ) e aglomerados ( $N_a$ ), considerando diversos mecanismos físicos e químicos envolvidos no processo.

A taxa de variação da concentração de partículas em crescimento é dada pela Equação 4, que tem seus termos descritos nas Equações 5, 6 e 7.

$$\frac{dN_g}{dt} = N_{gn} - N_{ga} + N_{gb} \quad (4)$$

O número de partículas produzidas devido à nucleação primária e secundária,  $N_{gn}$ , é definido na Equação 5:

$$N_{gn} = k_{n1}(N_g + N_a)(1 - k_{n2}(1 + (\phi - 1)f_a)) \quad (5)$$

$$f_a = \frac{N_a}{N_g + N_a} \quad (6)$$

Onde  $k_{n1}$  é a constante de nucleação primária,  $k_{n2}$  é a constante de nucleação secundária,  $\phi$  é o fator de crescimento de aglomerados e  $f_a$  é a fração de aglomerados.

$N_{ga}$  é o número de partículas consumidas devido à aglomeração e pode ser calculado a partir da Equação 7:

$$N_{ga} = k_{ga}N_gN_a + 2k_{gg}N_g^2 \quad (7)$$

Onde  $k_{ga}$  é a constante de aglomeração e  $k_{gg}$  é a constante de crescimento de aglomerados.

$N_{gb}$ , o número de partículas produzidas devido à fragmentação, é definido na Equação 8:

$$N_{gb} = 2k_b f_a \quad (8)$$

Onde  $k_b$  é a constante de fragmentação e  $f_a$  indica a fração de aglomerados no sistema.

A taxa de variação da concentração de partículas aglomeradas é dada pela Equação 9:

$$\frac{dN_a}{dt} = N_{aa} - N_{ab} \quad (9)$$

Onde  $N_{aa}$  é a taxa líquida de crescimento dos aglomerados e  $N_{ab}$  é a perda por fragmentação. Tais termos são descritos nas Equações 10 e 11, respectivamente.

$$N_{aa} = k_{gg} N_g^2 - k_{aa} N_a^2 \quad (10)$$

$$N_{ab} = k_b f_a \quad (11)$$

Onde  $k_{gg} N_g^2$  representa a formação de aglomerados a partir da interação entre partículas em crescimento e  $k_{aa} N_a^2$  expressa a quebra de aglomerados devido a interações mecânicas ou hidrodinâmicas.

O sistema de equações é resolvido sob as condições iniciais descritas nas Equações 12 e 13, respectivamente.

$$\frac{dN_g(0)}{dt} = N_g \quad (12)$$

$$\frac{dN_a(0)}{dt} = N_a \quad (13)$$

Os fluxos de entrada e saída de massa foram excluídos do sistema e as propriedades do licor foram consideradas constantes. Sob tais condições, o sistema pode ser analisado para auto-oscilações apenas em relação às propriedades da superfície da semente. Foram utilizados por Golubev e Litvinova (2021) para resolução do modelo matemático os valores descritos na Tabela 1.

**Tabela 1** - Valores dos parâmetros utilizados por Golubev e Litvinova (2021) na resolução do modelo matemático proposto

<b>Parâmetro</b>	<b>Valor</b>	<b>Unidade</b>
$k_{n1}$	0,07	$1/(m^3 \cdot s)$
$k_{n2}$	0,8	$1/(m^3 \cdot s)$
$\varphi$	3,33	-
$k_{ga}$	$8 \cdot 10^{-4}$	$1/s$
$k_{gg}$	$6 \cdot 10^{-3}$	$1/s$
$k_b$	0,001	$1/s$
$N_g$	0,01	$1/m^3$
$N_a$	0,01	$1/m^3$

O modelo matemático apresentado é robusto para aplicação em estudos acadêmicos, pois descreve de forma abrangente a dinâmica da precipitação do hidróxido de alumínio no processo Bayer. Sua formulação, baseada em um sistema de EDOs (EDOs), permite representar com precisão os principais fenômenos envolvidos, incluindo nucleação primária e secundária, crescimento, aglomeração e fragmentação das partículas. A inclusão dessas etapas torna o modelo capaz de prever a evolução das populações de partículas ao longo do tempo, fornecendo uma descrição detalhada da distribuição granulométrica e dos mecanismos que influenciam a eficiência do processo. Além disso, a modelagem fenomenológica adotada garante coerência matemática e compatibilidade com observações experimentais, permitindo a adaptação do modelo a diferentes condições operacionais.

A implementação numérica do modelo assegura alta precisão na solução das EDOs, garantindo a confiabilidade dos resultados. A presença de parâmetros ajustáveis amplia a aplicabilidade do modelo, possibilitando sua calibração em cenários experimentais distintos e facilitando a validação com dados reais. Dessa forma, o modelo não apenas fornece uma base teórica sólida para a análise do processo de precipitação, mas também representa uma ferramenta valiosa para a otimização do processo industrial, auxiliando no aprimoramento das condições operacionais e no controle da qualidade do produto final. Sua capacidade preditiva

e fundamentação teórica o tornam adequado para investigações acadêmicas e estudos avançados na área de engenharia química e processos industriais.

#### 4.1.2 Modelagem da Dissociação das Espécies Químicas

Visando aprimorar a modelagem da etapa de precipitação do processo Bayer, este trabalho propõe a incorporação do cálculo da dissociação das principais espécies químicas envolvidas. A inclusão da dissociação no modelo matemático tem o potencial de refinar a representação da supersaturação, nucleação, crescimento de partículas e equilíbrio químico, resultando em um modelo mais preciso e robusto do processo.

No modelo computacional, a dissociação das seguintes espécies químicas foi incorporada: aluminato de sódio ( $NaAlO_2$ ), hidróxido de sódio ( $NaOH$ ), carbonato de sódio ( $Na_2CO_3$ ), sulfato de sódio ( $Na_2SO_4$ ) e cloreto de sódio ( $NaCl$ ). No Quadro 3 temos as reações consideradas nos cálculos:

**Quadro 3** - Reações de dissociação das espécies químicas presentes no processo de precipitação.

<b>Espécie Química</b>	<b>Reação de Dissociação</b>
NaAlO <sub>2</sub>	$NaAlO_2 + 2H_2O \rightleftharpoons Na^+ + Al(OH)_4^-$
NaOH	$NaOH \rightleftharpoons Na^+ + OH^-$
Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	$Na_2CO_3 + H_2O \rightleftharpoons 2Na^+ + HCO_3^- + OH^-$
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	$Na_2SO_4 \rightleftharpoons 2Na^+ + SO_4^{2-}$
NaCl	$NaCl \rightleftharpoons Na^+ + Cl^-$

O íon  $Al(OH)_4^-$ , a principal forma solúvel de alumínio no licor, exerce um papel fundamental na determinação da supersaturação, influenciando diretamente a previsão da formação de hidróxido de alumínio ( $Al(OH)_3$ ). A concentração do íon  $OH^-$  modula o pH da solução, afetando a estabilidade dos íons aluminato e a taxa de precipitação do  $Al(OH)_3$ . A dissociação do  $Na_2CO_3$  contribui para a alcalinidade da solução, impactando o equilíbrio químico do aluminato. As dissociações do  $Na_2SO_4$  e do  $NaCl$  são relevantes para a força iônica da solução, que pode alterar a solubilidade do  $Al(OH)_3$ .

O pH é definido pela concentração de íons  $H^+$  na solução e é calculado pela Equação 14.

$$pH = -\log_{10}([H^+]) \quad (14)$$

A supersaturação do licor de aluminato é definida na Equação 15, onde  $C_{eq}$  é a concentração de equilíbrio do aluminato de sódio.

$$C_{supersat} = [Al(OH)_4^-] - C_{eq} \quad (15)$$

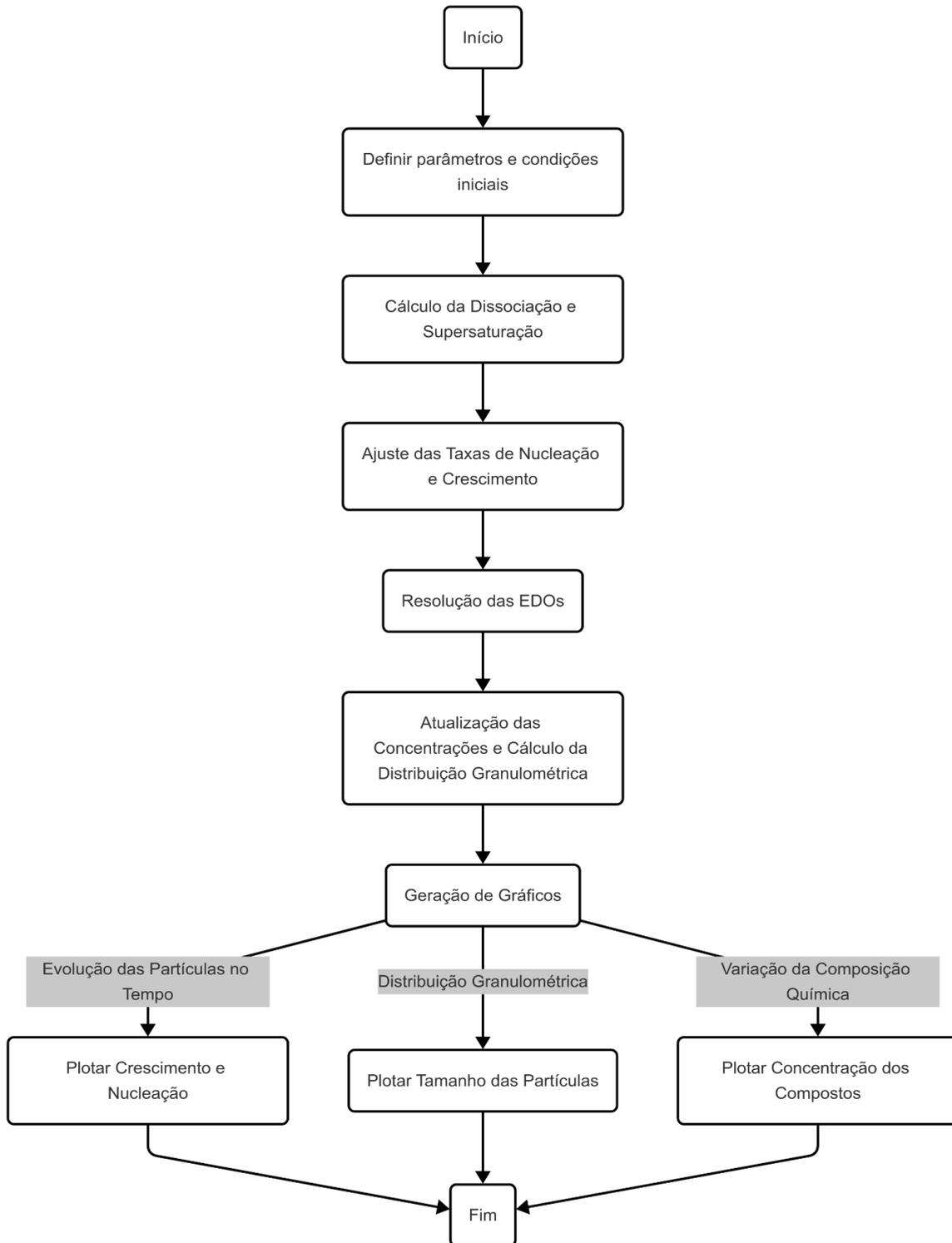
No modelo computacional, a taxa de crescimento das partículas foi ajustada para incorporar a influência da dissociação dos compostos e do pH da solução. Especificamente, o modelo prevê que altas concentrações de  $NaAlO_2$  e  $NaOH$  resultam em uma taxa de fornecimento de  $Al(OH)_3$  mais elevada, acelerando o crescimento das partículas. Por outro lado, valores de pH excessivamente baixos ou altos suprimem o crescimento, devido à diminuição da estabilidade dos íons aluminato. Essa adaptação permite uma simulação mais precisa do processo de precipitação, considerando as complexas interações químicas e o efeito do pH na cinética de crescimento das partículas de  $Al(OH)_3$ .

#### 4.1.3 Modelagem Computacional

Na Figura 8 temos um diagrama de blocos resumindo o modelo computacional de modelagem de um precipitador do processo Bayer.

O programa inicia-se com a definição de parâmetros e condições iniciais, abrangendo constantes físicas e químicas pertinentes ao sistema. Subsequentemente, procede-se ao cálculo da dissociação química, no qual compostos como  $NaAlO_2$ ,  $NaOH$  e  $Na_2CO_3$  são decompostos em seus íons constituintes. Este passo é crucial para a determinação precisa da supersaturação e do pH da solução. Com base nesses valores, as taxas de nucleação e o crescimento das partículas são ajustados, influenciando a evolução dinâmica do sistema.

A resolução do sistema de EDOs é realizada através da aplicação do método de Runge-Kutta de quarta ordem (RK45), permitindo a atualização das concentrações das espécies ao longo do tempo. Após esta etapa, a distribuição granulométrica das partículas é calculada, seguida pela geração de representações gráficas que ilustram a evolução temporal das partículas, a distribuição granulométrica resultante e a variação da composição química no decantador.



**Figura 8** - Diagrama de blocos resumindo o modelo computacional de modelagem de um precipitador do processo Bayer.

## 4.2 Geração de Dados Sintéticos

O código fornecido tem como objetivo a geração de dados sintéticos para representar o comportamento de um precipitador químico do processo Bayer, com foco na etapa de precipitação da alumina. A geração é baseada em um modelo fenomenológico, cuja formulação se apoia em equações diferenciais ordinárias (EDOs) que descrevem as transformações cinéticas no sistema. A base gerada é fundamental para o treinamento e validação de modelos híbridos, especialmente em abordagens que combinam simulação físico-química com aprendizado de máquina.

A primeira etapa do código consiste na definição da função `model`, que implementa as equações diferenciais do sistema. O modelo considera as concentrações dinâmicas de espécies químicas dissolvidas, como aluminato de sódio ( $C_{NaAlOH_4}$ ), hidróxido de alumínio ( $C_{AlOH_3}$ ) e hidróxido de sódio ( $C_{NaOH}$ ), bem como as populações de partículas em crescimento ( $N_g$ ) e aglomerados ( $N_a$ ). O crescimento e a nucleação dessas partículas são afetados por parâmetros cinéticos como  $kn_1$ ,  $kn_2$ ,  $kga$ ,  $kgg$ ,  $kaa$ ,  $kb$  e  $kgc$ , além do fator de crescimento  $\phi$ . A influência do pH também é incorporada por meio de uma função exponencial centrada em pH 10, representando a condição ideal para a precipitação da alumina.

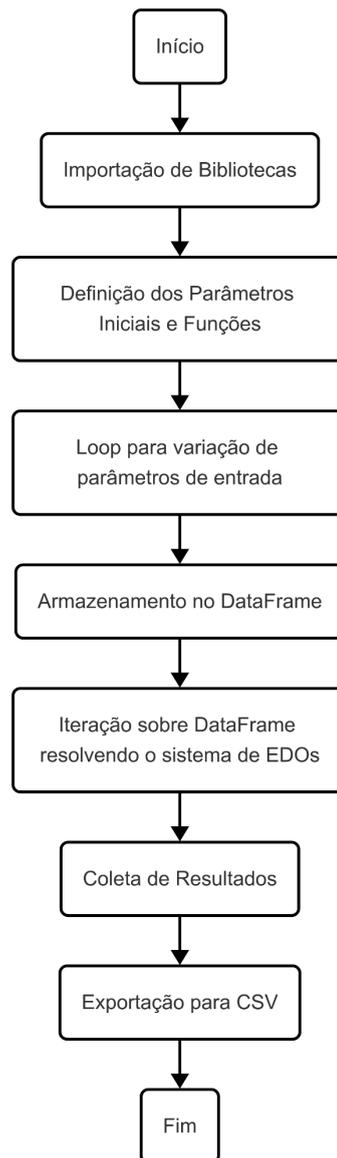
A geração dos dados é feita pela função `generate_dataframe`, que cria 10.000 amostras variando os parâmetros cinéticos e as concentrações iniciais. Os valores de  $kn_1$  e  $kn_2$  são escolhidos aleatoriamente dentro de um intervalo de  $\pm 20\%$  em torno de seus valores de referência. Os demais parâmetros ( $\phi$ ,  $kga$ ,  $kgg$ ,  $kaa$ ,  $kb$ ,  $kgc$ ) são definidos como funções lineares de  $kn_1$  e  $kn_2$ , com a adição de ruído gaussiano controlado (pequeno desvio padrão), de forma a simular correlações realistas entre os parâmetros que refletem dependências físico-químicas do sistema. Essa estrutura assegura que as variações nos dados reflitam tanto a variabilidade esperada em experimentos industriais quanto os padrões internos do processo químico.

