

## ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS A PARTIR DE MODELOS FENOMENOLÓGICOS DE SECAGEM

Alexandre Maciel Ramos (IC)<sup>1</sup>, Hugo Perazzini (PQ)<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Núcleo de Estudos em Sistemas Particulados (NESP), Instituto de Recursos Naturais, Universidade Federal de Itajubá.

**Palavras-chave:** Modelagem. Algoritmo. Transferência de massa. Transferência de calor

### Introdução

Ao longo da história, a secagem tem sido um processo importante para algumas atividades cotidianas como o armazenamento e a preservação dos alimentos e a produção de energia. A secagem consiste na evaporação de água de um sólido por meio da transferência simultânea de calor e massa. (ARAÚJO, 2023).

As resistências ao transporte destes fenômenos são impactadas pelas condições operacionais do processo, como temperatura, umidade relativa e velocidade de escoamento do ar, bem como pelas propriedades do sólido, como porosidade e diâmetro de partícula. Quando a resistência ao transporte de umidade controla a secagem, a escolha das condições operacionais deve ser feita com bastante cuidado visando minimizar essa resistência para uma maior eficiência térmica e menor consumo energético do secador. Dessa maneira, a modelagem matemática da secagem por meio de modelos fenomenológicos que descrevem a transferência simultânea de calor e massa são importantes para estudos de controle e otimização de processos de secagem mais eficientes (PERAZZINI, 2023).

Os modelos de secagem possuem parâmetros fenomenológicos a serem estimados e que representam as características da transferência simultânea de calor e massa e a influência das condições operacionais e das propriedades do material a ser seco. A estimativa destes parâmetros é muito difícil quando os modelos matemáticos são representados por um conjunto de equações diferenciais acopladas, levando ao uso de equações empíricas mais simplificadas e parâmetros oriundos da experimentação, visando uma simplificação do problema. Por outro lado, os parâmetros estimados por correlações empíricas sugeridos pela literatura podem não fornecer resultados simulados condizentes com a prática (PERAZZINI, 2023).

O objetivo deste trabalho foi desenvolver uma metodologia e uma rotina computacional para a estimativa de parâmetros fenomenológicos de secagem e, ao mesmo tempo, resolver numericamente o conjunto de equações diferenciais que descreve a transferência de calor e massa do processo.

Nesta pesquisa, foram estimados parâmetros de dois modelos principais, sendo um que descreve dados de

um experimento de secagem de sílica gel e outro um experimento de secagem de grãos de pimenta preta, no qual é utilizado um modelo baseado no conceito de modelagem a duas fases. O primeiro modelo avaliado consistiu em uma única equação diferencial que descreve a variação da umidade do sólido com o tempo, enquanto o modelo a duas fases, segundo modelo testado, consiste de um conjunto de duas equações diferenciais que descrevem a variação da temperatura e da umidade do sólido na secagem.

Para estimar os parâmetros de ambos os modelos, foi desenvolvido um algoritmo base com a sintaxe MATLAB, que resolve a equação diferencial dos modelos de forma discreta e ajusta esses pontos a dados previamente obtidos de experimentos de secagem. Tal ajuste foi feito por um método de regressão linear contido em funções prontas da biblioteca de otimização do MATLAB.

### Metodologia

O primeiro modelo testado é apresentado na Equação (1). O modelo consiste em uma única equação diferencial que descreve a variação da umidade com o tempo a partir de uma diferença entre a umidade atual do sólido e a umidade de equilíbrio.

$$\frac{dx}{dt} = -k(x - x_{eq}) \quad (1)$$

em que:

$k$ : constante cinética

$x$ : teor de umidade em cada tempo avaliado

$x_{eq}$ : teor de umidade de equilíbrio

Para a solução da Equação (1), foi utilizada a função ODE45 que recebe como argumentos uma função criada com a Equação (1) avaliada de acordo com os dados experimentais, um vetor de tempo e uma condição inicial ( $t = 0$ ). Essa função é implementada dentro de outra função, que é avaliada como argumento em *lsqcurvefit*, que contém um algoritmo padrão para regressão linear para a estimativa dos parâmetros da equação.

Com o intuito de analisar os efeitos da temperatura do ar, o parâmetro  $k$  é comumente tratado

como uma função do tipo Arrhenius, conforme mostra a Equação (2). Este modelo também é solucionado com o mesmo algoritmo, com a diferença de que a função *lsqcurvefit* retorna dois parâmetros estimados, o fator pré exponencial  $k_0$  e a energia de ativação  $E_a$ .

$$\frac{dx}{dy} = -k_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) (x - x_{eq}) \quad (2)$$

em que:

$k_0$ : fator pré-exponencial

$E_a$ : energia de ativação

$R$ : constante ideal dos gases perfeitos

$T$ : temperatura de operação

$x$ : teor de umidade em cada tempo avaliado

$x_{eq}$ : teor de umidade de equilíbrio

O modelo a duas fases consiste no balanço de massa e energia para o sólido, conforme mostram as Equações (3) e (4), respectivamente. A mesma lógica de resolução do código foi utilizada para solucionar o modelo a duas fases abaixo:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{-k_s A (x - x_{eq}) \rho_s}{1 - \varepsilon} \quad (3)$$

$$A = \frac{6(1 - \varepsilon) D_p}{\Phi} \quad (4)$$

em que:

$\Phi$ : esfericidade da partícula

$k_s$ : coeficiente de transferência de massa

$D_p$ : diâmetro da partícula

$x$ : teor de umidade em cada tempo avaliado

$x_{eq}$ : teor de umidade de equilíbrio

$\rho_s$ : massa específica da partícula

$\varepsilon$ : porosidade do leito

$$\frac{dX}{dT} = \frac{hA(T_g - y)\rho_s C_p}{1 - \varepsilon} - \frac{k_s A (x - x_{eq}) \Delta_v \rho_s C_p}{1 - \varepsilon} \quad (5)$$

em que:

$h$ : coeficiente de transferência de calor

$T_g$ : temperatura de equilíbrio do sistema

$y$ : temperatura do gás externo à partícula

$C_p$ : calor específico do sólido

$\Delta_v$ : correlação

Por conta do sistema de equações diferenciais acopladas, o modelo foi resolvido em partes, sendo que o coeficiente de transferência de massa é estimado primeiramente. Em seguida, o código resolve o balanço de energia para encontrar o coeficiente de transferência de calor.

### Resultados e discussão

Ao executar o código com a Equação (1), a constante cinética  $k$  foi estimada para um ajuste global aos dados de umidade em função do tempo com um coeficiente de determinação  $R^2 = 0,9986$ , sendo obtido o valor de  $k = 0,032977 \text{ [min}^{-1}\text{]}$ . A Figura 1 representa a curva simulada pelo modelo, ajustada a partir dos dados de umidade em função do tempo. Como é possível verificar, a Equação (1) ajusta satisfatoriamente os dados experimentais de secagem de sílica gel a  $50^\circ\text{C}$ .

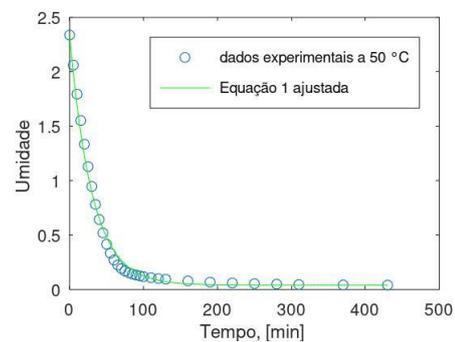


Figura 1 – Dados de umidade em função do tempo do experimento de secagem de sílica gel ajustados pela Equação (1)

Já ao executar o código com base na equação (2), foram obtidos o fator pré-exponencial e a energia de ativação com valores de  $k_0 = 76,977 \text{ [min}^{-1}\text{]}$  e  $E_a = 2083,7 \text{ [kJ mol}^{-1}\text{]}$  respectivamente, com grau de ajuste  $R^2 = 0,9986$ . Conforme é possível verificar, a adição de mais um parâmetro não melhorou os resultados simulados. A adição de mais parâmetros pode acarretar problemas de correlação entre eles e fornecer estimativas não confiáveis, com faixa de valores distantes dos valores comuns reportados pela literatura de secagem.

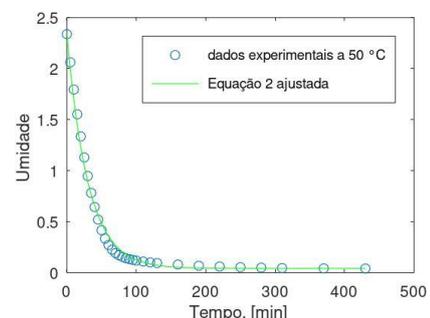


Figura 2 – Dados de umidade em função do tempo do experimento de secagem sílica gel ajustados pela Equação (2).

Para a resolução do modelo duas fases que descreve o experimento de secagem de pimenta preta, em que elas foram submetidas a uma temperatura de  $70^\circ\text{C}$ , foi obtido primeiramente o coeficiente de transferência de massa  $k_s$

$= 2,0245 \cdot 10^{-4}$  [ $\text{kg s}^{-1}\text{m}^{-2}$ ] com grau de ajuste  $R^2 = 0,9987$  e desvio médio de 15,913 %. O resultado do ajuste para a curva de umidade em função do tempo pela Equação (3) pode ser visualizado na Figura 3.

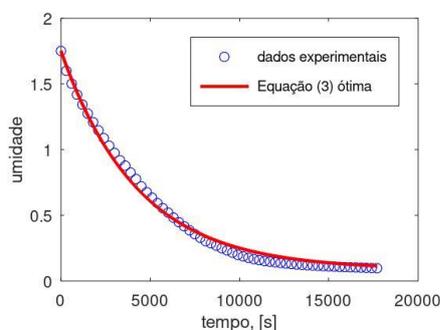


Figura 3 – Ajuste do coeficiente de transferência de massa.

Conforme pode ser observado na Figura 3, os dados experimentais foram bem ajustados à Equação (3).

Ao resolver o modelo com o balanço de energia, o coeficiente de transferência de calor foi estimado com o valor de  $h = 134,94$  [ $\text{W m}^{-2} \text{°C}^{-1}$ ] e grau de ajuste  $R^2 = 0,9223$  e desvio médio 8,4279 %. O ajuste dos dados de temperatura em função do tempo pela Equação (5) pode ser observado na Figura 4.

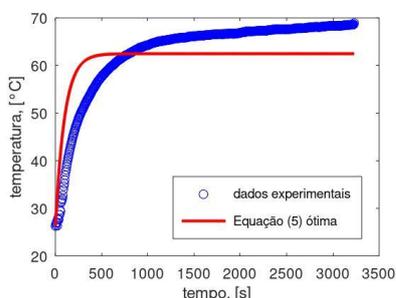


Figura 4 – Ajuste do coeficiente de transferência de calor

Na Figura 4, pode-se visualizar que a equação não se ajustou bem aos dados