Além disso, os valores iniciais das concentrações dos reagentes ( $C_{NaAlOH_4}$ ,  $C_{AlOH_3}$ ,  $C_{NaOH}$ ) também são calculados com base em relações funcionais com  $kn_1$  e  $kn_2$ , refletindo cenários em que mudanças nas cinéticas influenciam diretamente a composição da alimentação do sistema. Isso garante coesão entre variáveis e torna o banco de dados mais representativo. O código também adiciona ruídos controlados às concentrações

finais de  $N_g$  e  $N_a$  após a simulação com `solve_ivp`, o que contribui para simular incertezas experimentais, como erros de medição ou variações operacionais em planta.

Finalmente, os dados resultantes de cada simulação são agregados em um `DataFrame`, contendo tanto os parâmetros de entrada quanto os resultados simulados ( $N_{g\_final}$ ,  $N_{a\_final}$ ). Esse conjunto é salvo em um arquivo `.csv` e constitui uma base de dados sintética robusta, balanceada e realista, adequada para treinar redes neurais e avaliar modelos híbridos que integram conhecimento físico e aprendizado de máquina. A estrutura do código também permite uma futura análise estatística das variáveis, incluindo correlações, distribuição de valores e impacto de cada parâmetro sobre os resultados.

O diagrama apresentado na Figura 9 ilustra o fluxo do código, desde a definição das funções e importação de bibliotecas até a exportação dos resultados. Primeiro, os parâmetros do modelo são definidos e utilizados para gerar dados sintéticos com variação controlada. Esses dados são armazenados e usados na simulação do modelo, onde equações diferenciais são resolvidas iterativamente. Por fim, os resultados são coletados e exportados para análise posterior. A metodologia utilizada combina modelagem matemática, simulação numérica e estatística para gerar um conjunto de dados sintético robusto. Essa abordagem permite a análise detalhada do processo de precipitação e abre caminho para futuras aplicações em aprendizado de máquina e otimização de processos industriais.



**Figura 9** - Diagrama de blocos resumindo o modelo computacional para geração de dados sintéticos de um precipitador do processo Bayer.

### 4.3 Modelagem Híbrida

#### 4.3.1 Arquitetura em Série

O código para a arquitetura em série implementa uma abordagem híbrida em série que combina uma RNA com um modelo fenomenológico baseado em EDOs para a previsão dos valores de concentração de duas espécies químicas: Ng e Na. A característica distintiva desta abordagem reside na arquitetura em série, onde a saída do modelo empírico, uma RNA, serve como entrada para outro modelo, o modelo fenomenológico. O objetivo é combinar as

capacidades de aprendizado de padrões complexos a partir de dados da RNA com a representação mecanicista do sistema fornecida pelo modelo fenomenológico, potencialmente aprimorando a precisão e a interpretabilidade das previsões.

A primeira etapa do código envolve o carregamento de dados sintéticos de um arquivo CSV. As colunas relevantes são definidas, separando as variáveis de entrada, as variáveis de saída e os parâmetros do modelo fenomenológico que serão estimados pela RNA. O conjunto de dados é então dividido em conjuntos de treinamento e teste para avaliar a performance do modelo.

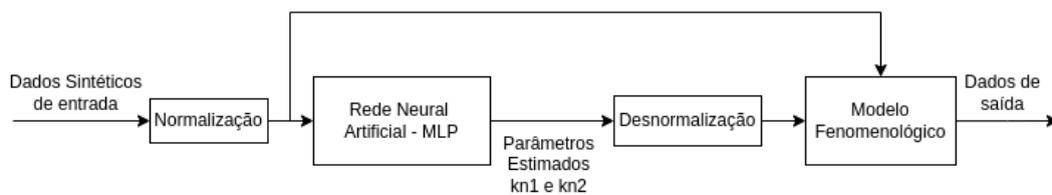
Na sequência, os dados de entrada e os parâmetros do modelo fenomenológico são normalizados utilizando a técnica de *Min-Max Scaling*. Essa etapa é crucial para o treinamento eficaz da RNA, pois garante que todas as variáveis contribuam de maneira equitativa para o processo de aprendizado, evitando que variáveis com escalas maiores dominem o algoritmo de otimização. A normalização é aplicada separadamente aos dados de entrada e aos parâmetros a serem previstos pela RNA.

A terceira etapa consiste no treinamento da RNA. Um modelo *Multilayer Perceptron Regressor* é instanciado com uma arquitetura de duas camadas ocultas, contendo 32 e 10 neurônios respectivamente, função de ativação ReLU e otimizador Adam. A RNA é treinada para aprender a mapear as variáveis de entrada normalizadas para os parâmetros normalizados do modelo fenomenológico ( $kn_1$  e  $kn_2$ ). Após o treinamento, a performance da RNA é avaliada no conjunto de teste através do cálculo do Erro Quadrático Médio (R2) e do coeficiente de determinação (MSE), métricas que quantificam a precisão e a variância explicada pelo modelo de aprendizado de máquina na tarefa de predição dos parâmetros.

O coração da modelagem híbrida reside na quarta e quinta etapas. O modelo fenomenológico é definido como uma função que descreve a evolução temporal das concentrações de interesse com base nas condições iniciais, nos parâmetros de entrada do sistema e nos parâmetros cinéticos que serão fornecidos pela RNA. A arquitetura em série se manifesta na etapa de simulação híbrida. Para cada amostra do conjunto de teste, as variáveis de entrada são normalizadas e passadas pela RNA treinada. A saída da RNA, que são as estimativas normalizadas dos parâmetros  $kn_1$  e  $kn_2$ , é então desnormalizada para obter os valores na escala original. Esses valores previstos dos parâmetros são, por sua vez, utilizados como entrada no modelo fenomenológico.

A função *solve\_ivp* da biblioteca *scipy* é empregada para resolver numericamente o sistema de equações diferenciais ordinárias que compõem o modelo fenomenológico, utilizando como condições iniciais valores fixos e os parâmetros previstos pela RNA. A solução dessa simulação ao longo do tempo fornece as concentrações finais de Ng e Na, que representam a saída da modelagem híbrida em série para aquela amostra específica do conjunto de teste. Esses valores simulados são armazenados para posterior avaliação.

Finalmente, a performance da modelagem híbrida é avaliada comparando as concentrações finais de Ng e Na obtidas através da simulação do modelo fenomenológico, utilizando os parâmetros previstos pela RNA, com os valores reais dessas concentrações presentes no conjunto de teste. As métricas de R2 e MSE são calculadas para quantificar a precisão do modelo híbrido na previsão das variáveis de saída do sistema de precipitação. Na Figura 10 está o diagrama de blocos resumindo o modelo computacional para a arquitetura em série.



**Figura 10** - Diagrama de blocos resumindo o modelo computacional para a arquitetura em série.

### 4.3.2 Arquitetura em Paralelo

A arquitetura em paralelo implementada neste código representa uma estratégia de modelagem que explora a execução simultânea de diferentes abordagens para a previsão das variáveis de saída do sistema de precipitação. Em vez de utilizar um único modelo para realizar a tarefa preditiva, o framework estabelece um fluxo de trabalho onde um modelo empírico, representado RNA, especificamente uma RNA do tipo *Perceptron* de Múltiplas Camadas (MLP), e um modelo fundamentado em princípios físico-químicos, o modelo fenomenológico baseado em EDOs, operam de forma concorrente para gerar estimativas das mesmas grandezas de interesse. O objetivo central é aprimorar a precisão da previsão, potencialmente superando as limitações de cada abordagem isoladamente.

A primeira seção do código é dedicada à preparação dos dados e ao treinamento da RNA. Inicialmente, bibliotecas essenciais para manipulação de dados, visualização, solução de EDOs, e aprendizado de máquina são importadas. Em seguida, um conjunto de dados de treinamento, armazenado em um arquivo CSV (`dados_precipitador_sinteticos.csv`), é carregado utilizando a função `read_csv` do `pandas`. As colunas de entrada e saída do modelo são definidas, representando as condições iniciais do processo como as concentrações de reagentes e parâmetros cinéticos, e as concentrações finais de núcleos e aglomerados. Os dados são então divididos em conjuntos de treinamento e teste utilizando a função `train_test_split`, com uma proporção de 80% para treinamento e 20% para teste, e um estado aleatório fixo para garantir a reprodutibilidade.

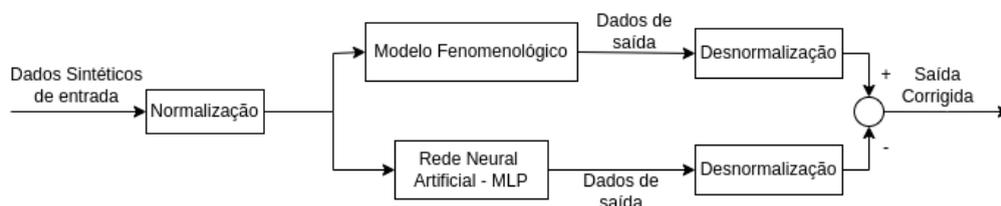
Uma etapa crucial no pré-processamento dos dados é a normalização, realizada através da classe `MinMaxScaler` da biblioteca `scikit-learn`. A normalização dos dados de entrada e saída para o intervalo  $[0, 1]$  é fundamental para o treinamento eficiente da RNA, pois evita que variáveis com escalas maiores dominem o processo de aprendizado. Dois objetos `MinMaxScaler` distintos são instanciados para as variáveis de entrada ( $x$ ) e saída ( $y$ ), e o método `fit_transform` é aplicado aos dados de treinamento para ajustar os escaladores e transformar os dados. Os dados de teste são transformados utilizando os mesmos escaladores ajustados nos dados de treinamento para garantir a consistência.

A arquitetura da RNA é definida utilizando a classe `MLPRegressor` da biblioteca `scikit-learn`. Uma rede com duas camadas ocultas, contendo 32 e 10 neurônios respectivamente, é especificada através do parâmetro `hidden_layer_sizes`. A função de ativação utilizada nas camadas ocultas é a função ReLU e o otimizador para o treinamento é o algoritmo Adam. O número máximo de iterações para o treinamento é definido como 5000, e um estado aleatório fixo é novamente utilizado para garantir a reprodutibilidade dos resultados. O treinamento da RNA é realizado através do método `fit`, alimentado pelos dados de treinamento normalizados.

Após o treinamento, o desempenho da RNA é avaliado utilizando o conjunto de teste. Os dados de teste de entrada são primeiramente normalizados utilizando o escalador ajustado nos dados de treinamento. Em seguida, o método `predict` da RNA é utilizado para obter as previsões das concentrações finais normalizadas. Para interpretar os resultados na escala original, as previsões normalizadas são desnormalizadas utilizando o método `inverse_transform` do escalador de saída, resultando em `y_test_pred`. As métricas de avaliação

utilizadas são o Erro Quadrático Médio (MSE) e o coeficiente de determinação (R<sup>2</sup>), calculados comparando as previsões desnormalizadas com os valores reais do conjunto de teste.

A etapa final do código implementa a simulação híbrida, combinando a capacidade preditiva da RNA com a dinâmica temporal do modelo fenomenológico. Para cada amostra no conjunto de teste, as condições iniciais do sistema são extraídas. Os parâmetros cinéticos são ligeiramente perturbados pela adição de ruído aleatório, simulando pequenas variações ou incertezas experimentais. As concentrações finais de núcleos e aglomerados preditas pela RNA para essas condições iniciais são obtidas. Estas previsões da RNA são então utilizadas como condições iniciais para a simulação do modelo fenomenológico através da função *solve\_ivp* do *scipy*. A função *solve\_ivp* integra o sistema de EDOs definido no modelo fenomenológico ao longo de um intervalo de tempo especificado e nos pontos de tempo de avaliação, utilizando o método de Runge-Kutta de ordem 4/5 (RK45) com tolerâncias de erro relativas e absolutas definidas. As concentrações finais de núcleos e aglomerados obtidas a partir da solução da EDO são armazenadas. Na Figura 11 está o diagrama de blocos resumindo o modelo computacional para a arquitetura em paralelo.



**Figura 11** - Diagrama de blocos resumindo o modelo computacional para a arquitetura em paralelo.

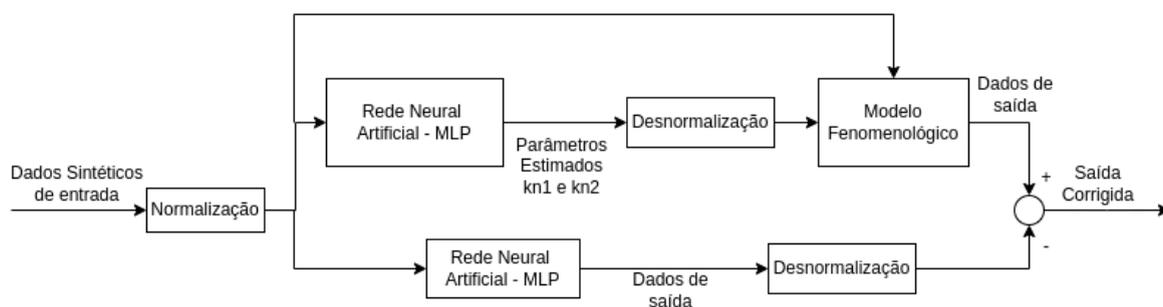
### 4.3.3 Arquitetura Série-Paralelo

O modelo híbrido em arquitetura série-paralelo representa uma etapa subsequente à implementação de duas estratégias de modelagem híbrida distintas: uma com arquitetura em paralelo e outra com arquitetura em série. O objetivo desta seção específica é combinar as previsões geradas por essas duas arquiteturas para obter uma estimativa final, explorando o potencial de complementaridade entre as diferentes abordagens. A arquitetura resultante pode ser classificada como série-paralelo, pois envolve a execução paralela de dois modelos híbridos distintos, cujas saídas são então combinadas em uma etapa subsequente em série.

Inicialmente, os resultados das previsões de Ng obtidos pelas duas arquiteturas híbridas e os valores reais correspondentes são organizados em um *DataFrames* da biblioteca pandas. Cada *DataFrame* contém uma única coluna representando as previsões da respectiva arquitetura ou os valores reais. Esses *DataFrames* são então concatenados ao longo das colunas, resultando em um único *DataFrame* que contém as previsões de ambas as arquiteturas lado a lado com os valores reais.

A etapa central desta seção consiste na combinação das previsões das duas arquiteturas híbridas. Uma nova coluna é criada no *DataFrame*, em que os valores são calculados como a média aritmética das previsões geradas pela arquitetura em paralelo e pela arquitetura em série. A utilização da média simples assume que ambas as arquiteturas de modelagem têm um peso igual na qualidade da previsão e que a combinação de suas estimativas pode levar a um resultado mais robusto e preciso do que qualquer uma delas isoladamente. Os valores da coluna com os valores dessa média são então extraídos para a variável *Ng\_media*, representando a previsão combinada para a concentração final de Ng. Os valores reais correspondentes são mantidos na variável *Ng\_real*.

Em suma, este trecho de código implementa uma estratégia de combinação *post-hoc* para integrar as saídas de duas arquiteturas de modelagem híbrida distintas. A média aritmética é utilizada como um método simples de agregação, buscando aproveitar as informações complementares fornecidas pelas abordagens em paralelo e em série para obter uma previsão final mais robusta da concentração final de Ng. Na Figura 12 está o diagrama de blocos resumindo o modelo computacional para a arquitetura em série-paralelo.



**Figura 12** - Diagrama de blocos resumindo o modelo computacional para a arquitetura em série-paralelo.

# **Capítulo 5**

## **Resultados e Discussões**

## 5 - Resultados e Discussões

### 5.1 Modelagem Fenomenológica do Precipitador

#### 5.1.1 Validação do Modelo

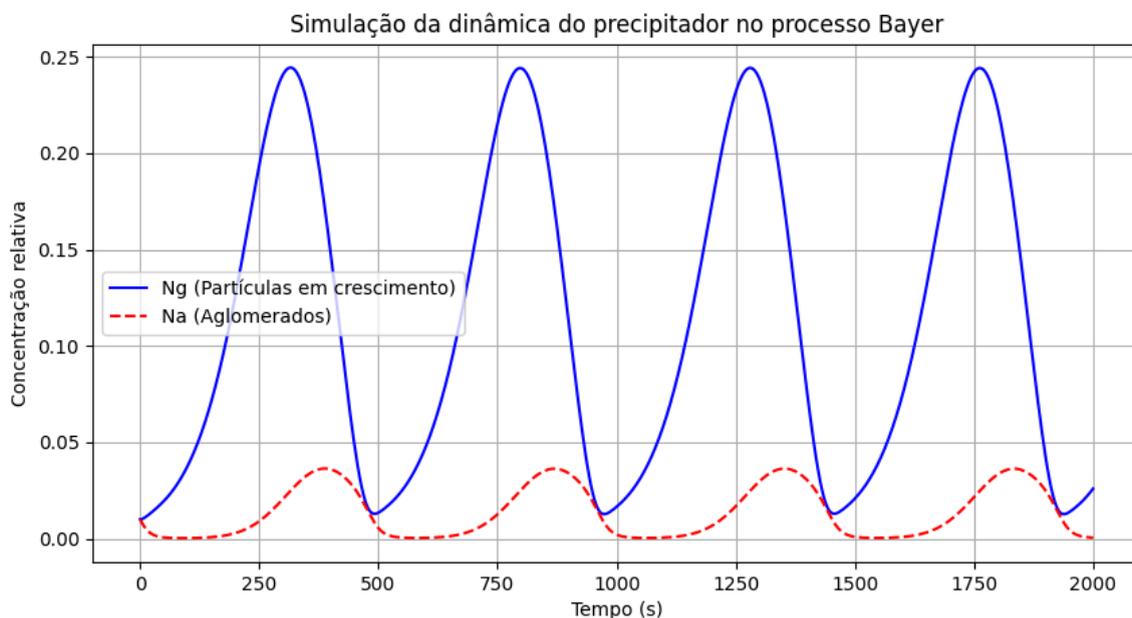
O modelo proposto foi desenvolvido com base no trabalho de Golubev e Litvinova (2021), que apresenta um modelo matemático para a precipitação de  $Al(OH)_3$  no processo Bayer. A modelagem baseia-se em um sistema de EDOs que descrevem a nucleação, crescimento, aglomeração e fragmentação das partículas precipitadas. A implementação foi realizada na linguagem de programação Python, utilizando a versão 3.9 para garantir compatibilidade com as bibliotecas científicas empregadas. Para a solução das EDOs, foi utilizada a função *solve\_ivp* da biblioteca SciPy, com o método de integração de Runge-Kutta de quarta e quinta ordem (RK45).

A modelagem foi realizada através de um sistema fechado na simulação da precipitação no processo Bayer, pois apresenta diversas vantagens do ponto de vista matemático e computacional. A principal razão para essa escolha reside na simplificação das equações diferenciais que descrevem o sistema, uma vez que a variação das concentrações químicas ocorre exclusivamente devido às reações e processos físicos internos. Dessa forma, evita-se a necessidade de incluir termos adicionais relacionados ao balanço de massa, o que poderia introduzir novas fontes de erro numérico e tornar a resolução do modelo significativamente mais complexa.

A dinâmica das partículas é descrita por duas variáveis principais:  $N_g$ , que representa a concentração de partículas em crescimento, e  $N_a$ , que corresponde à concentração de aglomerados. A taxa de nucleação primária é modelada como uma função da concentração total de partículas, enquanto a nucleação secundária leva em conta a formação de novos núcleos a partir da fragmentação de aglomerados. O crescimento das partículas é influenciado por um fator dependente do pH, modelado por uma função exponencial centrada em pH 10, refletindo a máxima taxa de precipitação nesse intervalo. A aglomeração das partículas é governada por constantes empíricas que representam a interação entre partículas em suspensão.

As visualizações dos resultados foram geradas por meio da biblioteca Matplotlib, possibilitando a análise da evolução das concentrações químicas e da distribuição

granulométrica das partículas ao longo do tempo. Na Figura 13 temos as concentrações de partículas em crescimento ( $N_g$ ) e aglomerados ( $N_a$ ) obtidas através da reprodução do modelo proposto por Golubev e Litvinova (2021).

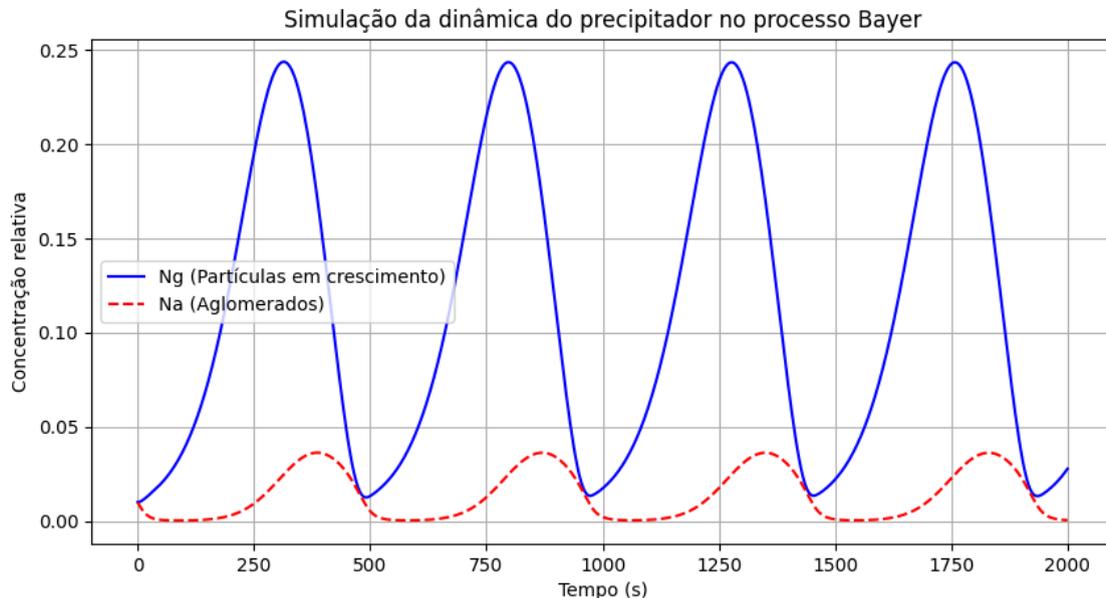


**Figura 13** - Concentrações de partículas em crescimento ( $N_g$ ) e aglomerados ( $N_a$ ) obtidas através da reprodução do modelo proposto por Golubev e Litvinova (2021).

O modelo com as considerações adicionadas por este trabalho incorpora aspectos fundamentais da química do processo Bayer que o modelo original de Golubev e Litvinova (2021) não considerava explicitamente. A inclusão da dissociação das espécies químicas permite que o código calcule com mais precisão a supersaturação do licor, um fator essencial para a nucleação e crescimento dos cristais de  $Al(OH)_3$ . No modelo original, a concentração de aluminato de sódio era tratada diretamente, sem considerar sua dissociação, o que poderia levar a uma superestimação ou subestimação da quantidade de material disponível para a precipitação. Com uma dissociação explícita, o modelo proposto representa com mais fidelidade o comportamento da solução química, garantindo que os cálculos de crescimento e nucleação dos cristais sejam fisicamente consistentes.

Outro fator que valida o modelo melhorado é a inclusão do efeito do pH na taxa em questão. O processo Bayer ocorre sob condições alcalinas, onde o pH ótimo para a oferta de  $Al(OH)_3$  é em torno de 10. O modelo original não levava em conta esse efeito, tratando a taxa de crescimento apenas como uma função de supersaturação. Com a adição de um fator exponencial dependente do desvio do pH em relação a 10, o novo modelo ajusta

dinamicamente a taxa de crescimento das partículas, refletindo a estabilidade da solução. Isso evita erros como a formação excessiva de partículas finas em condições de pH inadequado ou uma redução significativa em ambientes muito alcalinos.



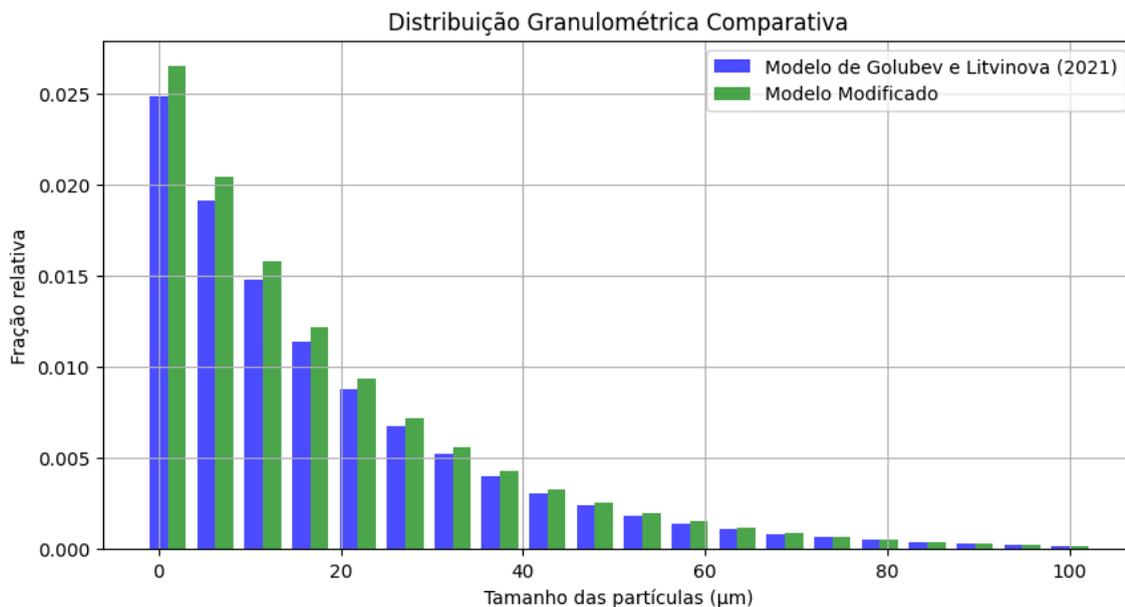
**Figura 14** - Concentrações de partículas em crescimento ( $N_g$ ) e aglomerados ( $N_a$ ) obtidas pelo modelo modificado.

A Figura 14 apresenta a evolução temporal das concentrações de partículas em crescimento ( $N_g$ ) e aglomerados ( $N_a$ ), permitindo a análise da dinâmica do processo de precipitação. A curva azul representa a concentração de partículas individuais ( $N_g$ ), e a curva vermelha representa a concentração de aglomerados ( $N_a$ ). Inicialmente, observa-se um aumento acentuado da população de partículas em crescimento, impulsionado pela nucleação primária. Com o progresso da simulação, ocorre uma transição caracterizada pelo aumento da concentração de aglomerados, resultante da coalescência de partículas menores. Esse comportamento revela a competição entre os mecanismos de nucleação, crescimento e coalescência, onde a conversão de partículas isoladas em aglomerados desempenha um papel determinante na evolução do sistema. A análise dessa dinâmica é fundamental para otimizar o controle operacional do precipitador, assegurando a formação de partículas com propriedades adequadas para a separação e purificação do hidróxido de alumínio.

Pode-se observar a equivalência das concentrações de  $N_g$  e  $N_a$  entre o modelo de Golubev e Litvinova (2021), presente na Figura 13, e o modelo modificado, que incorpora efeitos do pH e da dissociação química, explicitado na Figura 14. Tal resultado pode estar

relacionado ao fato de que os parâmetros químicos iniciais, bem como o fator de modulação pelo pH, encontravam-se em uma faixa em que seus efeitos sobre as taxas de nucleação e crescimento são minimizados. Essa concordância entre os modelos valida a consistência do modelo modificado, demonstrando que sua estrutura é compatível com a formulação original e que os novos termos introduzidos não distorcem o comportamento do sistema em condições neutras. Dessa forma, o modelo estendido mostra-se confiável para representar adequadamente o processo quando submetido a variações nas condições químicas, mantendo, ao mesmo tempo, coerência com o modelo base em situações de referência.

A Figura 15 ilustra a distribuição granulométrica das partículas ao término da simulação de ambos os modelos, apresentando a fração relativa das partículas em diversas faixas de tamanho. A distribuição granulométrica resultante exibe um padrão de decaimento exponencial, indicando uma predominância de partículas de dimensões reduzidas e uma fração limitada de partículas de tamanhos maiores. Esse comportamento reflete o equilíbrio dinâmico entre os processos de nucleação, crescimento e aglomeração. A significativa taxa de nucleação inicial, combinada com um crescimento controlado das partículas, resulta na predominância de partículas menores. A presença de partículas de menor diâmetro pode ser atribuída à limitação da disponibilidade de reagentes ou à fragmentação de aglomerados, fatores que influenciam a eficiência da separação e remoção do precipitado no processo Bayer.

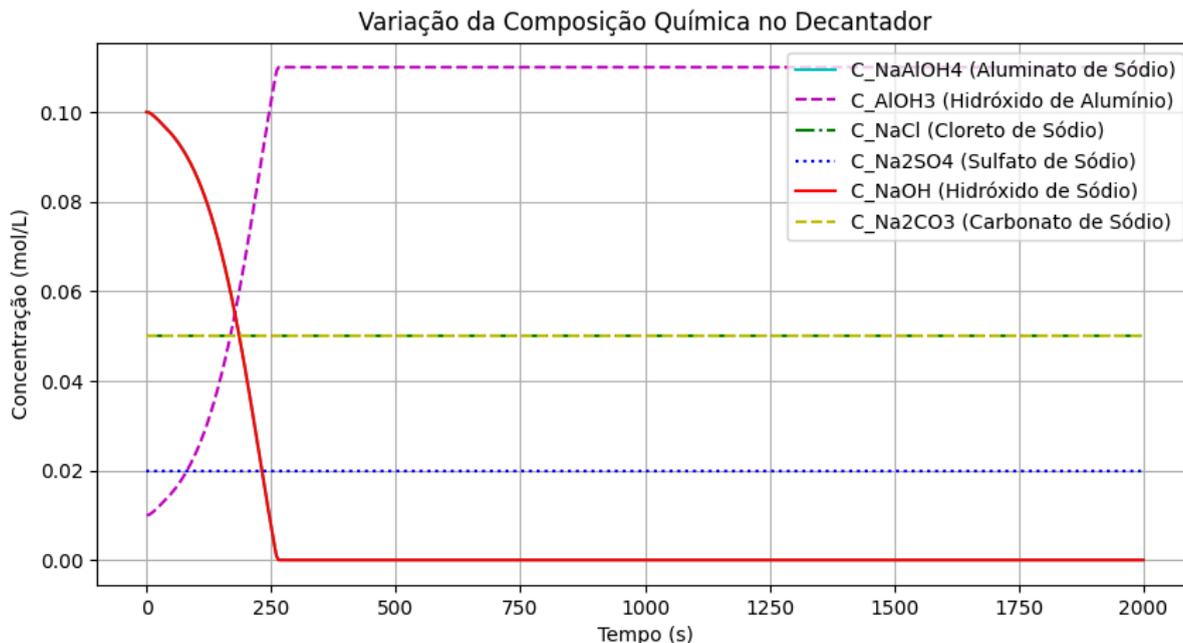


**Figura 15** - Distribuições granulométricas das partículas decantadas obtidas pelo modelo de Golubev e Litvinova (2021) e pelo modelo modificado.

A análise comparativa das distribuições granulométricas finais obtidas a partir dos dois modelos revela que ambos apresentaram perfis semelhantes em termos de forma e tendência. A manutenção do padrão de distribuição observada no modelo base reforça a consistência do modelo estendido, evidenciando que as modificações propostas preservam a integridade do comportamento populacional esperado em regimes estáveis. No entanto, destaca-se que a inclusão desses efeitos confere ao modelo uma capacidade potencialmente superior de resposta a alterações nas condições do meio reacional, sendo especialmente relevante em cenários onde as variações de pH ou composição química desempenham papel determinante na morfologia e no crescimento das partículas.

A comparação dos resultados entre os dois modelos confirma a validade das melhorias. No modelo original, a distribuição granulométrica tende a apresentar uma menor proporção de partículas finas devido a uma superestimação da nucleação. Com as melhorias, o código ajusta a nucleação de acordo com a dissociação real dos íons aluminato e o pH, resultando em uma distribuição mais realista, com maior quantidade de partículas pequenas. Além disso, a variação da composição química ao longo do tempo agora reflete mais precisamente o consumo de reagentes, sem valores negativos para concentrações, garantindo que o comportamento do sistema seja fisicamente plausível. Assim, o modelo melhorado é validado tanto do ponto de vista químico quanto numérico, oferecendo uma representação mais fiel do que ocorre no precipitador industrial do processo Bayer.

A Figura 16 ilustra a evolução temporal das concentrações das principais espécies químicas envolvidas no processo de precipitação. A curva correspondente ao aluminato de sódio exibe uma redução progressiva ao longo do tempo, devido ao consumo dessa espécie na formação do hidróxido de alumínio precipitado. Em contrapartida, a concentração de hidróxido de alumínio aumenta, refletindo a conversão efetiva do precursor solúvel na fase sólida. As concentrações de cloreto de sódio, sulfato de sódio e carbonato de sódio permanecem relativamente constantes, uma vez que essas espécies não participam diretamente das reações de precipitação, mas podem influenciar a estabilidade do sistema. A curva do hidróxido de sódio pode apresentar variações moderadas, pois sua concentração afeta diretamente o pH do meio, impactando a taxa de precipitação. A interpretação dessas curvas é essencial para compreender a cinética do processo, permitindo ajustes operacionais que maximizem a eficiência da remoção do hidróxido de alumínio e otimizem o balanço químico da solução. Vale ressaltar que a curva do Cloreto de Sódio está sobreposta pela curva do Carbonato de Sódio e a curva do Aluminato de Sódio está sobreposta pela de Hidróxido de Sódio.



**Figura 16** - Variação da Composição Química no Decantador.

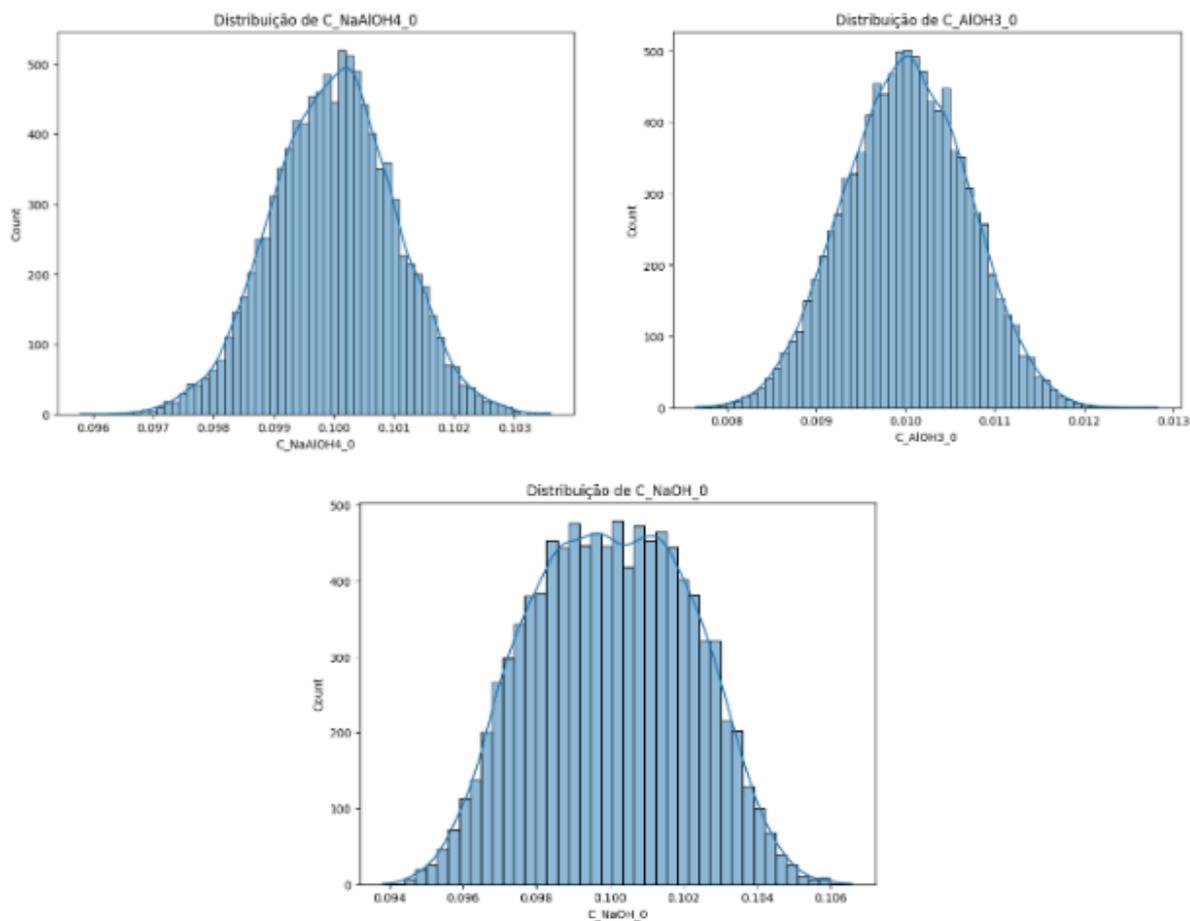
## 5.2 Geração de Dados Sintéticos

Os dados sintéticos foram obtidos por meio da simulação de um modelo fenomenológico que representa a dinâmica do sistema de precipitação sob diferentes condições iniciais e parâmetros cinéticos. Para isso, foram atribuídos valores variáveis às concentrações iniciais dos reagentes e às constantes reacionais, gerando um conjunto diversificado de cenários que refletem a variabilidade observada em condições experimentais. Adicionalmente, foi introduzido ruído controlado aos dados, com o objetivo de simular incertezas e flutuações típicas de uma planta industrial, tornando o conjunto mais realista e desafiador para os modelos preditivos. As simulações resultantes foram organizadas em um arquivo estruturado, permitindo sua utilização em análises comparativas com modelos de aprendizado de máquina e na avaliação do desempenho de diferentes arquiteturas de modelagem híbrida.

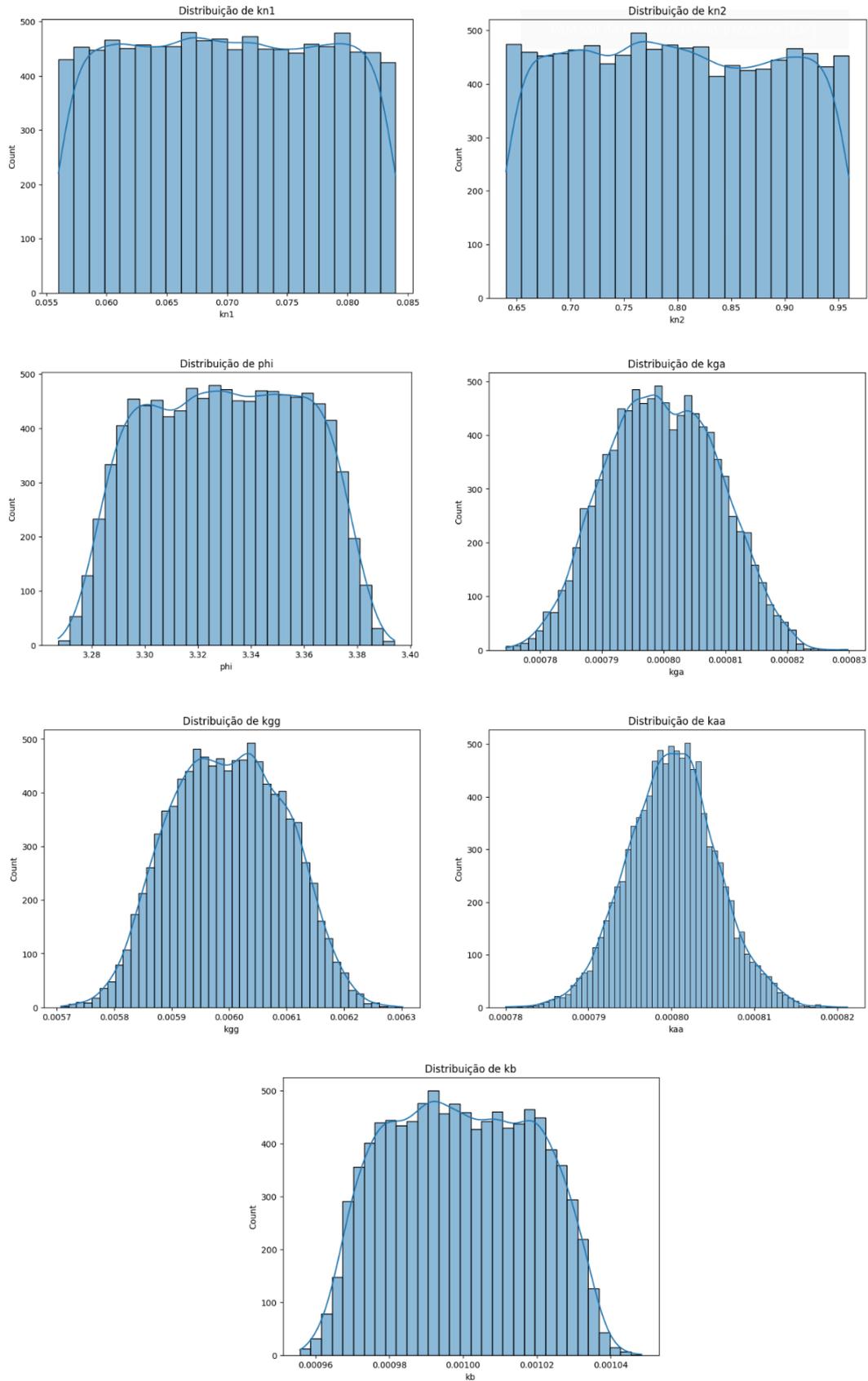
As Figuras 17 e 18 apresentam, respectivamente, as distribuições das concentrações iniciais dos reagentes e dos parâmetros do modelo utilizados na geração da base de dados sintética para a etapa de precipitação do processo Bayer. Observa-se, na Figura 17, que as concentrações iniciais de  $\text{NaAlOH}_4$ ,  $\text{AlOH}_3$  e  $\text{NaOH}$  apresentam distribuições aproximadamente simétricas e com leve tendência à normalidade, centradas em torno de valores médios definidos com variações controladas. Essa característica garante uma boa

representatividade estatística dos dados e assegura que o treinamento dos modelos, especialmente das redes neurais, seja realizado em um intervalo de valores bem distribuído e coerente com os limites físico-químicos do sistema.

Na Figura 18, os histogramas revelam que os parâmetros  $kn_1$ ,  $kn_2$  e  $\phi$  apresentam distribuições quase uniformes, indicando que esses valores foram amostrados de forma equidistante ao longo de um intervalo predefinido, sem enviesamento. Já os parâmetros  $k_{ga}$ ,  $k_{gg}$ ,  $k_{aa}$  e  $k_b$  apresentam distribuições aproximadamente normais, centradas em torno de seus respectivos valores médios, com simetria e dispersão adequadas. Essas distribuições refletem uma escolha criteriosa no processo de geração dos dados sintéticos, assegurando diversidade suficiente nos exemplos utilizados para o treinamento e validação dos modelos híbridos. A presença de distribuições bem definidas para os parâmetros cinéticos é essencial para garantir a robustez da modelagem e permitir que as arquiteturas testadas aprendam os padrões dinâmicos do sistema com eficácia.

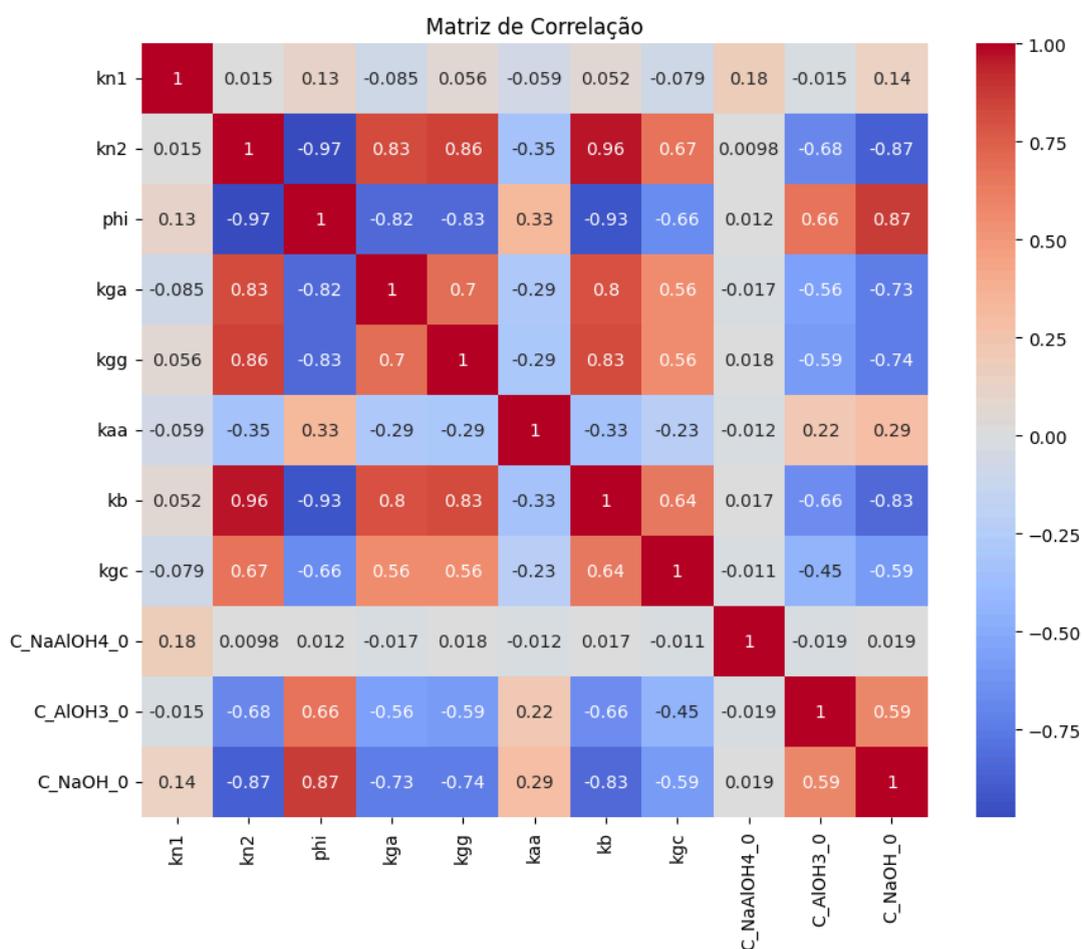


**Figura 17** - Distribuição dos dados de concentrações iniciais dos reagentes.



**Figura 18 - Distribuição dos dados de parâmetros do modelo.**

A matriz de correlação apresentada na Figura 19 ilustra a relação estatística entre as variáveis do conjunto de dados sintéticos gerados a partir do modelo fenomenológico de precipitação. A correlação é medida pelo coeficiente de Pearson, que varia entre -1 e 1, onde valores próximos a 1 indicam forte correlação positiva, valores próximos a -1 indicam forte correlação negativa e valores próximos de 0 sugerem ausência de correlação linear significativa. A matriz é representada por um mapa de calor, no qual as cores variam do azul ao vermelho, evidenciando diferentes intensidades de correlação entre os parâmetros do modelo.



**Figura 19** - Matriz de correlação entre os parâmetros do modelo fenomenológico e as concentrações iniciais dos reagentes.

A matriz de correlação dos dados sintéticos evidencia relações estatísticas relevantes entre os parâmetros cinéticos e as concentrações iniciais das espécies químicas envolvidas no processo de precipitação. Destaca-se a forte correlação positiva entre as variáveis kn2, kga, kgg e kb, com coeficientes superiores a 0,80, sugerindo que essas constantes variam de forma

coordenada, possivelmente por representarem mecanismos interdependentes como nucleação secundária, aglomeração e fragmentação. Em contrapartida, observam-se correlações negativas expressivas entre  $\phi$  e várias dessas constantes, especialmente com  $kn_2$  e  $kb$ , indicando uma relação inversa entre o crescimento relativo de aglomerados e a taxa de formação ou quebra de partículas.

Com relação às concentrações iniciais, a concentração inicial de NaOH apresenta correlação negativa com  $kn_2$ ,  $kga$ ,  $kgg$  e  $kb$ , e positiva com  $\phi$ , o que sugere que o pH inicial da solução pode influenciar significativamente os mecanismos cinéticos. Já as concentrações iniciais de  $NaAl(OH)_4$  e  $Al(OH)_3$  mostraram fracas correlações com os parâmetros do modelo, o que pode indicar que sua influência é mais pronunciada na dinâmica temporal do sistema do que em correlações lineares diretas. Esses padrões reforçam a complexidade das interações envolvidas no processo e a importância da análise multivariada na interpretação dos efeitos combinados dos parâmetros operacionais e das propriedades do meio reacional.

A análise da matriz de correlação é particularmente importante no contexto do treinamento de redes neurais artificiais (RNA), pois permite identificar relações lineares entre as variáveis de entrada, auxiliando na seleção de atributos relevantes e na redução de redundâncias. Compreender essas correlações ajuda a evitar que a RNA aprenda padrões espúrios ou excessivamente dependentes de variáveis colineares, o que pode comprometer a generalização do modelo. Além disso, o conhecimento prévio sobre a interdependência entre os parâmetros contribui para uma melhor interpretação dos pesos aprendidos pela rede e para o ajuste mais eficaz da arquitetura e da base de dados utilizada no treinamento.

## **5.3 Modelagem Híbrida**

### **5.3.1 Arquitetura em Série**

A arquitetura híbrida em série proposta foi avaliada por meio da comparação entre os valores previstos para as concentrações finais de partículas em crescimento ( $N_g$ ) e aglomerados ( $N_a$ ), geradas pela simulação do modelo fenomenológico alimentado com parâmetros estimados por uma RNA, e os respectivos valores reais obtidos a partir do conjunto de dados de teste.

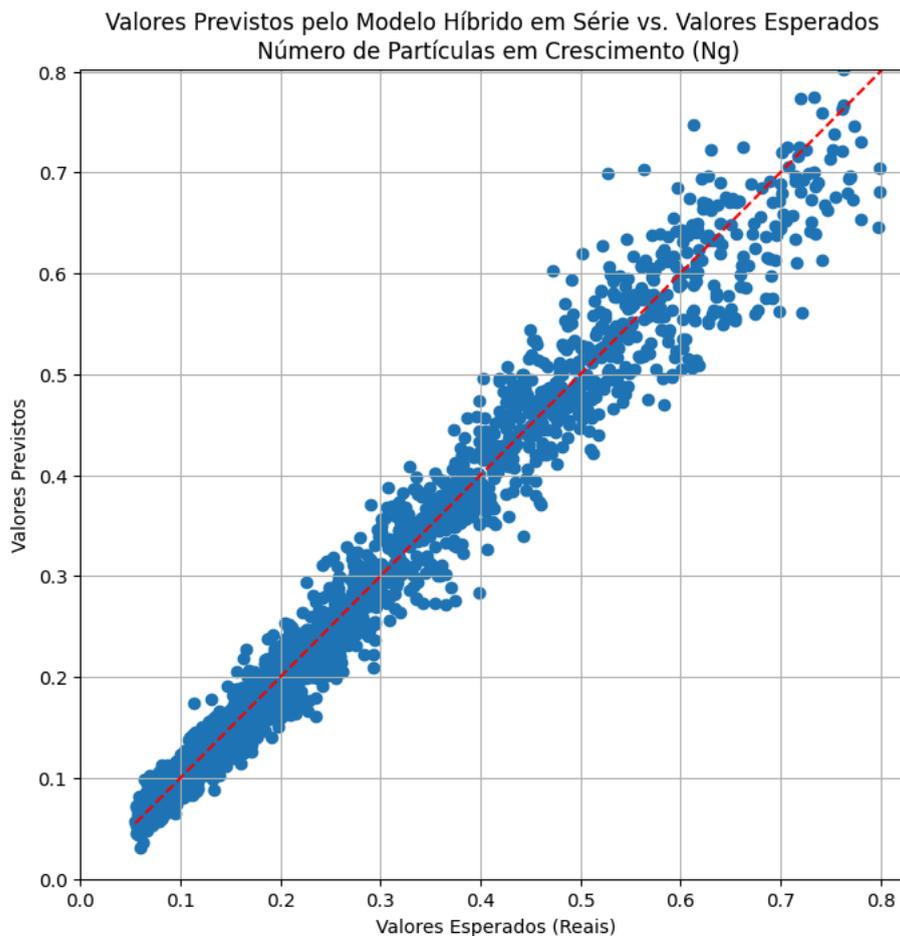
Os resultados obtidos para a avaliação da arquitetura híbrida em série demonstram um desempenho altamente satisfatório na predição das variáveis de interesse do processo de precipitação. A acurácia do modelo, expressa pelo Erro Quadrático Médio (MSE) e pelo coeficiente de determinação ( $R^2$ ), explicitados na Tabela 2, revela que a abordagem proposta foi capaz de reproduzir com elevada precisão os valores finais simulados. Para a variável correspondente ao número de partículas em crescimento (Ng), bem como para a variável número de aglomerados (Na), obteve-se valores satisfatórios de MSE e  $R^2$ , evidenciando um grau elevado de correlação entre os valores previstos e os observados. Esses resultados indicam que, embora a arquitetura em série apresente um desempenho ligeiramente inferior em relação à arquitetura em paralelo, ela ainda mantém um elevado grau de precisão preditiva, com valores de  $R^2$  acima de 0,96 para ambas as variáveis.

**Tabela 2** - Métricas de desempenho do modelo híbrido em série.

Variável	MSE	$R^2$
Ng	0,0010	0,9717
Na	0,0054	0,9616

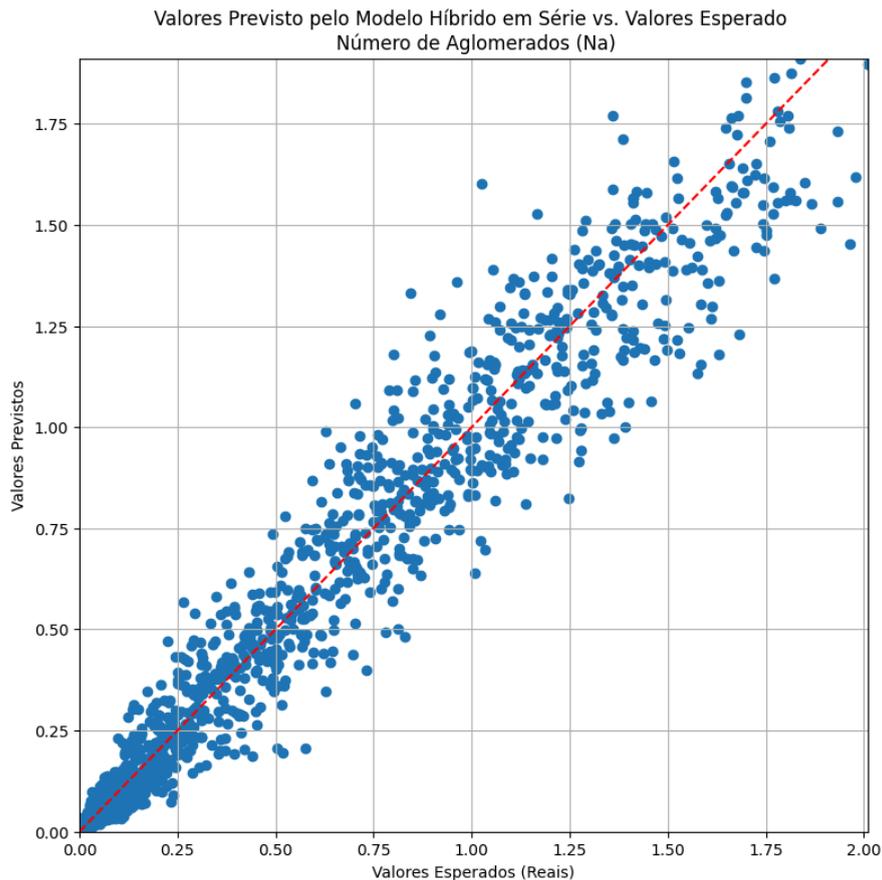
Os gráficos de dispersão apresentados nas Figuras 20 e 21 evidenciam um alinhamento significativo entre os valores simulados e esperados, caracterizado pela distribuição dos pontos ao longo da linha de identidade, especialmente para a variável Ng. Tal comportamento sugere que a RNA foi eficaz na previsão dos parâmetros cinéticos utilizados pelo modelo de EDOs, resultando em uma simulação capaz de reproduzir fielmente a dinâmica do sistema de precipitação.

No caso do número de partículas em crescimento (Ng), apresentado na Figura 20, observa-se uma forte correlação linear entre os valores previstos e observados, com baixo espalhamento e elevada concentração de pontos ao redor da linha de referência. Isso indica que a combinação da RNA com o modelo fenomenológico capturou de forma robusta os efeitos dos parâmetros cinéticos sobre a formação e evolução dos núcleos de precipitação. O coeficiente de determinação ( $R^2$ ) elevado obtido para Ng reforça a confiabilidade do modelo híbrido em representar com precisão essa variável crítica do processo.



**Figura 20** - Comparação entre os valores previstos e os valores reais da concentração de partículas em crescimento (Ng) utilizando a arquitetura híbrida em série.

Por outro lado, a previsão da concentração final de aglomerados ( $N_a$ ), apresentado na Figura 21, apresentou maior dispersão em torno da linha de identidade, embora ainda evidencie uma tendência clara de correlação positiva. Essa maior variabilidade pode ser atribuída à complexidade adicional envolvida na formação de aglomerados, que depende não apenas dos parâmetros estimados pela RNA, mas também de interações não lineares mais sensíveis a pequenas variações nas condições iniciais e nos parâmetros do modelo. Apesar disso, os resultados obtidos para  $N_a$  permanecem dentro de uma faixa de erro aceitável para aplicações industriais, e demonstram o potencial da abordagem híbrida em série para representar fenômenos multivariáveis de forma consistente e interpretável.



**Figura 21** - Comparação entre os valores previstos e os valores reais da concentração de aglomerados (Na) obtidos pela modelagem híbrida em série.

### 5.3.2 Arquitetura em Paralelo

A arquitetura híbrida em paralelo foi avaliada com o objetivo de verificar a capacidade do modelo empírico baseado em redes neurais artificiais (RNA) em reproduzir diretamente as variáveis de saída do sistema de precipitação sem a necessidade de acoplamento sequencial ao modelo fenomenológico. Nesta configuração, tanto a RNA quanto o modelo baseado em equações diferenciais ordinárias (EDOs) são executados de forma independente, permitindo a comparação entre suas previsões e os valores de referência presentes no conjunto de dados.

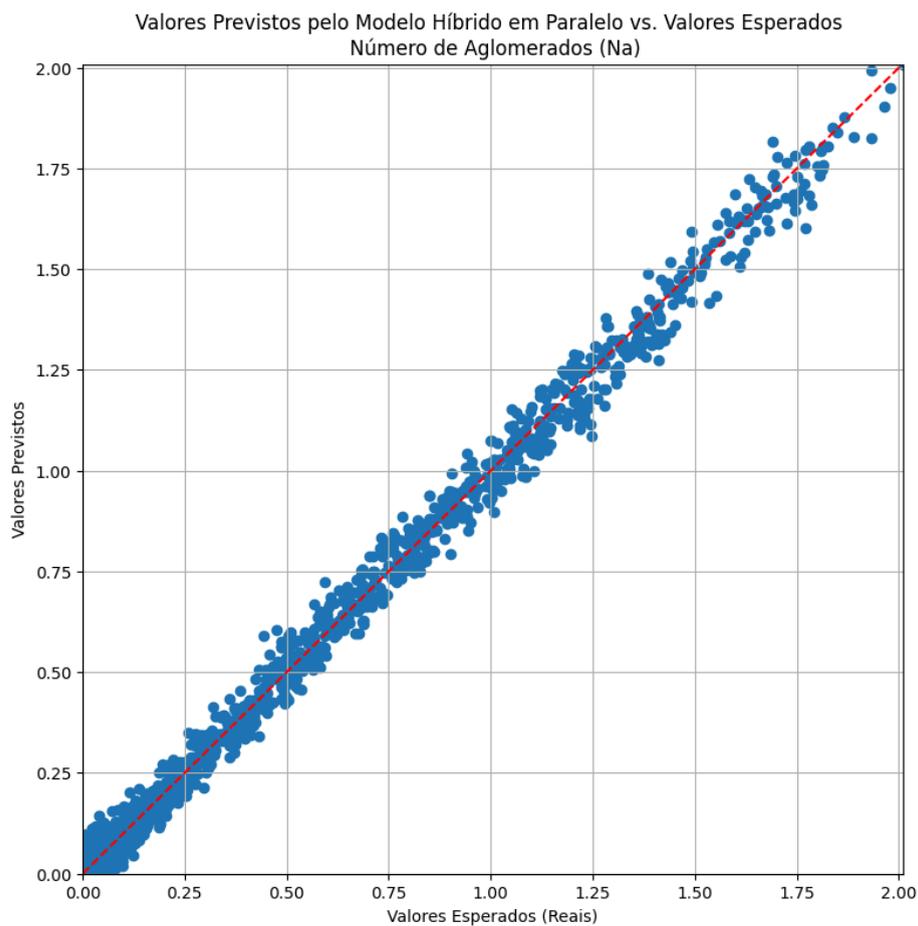
Os resultados quantitativos da avaliação da RNA, apresentados na Tabela 3, indicam uma elevada acurácia na predição direta das concentrações finais de partículas em crescimento (Ng) e aglomerados (Na), o que demonstra a eficácia do modelo empírico em capturar as relações não lineares entre as variáveis de entrada e os estados finais do sistema. Apesar de não contar com o refinamento físico proporcionado pelo modelo fenomenológico,

a RNA foi capaz de generalizar bem o comportamento do sistema, mesmo com a inclusão de ruído na simulação dos parâmetros.

**Tabela 3** - Métricas de desempenho do modelo híbrido em paralelo.

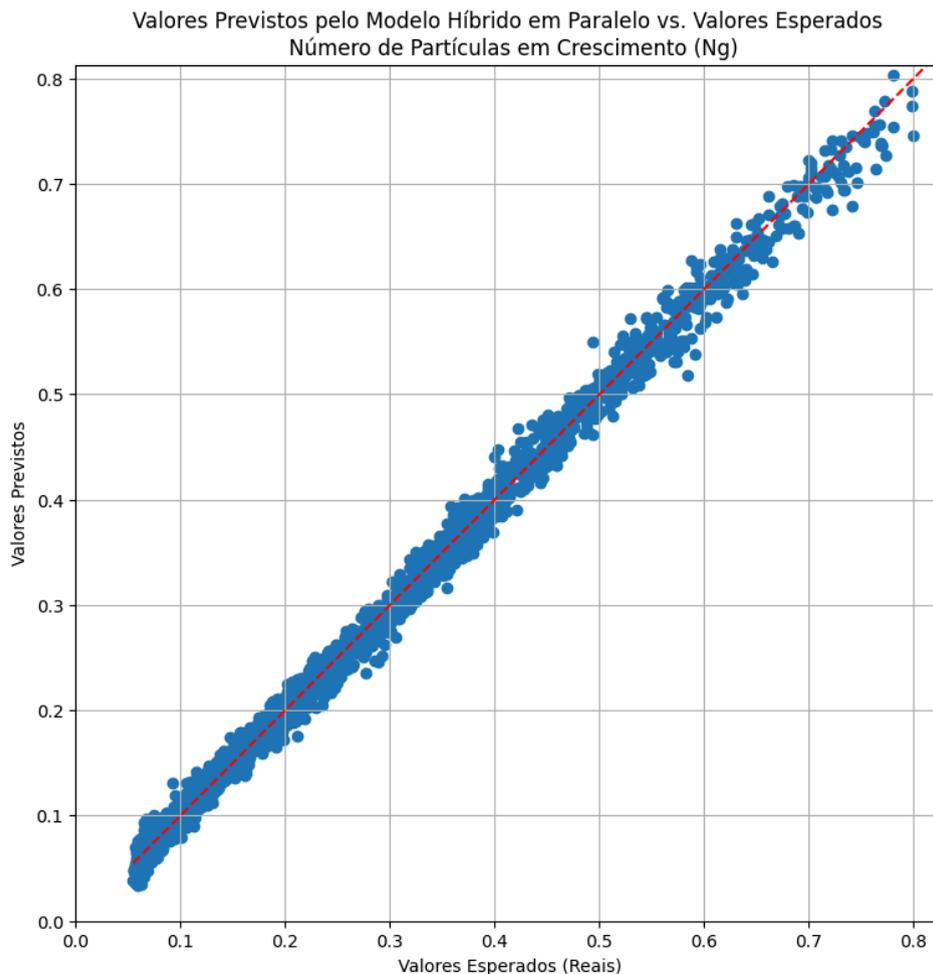
Variável	MSE	R <sup>2</sup>
Ng	0,0006	0,9826
Na	0,0054	0,9784

A Figura 22 apresenta o gráfico de dispersão dos valores previstos pela RNA versus os valores reais para a variável Na. Observa-se uma forte concentração dos pontos ao longo da linha de identidade (traço vermelho), o que evidencia a correlação entre as estimativas e os valores esperados. A baixa dispersão e o padrão linear dos pontos ao longo de toda a faixa de valores sugerem que o modelo conseguiu representar adequadamente tanto as regiões de baixa quanto de alta concentração de aglomerados. Pequenas dispersões observadas em valores mais altos podem estar associadas a efeitos acumulativos de ruído ou limitações do aprendizado em regiões menos densas do espaço amostral.



**Figura 22** - Comparação entre os valores previstos e os valores reais da concentração de aglomerados (Na) obtidos pela modelagem híbrida em paralelo.

A Figura 23 apresenta o gráfico de dispersão entre os valores previstos e os valores reais da concentração de partículas em crescimento (Ng), obtidos por meio da modelagem híbrida em arquitetura paralela. Observa-se que os pontos estão fortemente concentrados ao longo da linha de identidade (linha tracejada vermelha), o que indica uma elevada concordância entre as previsões geradas pela rede neural artificial (RNA) e os dados reais utilizados como referência. Essa aderência visual evidencia a eficácia do modelo em capturar a dinâmica do processo de nucleação e crescimento, mesmo atuando de forma independente ao modelo fenomenológico. A baixa dispersão dos pontos ao longo de toda a faixa de valores demonstra que a RNA conseguiu aprender de forma consistente as relações subjacentes entre as variáveis de entrada e os resultados do sistema, o que valida a robustez da arquitetura paralela na predição direta de estados finais em sistemas de precipitação química.



**Figura 23** - Comparação entre os valores previstos e os valores reais da concentração de partículas em crescimento (Ng) obtidos pela modelagem híbrida em paralelo.

### 5.3.3 Arquitetura em Série-Paralelo

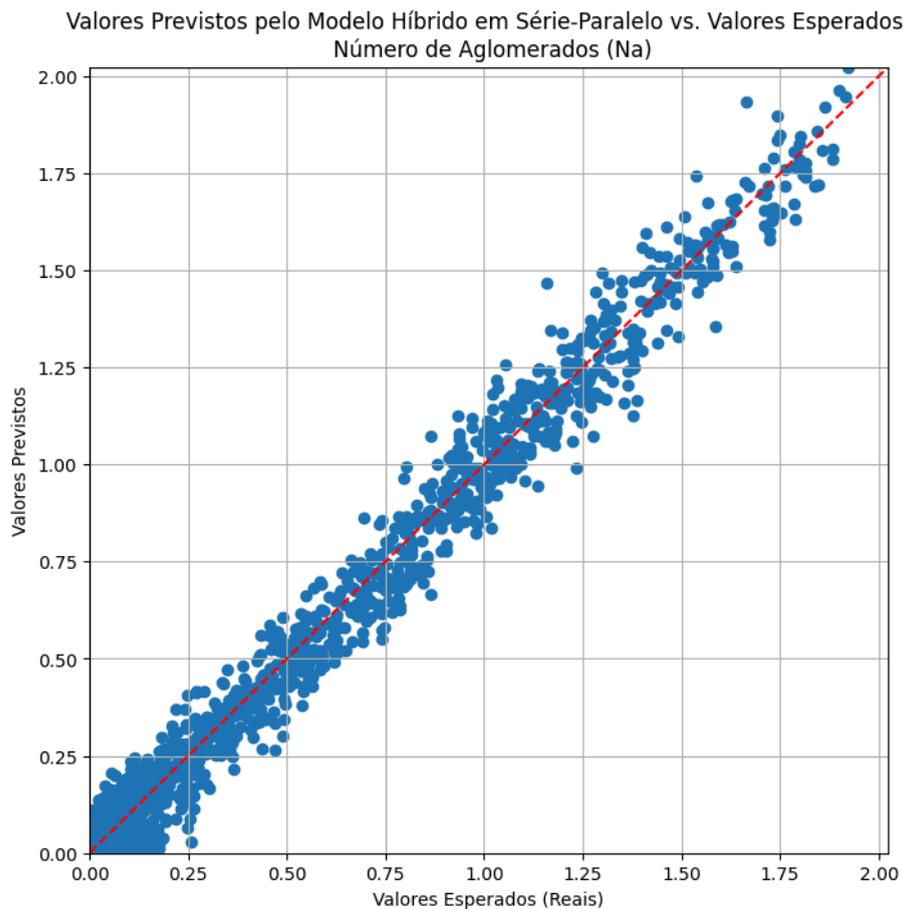
A avaliação da arquitetura híbrida em série-paralelo demonstrou um desempenho superior em relação às arquiteturas individuais de série e paralelo, ao combinar as previsões de ambas por meio da média aritmética. Essa abordagem explorou a complementaridade dos modelos, atenuando os erros individuais e promovendo maior robustez nas estimativas finais. Os resultados apresentados na Tabela 4 evidenciam a eficácia da estratégia de combinação: a predição da concentração de partículas em crescimento (Ng) alcançou um Erro Quadrático Médio (MSE) reduzido e um coeficiente de determinação ( $R^2$ ) elevado, superando os valores obtidos nas arquiteturas isoladas. Da mesma forma, para a variável número de aglomerados (Na), o modelo série-paralelo apresentou melhor desempenho geral, com valores que indicam elevada correlação entre as previsões e os dados reais.

**Tabela 4** - Métricas de desempenho do modelo híbrido em série-paralelo.

Variável	MSE	R <sup>2</sup>
Ng	0,0004	0,9884
Na	0,0051	0,9791

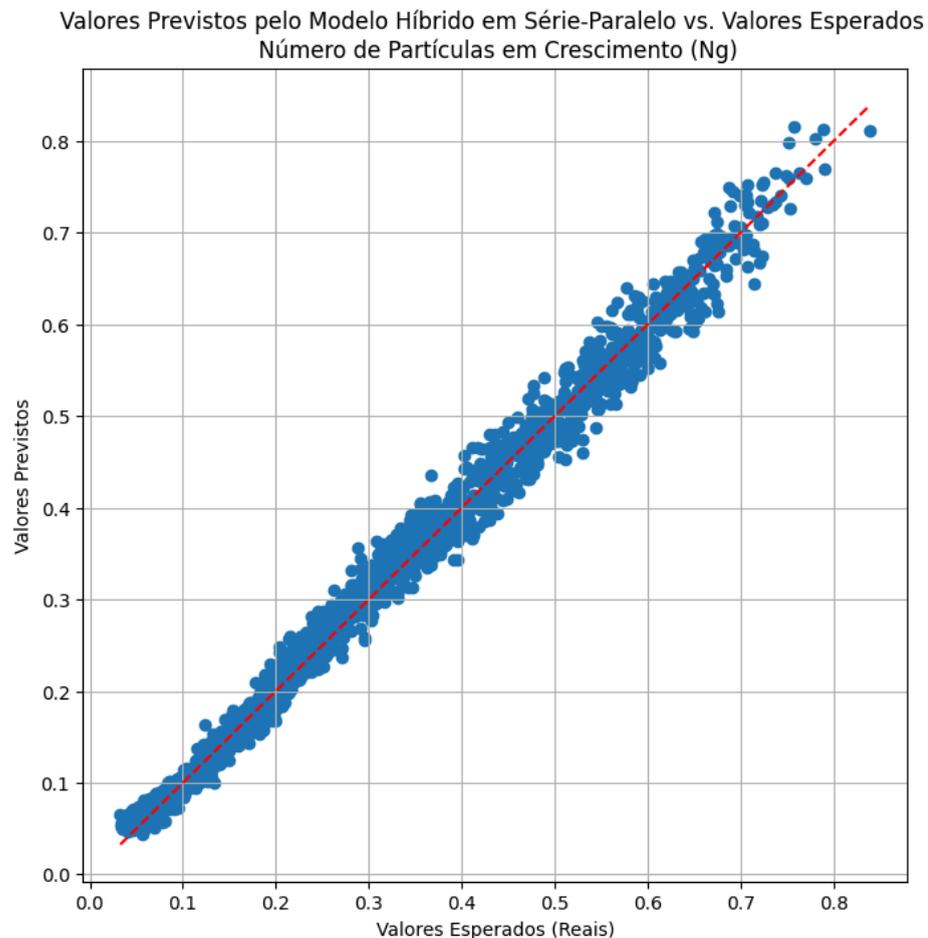
Esses resultados confirmam a hipótese de que a integração de diferentes arquiteturas de modelagem híbrida pode resultar em melhorias significativas na acurácia do sistema. A redução do erro na variável Ng é particularmente notável, o que sugere que a combinação das previsões permitiu capturar com maior fidelidade as nuances do processo de nucleação e crescimento. Para a variável Na, embora a melhoria em relação aos modelos individuais tenha sido mais modesta, o desempenho ainda se manteve em níveis elevados de precisão, evidenciando a capacidade da arquitetura série-paralelo de lidar com a complexidade das interações envolvidas na formação de aglomerados.

A Figura 24 apresenta o gráfico de dispersão entre os valores previstos e os valores reais da concentração de aglomerados (Na), resultantes da aplicação da modelagem híbrida em série-paralelo. A distribuição dos pontos ao longo da linha de identidade (representada pela linha tracejada vermelha) evidencia uma forte concordância entre as estimativas geradas pelo modelo combinado e os dados de referência. A elevada densidade de pontos próximos à linha ideal indica que o modelo série-paralelo foi capaz de capturar com grande precisão a dinâmica de crescimento de partículas, promovendo uma redução nos erros individuais observados nas arquiteturas isoladas. Essa representação visual reforça os resultados estatísticos obtidos, sugerindo que a integração das previsões dos modelos em série e paralelo proporcionou um ganho de desempenho significativo, especialmente na predição da variável Ng, cuja sensibilidade a variações nos parâmetros é particularmente relevante no contexto do processo de precipitação da alumina.



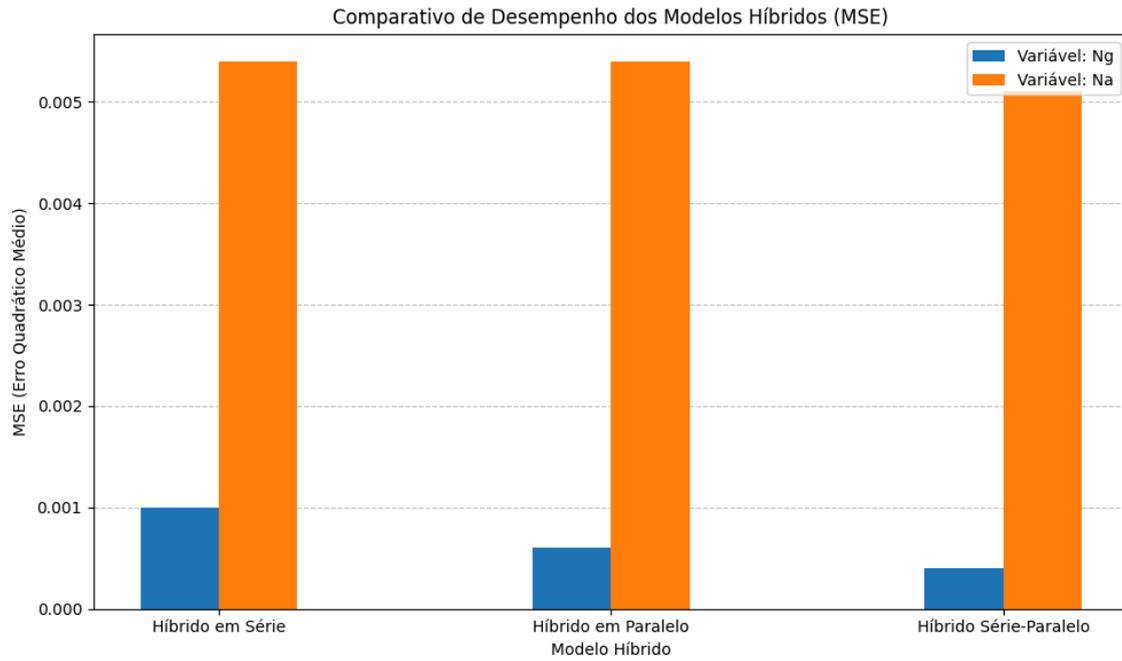
**Figura 24** - Comparação entre os valores previstos e os valores reais da concentração de aglomerados (Na) obtidos pela modelagem híbrida em série-paralelo.

A Figura 25 ilustra a comparação entre os valores previstos e os valores reais da concentração de partículas em crescimento (Ng), obtidos a partir da modelagem híbrida em arquitetura série-paralelo. Observa-se uma distribuição expressiva de pontos próximos à linha de identidade (linha tracejada vermelha), indicando uma forte correlação entre os resultados estimados pelo modelo e os dados reais. A concentração dos pontos ao longo da linha ideal evidencia que o modelo série-paralelo conseguiu reproduzir com elevada fidelidade a dinâmica associada à formação e evolução dos aglomerados. Ainda que se perceba uma leve dispersão em regiões de maior concentração, o comportamento geral do gráfico confirma a robustez da abordagem combinada, especialmente considerando a complexidade intrínseca do fenômeno de aglomeração, que envolve interações não lineares e múltiplos parâmetros. Esses resultados reforçam a eficácia do modelo híbrido série-paralelo na tarefa de predição de variáveis críticas do processo de precipitação da alumina, consolidando sua aplicabilidade como uma ferramenta confiável para simulação de sistemas industriais complexos.

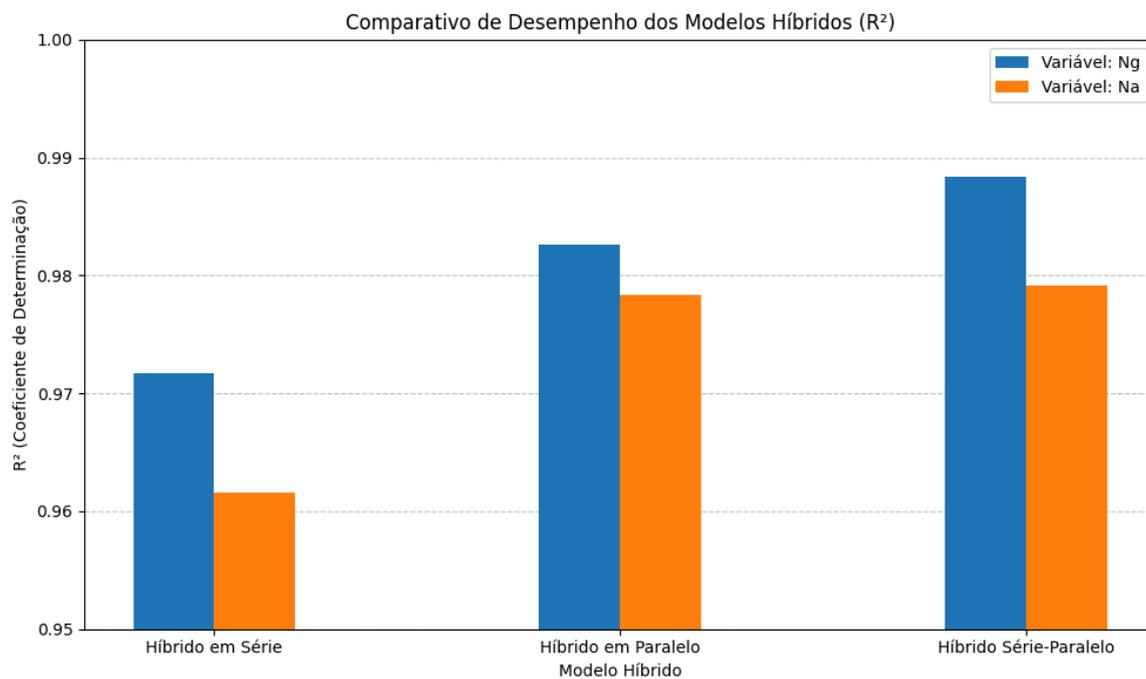


**Figura 25** - Comparação entre os valores previstos e os valores reais da concentração de partículas em crescimento (Ng) obtidos pela modelagem híbrida em série-paralelo.

Com base nos dados apresentados nas Figura 26 e Figura 27, observa-se uma clara distinção na performance preditiva entre as arquiteturas avaliadas. O modelo Híbrido Série-Paralelo demonstrou consistentemente a melhor acurácia, evidenciada pelos menores valores de Erro Quadrático Médio para ambas as variáveis de interesse, Ng e Na. Complementarmente, este modelo, juntamente com o Híbrido em Paralelo, atingiu os maiores Coeficientes de Determinação, indicando uma capacidade superior de explicar a variabilidade dos dados observados. Tais resultados ressaltam a robustez e o ajuste aprimorado da arquitetura Híbrida Série-Paralela, validando-a como a abordagem mais eficaz para a predição e otimização das variáveis cruciais no processo de precipitação.



**Figura 26** - Comparativo de Desempenho dos Modelos Híbridos - MSE.



**Figura 27** - Comparativo de Desempenho dos Modelos Híbridos -  $R^2$ .

# Capítulo 6

## Conclusão

## 6 - Conclusão

Ao longo deste trabalho, foi realizada a integração de modelos fenomenológicos com técnicas de aprendizado de máquina com o intuito de representar, de forma mais precisa e eficiente, a etapa de precipitação do processo Bayer. A partir da modelagem de sistemas cinéticos e da implementação de redes neurais artificiais, foram desenvolvidas diferentes arquiteturas híbridas capazes de prever o comportamento do precipitador em função de parâmetros operacionais e condições iniciais. Essa abordagem permitiu explorar tanto o rigor físico dos modelos baseados em equações diferenciais quanto a flexibilidade dos métodos empíricos, possibilitando uma análise abrangente do processo e a identificação das configurações mais adequadas para sua otimização.

A adoção de um sistema fechado na modelagem do processo de precipitação permitiu uma análise mais precisa e controlada dos efeitos das constantes cinéticas, como nucleação, crescimento e aglomeração, ao eliminar interferências de fluxos externos. Essa abordagem facilita a calibração dos parâmetros, reduz incertezas associadas a variações nas condições de entrada e saída, e proporciona maior confiabilidade na interpretação dos efeitos de variáveis como pH e supersaturação. Além disso, torna a simulação mais comparável com experimentos laboratoriais, que geralmente ocorrem sob condições estáticas, favorecendo ajustes mais realistas dos parâmetros e aumentando a capacidade preditiva do modelo em aplicações acadêmicas e industriais.

A incorporação da dissociação das espécies químicas e do pH no modelo fenomenológico representou um avanço significativo para este trabalho, elevando a robustez e o realismo da representação do processo de precipitação. Essa inovação permitiu uma compreensão mais precisa das interações iônicas e do balanço de fases no licor Bayer, fatores cruciais que influenciam diretamente a nucleação e o crescimento das partículas de hidróxido de alumínio. Ao considerar esses aspectos fundamentais, o modelo desenvolvido se aproxima de forma mais fidedigna das condições operacionais reais, tornando-o uma ferramenta mais confiável e eficiente para a otimização da produtividade do processo.

A comparação entre as três arquiteturas híbridas avaliadas — série, paralelo e série-paralelo — evidencia diferenças significativas quanto à acurácia preditiva e à capacidade de representação do sistema de precipitação. A arquitetura em série demonstrou bom desempenho ao integrar diretamente os parâmetros cinéticos previstos pela rede neural

ao modelo fenomenológico, preservando o rigor físico da simulação. No entanto, seu desempenho depende fortemente da qualidade da estimativa dos parâmetros, o que pode introduzir variações quando o modelo empírico é submetido a entradas fora do domínio de treinamento.

Por outro lado, a arquitetura em paralelo proporcionou previsões diretas das variáveis de saída por meio da RNA, com elevada precisão e rapidez computacional, embora sem considerar explicitamente a estrutura físico-química do processo, o que pode limitar sua capacidade de generalização em condições operacionais distintas.

A abordagem série-paralelo, ao combinar as previsões das duas arquiteturas anteriores por meio da média aritmética, obteve os melhores resultados em termos de desempenho estatístico, com redução nos erros médios quadráticos (MSE) e elevação dos coeficientes de determinação ( $R^2$ ) para ambas as variáveis analisadas. Essa arquitetura se destacou por explorar a complementaridade entre os modelos empírico e fenomenológico, resultando em uma representação mais robusta e confiável do processo. Assim, a modelagem híbrida em série-paralelo se consolida como a alternativa mais eficaz para a simulação da etapa de precipitação, reunindo acurácia, estabilidade e fundamentação física em uma única estrutura computacional.

A modelagem híbrida representa uma estratégia poderosa para otimizar a etapa de precipitação no processo Bayer, ao combinar o rigor dos modelos fenomenológicos com a flexibilidade e capacidade preditiva dos modelos baseados em dados, como redes neurais artificiais. Essa abordagem permite representar com maior precisão a dinâmica do sistema, mesmo diante de variabilidades operacionais, ruídos experimentais e incertezas nos parâmetros cinéticos. Ao integrar conhecimento físico-químico com aprendizado estatístico, a modelagem híbrida possibilita não apenas uma simulação mais realista do comportamento do precipitador, mas também a identificação de condições operacionais ideais para maximizar o rendimento da precipitação, reduzir o tempo de residência e melhorar o controle sobre o tamanho e a qualidade dos cristais formados. Dessa forma, a utilização de modelos híbridos contribui para a tomada de decisão mais precisa em tempo real, promovendo melhorias significativas em eficiência, robustez e produtividade na operação industrial.

# Capítulo 7

## Referências Bibliográficas

## 7 - Referências Bibliográficas

AMARAL, A. R.; Manual de operação da precipitação de hidrato. Apostila da Hydro Alunorte. Barcarena, 2004.

AZEVEDO JÚNIOR, C. M.; Aplicação do Filtro com Reamostragem por Importância Sequencial (Sir) na Simulação de Dados de Processo de Precipitação. Dissertação (Mestrado). Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos, Universidade Federal do Pará, Belém, 2015.

BHUTANI, N.; Modeling, Simulation and Multi-Objective Optimization of Industrial Hydrocrackers. Tese (Doutorado). Department of Chemical and Biomolecular Engineering National University Of Singapore, 2007.

BISHOP, C. M.; Pattern Recognition and Machine Learning. Springer, 2006.

BRAVO, C. E.; SAPUTELLI, L.; RIVAS, F.; PÉREZ, A. G.; NICKOLAOU, M.; ZANGL, G.; DE GUZMÁN, N.; MOHAGHEGH, S. D.; NUNEZ, G.; State of the Art of Artificial Intelligence and Predictive Analytics in the E&P Industry: A Technology Survey. SPE Journal, 2014.

CÔTE, M., GRANDJEAN, B.P.A.; LESSARD, P.; THIBAUT, J.; Dynamic modeling of the activated sludge process: Improving prediction using neural networks, Water Res., 1995.

DEPARTAMENTO DE PRODUÇÃO DE PRODUÇÃO MINERAL. Disponível em: [www.dnpm.gov.br/dnpm](http://www.dnpm.gov.br/dnpm). Acesso em: 10 de agosto de 2023.

DOLTSINIS, S.; FERREIRA, P.; LOHSE, N.; Reinforcement Learning for Production Ramp-Up: A Q-Batch Learning Approach. 11th International Conference on Machine Learning and Applications (ICMLA), 2012.

DUARTE, B.; SARAIVA, P. M.; PANTELIDES, C. C.; Combined Mechanistic and Empirical Modelling. International Journal of Chemical Reactor Engineering, 2004.

GOLUBEV, V. O., BLEDNYKH, I. V., FILINKOV, M. V., ZHARKOV, O. G., SHCHELKONOGOVA, T. N.; Machine learning approach to simulation of continuous seeded crystallization of gibbsite, J. Sib. Fed. Univ. Eng. & Technol., 2022.

GOLUBEV, V.; LITVINOVA T.E.; Dynamic simulation of industrial-scale gibbsite crystallization circuit. Journal of Mining Institute, 2021.

GIULIETTI, M., HOSTOMSKY, J., NYVLT, J.; Cristalização. Ed. UFSCar. 2001.

GROENEWEG, P. G.; The Crystallization of Alumina Trihydrate in a Batch Crystallizer. Report to the Department of Chemical Engineering, McMaster Univ., Hamilton, Canada, 1972.

HUDSON, L. K.; MISRA, C.; PERROTA, A. J.; WEFERS, K.; WILLIAMS, F. S.; Enciclopédia de Química Industrial de Ullmann - Óxido de alumínio. 2000.

KEPPNER, K.; Artificial Intelligence In Supply Chain Planning – Why a Hybrid AI Concept is the Better Choice, Disponível em: <https://www.allthingssupplychain.com/artificialintelligence-in-supply-chain-planning-why-a-hybrid-ai-concept-is-the-better-choice>; 2018.

KOLESNIKOV, A. V.; PANFILOV, A. N.; SEMENOV, V. M.; Dynamic Simulation of Industrial - Scale Gibbsite Crystallization Circuit. Journal of Mining Institute, v. 248, p. 646–655, 2021.

KOTTE, J. J.; Bayer Digestion and Predigestion Desilication Reactor Design. Light Metals, 1981.

LAROS, T. J.; BACZEK, F. A.; Selection of sedimentation equipment for the bayer process. An overview of past and present technology. TMS Light metals, 2009.

LLINAS, RODOLFO.; Biology of the Brain: From Neurons to Networks. Scientific American Magazine. Londres: W H Freeman & Co, 1989.

LI, J.; HUANG, M.; WANG, Y.; TANG, J.; Enhanced Precipitation of Gibbsite from Sodium Aluminate Solution by Adding Agglomerated Active  $\text{Al}(\text{OH})_3$  Seed. Metals, v. 13, n. 2, p. 193, 2023.

LI, X. B.; LU, W. J.; FENG, G. T.; LIU, G.; PENG, Z. H.; ZHOU, Q.; MENG, Y.; The applicability of Debye-Hückel model in  $\text{NaAl}(\text{OH})_4\text{-NaOH-H}_2\text{O}$  sSystem. The Chinese Journal of Process Engineering, p. 525-528, 2005.

LIMA JÚNIOR, G. E.; Metamodelagem Kriging dinâmica aplicada em trocadores de calor. Dissertação (Mestrado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2019.

LINDSAY, S. J.; SGA requirements in coming years. 134th TMS Annual Meeting. São Francisco, 2005.

MARQUES, L. P.; Utilização de Redes Neurais Artificiais e Análise de Componentes Principais no Monitoramento da Qualidade da Água. Dissertação (Mestrado). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2011.

MACIEL, M. J. N.; Simulação da Produção na Precipitação Hydro Alunorte. Dissertação (Mestrado). Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos, Universidade Federal do Pará, Belém, 2015.

MORAES, E.; HARALDSEN, H.; JUNIOR, C.; RIBEIRO, J.; MAGRO, C.; CHARTOUNI, J.; SANTOS, E.; GOMES, D.; Improve the Classification System in Hydro Alunorte Lines 4/5. Light Metals, 2013.

RIBEIRO, F. A.; FONSECA, J. M.; NASCIMENTO, A. P.; Quantifying the Effect of Seeds on Gibbsite Crystallization - Mathematical Modelling of Particle Size Distribution. In: Light Metals 2020. Cham: Springer, 2020.

RODRIGUES, D. A. C.; Modelagem do processo de autoprecipitação de gibsite em decantadores do processo Bayer. Dissertação (Mestrado). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2018.

RUSSELL, S.; NORVIG, P.; Artificial Intelligence: A Modern Approach. Pearson; 4th ed. edição, 2020.

SOUZA, A. D.; Estudo da perda de carga em escoamento multifásico utilizando técnicas de inteligência artificial com ênfase no escoamento de petróleo. Dissertação (Mestrado). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Sergipe, São Cristóvão, 2011.

SU, H. T.; MCAVOY, T. J.; WERBOS, P.; Long-term predictions of chemical processes using recurrent neural networks: A parallel training approach, Ind. Eng. Chem. Res., 1992.

THOMPSON, M. L.; KRAMER, M. A.; Modeling chemical processes using prior knowledge and neural networks, AIChE J., 1994.

VAN CAN, H. J. L.; HELLINGA, C.; LUYBEN, K. C. A. M.; HEIJNEN, J. J.; BRAAKE, H. A. B.; Strategy for dynamic process modeling based on neural networks in macroscopic balances. , AIChE J., 1996.

ZHANG, X.; LIU, H.; CHEN, Q.; Kinetics of Agglomeration of Gibbsite  $\text{Al}(\text{OH})_3$  Crystals in the Precipitation Stage of the Bayer Process. Microscopy and Microanalysis, v. 27, n. S1, p. 112–117, 2021.

ZHOU, Y.; LIU, B.; WANG, L.; Enhancement of the Precipitation Extent of  $\text{Al}(\text{OH})_3$  Crystals in the Bayer Process within a Down-Scaled Tank. Hydrometallurgy, v. 222, p. 107621, 2024.

# Apêndices

## Apêndice 1 - Códigos

### A - Reprodução o modelo de Golubev e Litivnova (2021)

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import solve_ivp

# Definição dos parâmetros do modelo
kn1 = 0.07 # Constante de nucleação primária
kn2 = 0.8 # Constante de nucleação secundária
phi = 3.33 # Fator de crescimento de aglomerados
kga = 8e-4 # Constante de aglomeração
kkg = 6e-3 # Constante de crescimento de aglomerados
kaa = 8e-4 # Constante de quebra de aglomerados
kb = 0.001 # Constante de fragmentação

def model(t, y):
    Ng, Na = y # Partículas em crescimento e aglomerados
    fa = Na / (Ng + Na) if (Ng + Na) > 0 else 0 # Fração
de aglomerados

    # Taxas de nucleação, aglomeração e quebra
    N_dot_g_n = kn1 * (Ng + Na) * (1 - kn2 * (1 + (phi -
1) * fa))
    N_dot_g_a = kga * Ng * Na + 2 * kkg * Ng**2
    N_dot_g_b = 2 * kb * fa
    N_dot_a_a = kkg * Ng**2 - kaa * Na**2
    N_dot_a_b = kb * fa

    dNg_dt = N_dot_g_n - N_dot_g_a + N_dot_g_b
    dNa_dt = N_dot_a_a - N_dot_a_b

    return [dNg_dt, dNa_dt]

# Condições iniciais
Ng0 = 0.01 # Concentração inicial de partículas em
crescimento
Na0 = 0.01 # Concentração inicial de aglomerados
y0 = [Ng0, Na0]

# Tempo de simulação
t_span = (0, 2000) # Intervalo de tempo

```

```

t_eval = np.linspace(*t_span, 500) # Pontos de avaliação

# Resolução do sistema de EDOs
sol = solve_ivp(model, t_span, y0, t_eval=t_eval,
method='RK45')

# Cálculo da distribuição granulométrica (estimativa
simplificada)
def particle_size_distribution(Ng, Na):
    sizes = np.linspace(1, 100, 20) # Tamanhos das
partículas em micrômetros
    distribution = np.exp(-sizes / 20) * (Ng + 0.5 * Na)
# Modelo simplificado de distribuição
    return sizes, distribution

sizes, distribution =
particle_size_distribution(sol.y[0][-1], sol.y[1][-1])

# Plotando os resultados
plt.figure(figsize=(10, 5))
plt.plot(sol.t, sol.y[0], label='Ng (Partículas em
crescimento)', linestyle='-', color='b')
plt.plot(sol.t, sol.y[1], label='Na (Aglomerados)',
linestyle='--', color='r')
plt.xlabel('Tempo')
plt.ylabel('Concentração relativa')
plt.title('Simulação da dinâmica do precipitador no
processo Bayer')
plt.legend()
plt.grid()
plt.show()

# Plotando a distribuição granulométrica
plt.figure(figsize=(8, 5))
plt.bar(sizes, distribution, width=3, color='g',
alpha=0.7)
plt.xlabel('Tamanho das partículas (µm)')
plt.ylabel('Fração relativa')
plt.title('Distribuição Granulométrica das Partículas
Decantadas')
plt.grid()
plt.show()

```

## B - Código modificado considerando as dissociações dos compostos químicos e pH

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import solve_ivp

# Definição dos parâmetros do modelo
kn1 = 0.07 # Constante de nucleação primária
kn2 = 0.8 # Constante de nucleação secundária
phi = 3.33 # Fator de crescimento de aglomerados
kga = 8e-4 # Constante de aglomeração
kkg = 6e-3 # Constante de crescimento de aglomerados
kaa = 8e-4 # Constante de quebra de aglomerados
kb = 0.001 # Constante de fragmentação
kgc = 5e-3 # Constante de crescimento dependente dos íons
dissolvidos

# Definição das concentrações iniciais dos compostos
químicos
C_NaAlOH4_0 = 0.1 # Aluminato de sódio (mol/L)
C_AlOH3_0 = 0.01 # Hidróxido de alumínio (mol/L)
C_NaCl_0 = 0.05 # Cloreto de sódio (mol/L)
C_Na2SO4_0 = 0.02 # Sulfato de sódio (mol/L)
C_NaOH_0 = 0.1 # Hidróxido de sódio (mol/L)
C_Na2CO3_0 = 0.05 # Carbonato de sódio (mol/L)

# Função para calcular o pH
def calculate_pH(C_NaOH):
    return -np.log10(max(C_NaOH, 1e-10)) # Evita log de
zero

def model(t, y):
    Ng, Na, C_NaAlOH4, C_AlOH3, C_NaCl, C_Na2SO4, C_NaOH,
C_Na2CO3 = y # Partículas e composição química
    fa = Na / (Ng + Na) if (Ng + Na) > 0 else 0 # Fração
de aglomerados

    # Cálculo do pH e sua influência na precipitação
    pH = calculate_pH(C_NaOH)
    pH_factor = np.exp(-abs(pH - 10)) # Máxima
precipitação perto de pH 10

    # Crescimento das partículas baseado na
disponibilidade de íons dissolvidos e pH

```

```

    growth_factor = kgc * max(0, C_NaAlOH4 + C_NaOH -
C_AlOH3) * pH_factor

    # Taxas de nucleação, aglomeração e quebra
    N_dot_g_n = kn1 * (Ng + Na) * (1 - kn2 * (1 + (phi -
1) * fa))
    N_dot_g_a = kga * Ng * Na + 2 * kgg * Ng**2
    N_dot_g_b = 2 * kb * fa
    N_dot_a_a = kgg * Ng**2 - kaa * Na**2
    N_dot_a_b = kb * fa

    dNg_dt = N_dot_g_n - N_dot_g_a + N_dot_g_b +
growth_factor * Ng
    dNa_dt = N_dot_a_a - N_dot_a_b + growth_factor * Na

    # Dissociações químicas garantindo que as
concentrações não fiquem negativas
    dC_NaAlOH4_dt = -min(C_NaAlOH4, max(0, dNg_dt * 0.5))
    dC_AlOH3_dt = min(C_NaAlOH4, max(0, dNg_dt * 0.5))
    dC_NaCl_dt = 0 # Cloreto de sódio permanece constante
    dC_Na2SO4_dt = 0 # Sulfato de sódio permanece
constante
    dC_NaOH_dt = -min(C_NaOH, max(0, dC_AlOH3_dt))
    dC_Na2CO3_dt = 0 # Carbonato de sódio permanece
constante

    return [dNg_dt, dNa_dt, dC_NaAlOH4_dt, dC_AlOH3_dt,
dC_NaCl_dt, dC_Na2SO4_dt, dC_NaOH_dt, dC_Na2CO3_dt]

    # Condições iniciais
    Ng0 = 0.01
    Na0 = 0.01
    y0 = [Ng0, Na0, C_NaAlOH4_0, C_AlOH3_0, C_NaCl_0,
C_Na2SO4_0, C_NaOH_0, C_Na2CO3_0]

    # Tempo de simulação
    t_span = (0, 2000)
    t_eval = np.linspace(*t_span, 500)

    # Resolução do sistema de EDOs
    sol = solve_ivp(model, t_span, y0, t_eval=t_eval,
method='RK45')

    # Cálculo da distribuição granulométrica

```

```

def particle_size_distribution(Ng, Na):
    sizes = np.linspace(1, 100, 20)
    distribution = np.exp(-sizes / 20) * (Ng + 0.5 * Na)
    return sizes, distribution

sizes, distribution =
particle_size_distribution(sol.y[0][-1], sol.y[1][-1])

# Plotando a distribuição granulométrica
plt.figure(figsize=(8, 5))
plt.bar(sizes, distribution, width=3, color='g',
alpha=0.7)
plt.xlabel('Tamanho das partículas (µm)')
plt.ylabel('Fração relativa')
plt.title('Distribuição Granulométrica das Partículas
Decantadas')
plt.grid()
plt.show()

# Plotando a dinâmica do precipitador
plt.figure(figsize=(10, 5))
plt.plot(sol.t, sol.y[0], label='Ng (Partículas em
crescimento)', linestyle='-', color='b')
plt.plot(sol.t, sol.y[1], label='Na (Aglomerados)',
linestyle='--', color='r')
plt.xlabel('Tempo')
plt.ylabel('Concentração relativa')
plt.title('Simulação da dinâmica do precipitador no
processo Bayer')
plt.legend()
plt.grid()
plt.show()

# Plotando a variação da composição química no decantador
plt.figure(figsize=(10, 5))
plt.plot(sol.t, sol.y[2], label='C_NaAlOH4 (Aluminato de
Sódio)', linestyle='-', color='c')
plt.plot(sol.t, sol.y[3], label='C_AlOH3 (Hidróxido de
Alumínio)', linestyle='--', color='m')
plt.plot(sol.t, sol.y[4], label='C_NaCl (Cloreto de
Sódio)', linestyle='-.', color='g')
plt.plot(sol.t, sol.y[5], label='C_Na2SO4 (Sulfato de
Sódio)', linestyle=':', color='b')

```

```
#plt.plot(sol.t, sol.y[6], label='C_NaOH (Hidróxido de
Sódio)', linestyle='-', color='r')
plt.plot(sol.t, sol.y[7], label='C_Na2CO3 (Carbonato de
Sódio)', linestyle='--', color='y')
plt.xlabel('Tempo')
plt.ylabel('Concentração (mol/L)')
plt.title('Variação da Composição Química no Decantador')
plt.legend()
plt.grid()
plt.show()

plt.hist(distribution, bins=20, color='g', alpha=0.7)
```

### C - Código da Modelagem Híbrida em Série

```

import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import solve_ivp
from sklearn.neural_network import MLPRegressor
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.metrics import r2_score as r2
from sklearn.metrics import mean_squared_error, r2_score
from sklearn.model_selection import train_test_split
import warnings
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler

# --- ETAPA 1: Carregamento dos dados ---
# Carregar os dados sintéticos
dados = pd.read_csv("dados_precipitador_sinteticos.csv")

# Colunas relevantes
input_columns = ['C_NaAlOH4_0', 'C_AlOH3_0',
                 'C_NaOH_0', 'phi', 'kga', 'kkg', 'kaa', 'kb', 'kgc']
output_columns = ['Ng_final', 'Na_final']
param_columns = ['kn1', 'kn2']

X_train, X_test, y_train, y_test =
train_test_split(dados[input_columns], dados[param_columns],
test_size=0.2, random_state=42)

# --- ETAPA 2: Normalização dos dados ---
scaler_X = StandardScaler()
scaler_params = StandardScaler()

X_treino = X_train.values
params_treino = y_train.values

X_treino_norm = scaler_X.fit_transform(X_treino)
params_treino_norm =
scaler_params.fit_transform(params_treino)

# --- ETAPA 3: Treinamento da RNA para prever parâmetros ---
modelo_rna = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(32, 10),
activation='relu', solver='adam', max_iter=1000,
random_state=42)

```

```

modelo_rna.fit(X_treino_norm, params_treino_norm)

# Avaliação da RNA
X_test_scaled = scaler_X.transform(X_test)
y_test_scaled_pred = modelo_rna.predict(X_test_scaled) #
Correção aqui
y_test_pred =
scaler_params.inverse_transform(y_test_scaled_pred)

rna_mse = mean_squared_error(y_test.values, y_test_pred)
rna_r2 = r2_score(y_test.values, y_test_pred)

print(f"Acurácia da RNA (MSE): {rna_mse:.6f}, R²:
{rna_r2:.3f}")

# Avaliação da acurácia (R² score nos dados de treino)
r2_score = modelo_rna.score(X_treino_norm, params_treino_norm)
print(f"Acurácia da RNA (R² nos dados de treino):
{r2_score:.4f}")

# --- ETAPA 4: Simulação híbrida (série) com dados de teste
---
Ng_serie = []
Na_serie = []

for i in range(len(X_test)):
    entrada = X_test.iloc[i].values.reshape(1, -1)
    entrada_norm = scaler_X.transform(entrada)

    saida_rna = modelo_rna.predict(entrada_norm)[0]
    parametros =
scaler_params.inverse_transform(saida_rna.reshape(1, -1))[0]

    entrada1 = X_test1[['C_NaAlOH4_0', 'C_AlOH3_0',
'C_NaOH_0', 'phi', 'kga', 'kgg', 'kaa', 'kb',
'kgc']].iloc[i].values.reshape(1, -1)

    kn1 = parametros[0]
    kn2 = parametros[1]
    phi = add_noise(entrada1[0][3])
    kga = add_noise(entrada1[0][4])
    kgg = add_noise(entrada1[0][5])
    kaa = add_noise(entrada1[0][6])

```

```

kb = add_noise(entrada1[0][7])
kgc = add_noise(entrada1[0][8])
C_NaAlOH4_0 = linha[0]
C_AlOH3_0 = linha[1]
C_NaOH_0 = linha[2]
C_NaAlOH4_0_base = 0.1
C_AlOH3_0_base = 0.01
C_NaOH_0_base = 0.1
C_NaCl_0_base = 0.05
C_Na2SO4_0_base = 0.02
C_Na2CO3_0_base = 0.05
parametros_scaled =
modelo_rna.predict scaler_X.transform(entrada))
parametros =
scaler_y.inverse_transform(parametros_scaled)[0]

y0 = [Ng0, Na0, C_NaAlOH4_0, C_AlOH3_0, C_NaCl_0_base,
C_Na2SO4_0_base, C_NaOH_0, C_Na2CO3_0_base]

sol = solve_ivp(model, t_span, y0, t_eval=t_eval,
args=(kn1, kn2, phi, kga, kgg, kaa, kb, kgc), method='RK45',
rtol=1e-5, atol=1e-8)

Ng_serie.append(sol.y[0][-1])
Na_serie.append(sol.y[1][-1])

# Adiciona ao DataFrame
y_test['Ng_hibrido'] = Ng_serie
y_test['Na_hibrido'] = Na_serie

# --- ETAPA 6: Avaliação da acurácia ---
r2_ng = r2(y_test1['Ng_final'], y_test['Ng_hibrido'])
r2_na = r2(y_test1['Na_final'], y_test['Na_hibrido'])

print(f"Acurácia do modelo híbrido (Ng - R²): {r2_ng:.4f}")
print(f"Acurácia do modelo híbrido (Na - R²): {r2_na:.4f}")

mse_ng = mean_squared_error(y_test1['Ng_final'],
y_test['Ng_hibrido'])

print(f"Acurácia do modelo híbrido Ng(mse): {mse_ng:.4f}")
print(f"Acurácia do modelo híbrido Na(mse): {mse_na:.4f}")

```

## D - Código da Modelagem Híbrida em Paralelo

```

import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import solve_ivp
from sklearn.neural_network import MLPRegressor
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler
from sklearn.metrics import mean_squared_error, r2_score
from sklearn.model_selection import train_test_split
import warnings

warnings.filterwarnings("ignore", category=UserWarning)
warnings.filterwarnings("ignore", category=FutureWarning)

# Carregar os dados sintéticos e de teste
dados_treinamento =
pd.read_csv("dados_precipitador_sinteticos.csv")

# Definir entradas e saídas do modelo
input_columns = ['C_NaAlOH4_0', 'C_AlOH3_0', 'C_NaOH_0',
'kn1', 'kn2', 'phi', 'kga', 'kgg', 'kaa', 'kb', 'kgc' ]
output_columns = ['Ng_final', 'Na_final']

X_train, X_test1, y_train, y_test1 =
train_test_split(dados_treinamento[input_columns],
dados_treinamento[output_columns], test_size=0.2,
random_state=42)

# Normalizar os dados
scaler_X = MinMaxScaler()
scaler_y = MinMaxScaler()

X_train = scaler_X.fit_transform(X_train)
y_train = scaler_y.fit_transform(y_train)

# Treinar a RNA
modelo_rna = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(32, 10),
activation='relu', solver='adam', max_iter=5000,
random_state=42)
modelo_rna.fit(X_train, y_train)

# Avaliação da RNA
X_test_scaled = scaler_X.transform(X_test1)

```

```

y_test_scaled_pred = modelo_rna.predict(X_test_scaled) #
Correção aqui
y_test_pred = scaler_y.inverse_transform(y_test_scaled_pred)

rna_mse = mean_squared_error(y_test1.values, y_test_pred)
rna_r2 = r2_score(y_test1.values, y_test_pred)

print(f"Acurácia da RNA (MSE): {rna_mse:.6f}, R²:
{rna_r2:.3f}")

# Simulação híbrida com arquitetura em paralelo
Ng_paralelo_fen, Na_paralelo_fen = [], []
Ng_fen, Na_fen = [], []

def add_noise(val, rel_std=0.01):
    return val + np.random.normal(0, rel_std * max(abs(val),
1e-8))

for i in range(len(X_test1)):
    entrada = X_test1[['C_NaAlOH4_0', 'C_AlOH3_0',
'C_NaOH_0', 'kn1', 'kn2', 'phi', 'kga', 'kgg', 'kaa', 'kb',
'kgc']].iloc[i].values.reshape(1, -1)

    kn1 = add_noise(entrada[0][3])
    kn2 = add_noise(entrada[0][4])
    phi = add_noise(entrada[0][5])
    kga = add_noise(entrada[0][6])
    kgg = add_noise(entrada[0][7])
    kaa = add_noise(entrada[0][8])
    kb = add_noise(entrada[0][9])
    kgc = add_noise(entrada[0][10])
    C_NaAlOH4_0 = linha[0]
    C_AlOH3_0 = linha[1]
    C_NaOH_0 = linha[2]
    C_NaAlOH4_0_base = 0.1
    C_AlOH3_0_base = 0.01
    C_NaOH_0_base = 0.1
    C_NaCl_0_base = 0.05
    C_Na2SO4_0_base = 0.02
    C_Na2CO3_0_base = 0.05
    parametros_scaled =
modelo_rna.predict(scaler_X.transform(entrada))

```

```

    parametros =
scaler_y.inverse_transform(parametros_scaled)[0]

    y0 = [Ng0, Na0, C_NaAlOH4_0, C_AlOH3_0, C_NaCl_0_base,
C_Na2SO4_0_base, C_NaOH_0, C_Na2CO3_0_base]

    sol = solve_ivp(model, t_span, y0, t_eval=t_eval,
args=(kn1, kn2, phi, kga, kgg, kaa, kb, kgc), method='RK45',
rtol=1e-5, atol=1e-8)

    Ng_modelo = sol.y[0][-1]
    Na_modelo = sol.y[1][-1]

    Ng_final = Ng_modelo
    Na_final = Na_modelo

    Ng_paralelo_fen.append(Ng_final)
    Na_paralelo_fen.append(Na_final)
    Ng_fen.append(parametros[0])
    Na_fen.append(parametros[1])

Na_real = y_test1['Na_final']
Ng_real = y_test1['Ng_final']

# Avaliação do modelo híbrido
mse_ng = mean_squared_error(Ng_fen, Ng_paralelo_fen)
r2_ng = r2_score(Ng_fen, Ng_paralelo_fen)
mse_na = mean_squared_error(Na_fen, Na_paralelo_fen)
r2_na = r2_score(Na_fen, Na_paralelo_fen)

print(f"Acurácia do modelo híbrido - Ng (MSE): {mse_ng:.6f},
R²: {r2_ng:.4f}")
print(f"Acurácia do modelo híbrido - Na (MSE): {mse_na:.6f},
R²: {r2_na:.4f}")

```

**E - Código da Modelagem Híbrida em Série-Paralelo**

```
df_paralelo = pd.DataFrame({'Ng_paralelo':  
df['Media_Paralelo_NG']})  
df_serie = pd.DataFrame({'Ng_serie': Ng_fen_serie})  
df_real = pd.DataFrame({'Ng_real': Ng_real_serie})  
ng_concatenado = pd.concat([df_paralelo, df_serie, df_real ],  
axis=1)  
df_final = ng_concatenado  
df_final['Media'] = (df_final['Ng_paralelo'] +  
df_final['Ng_serie'])/2
```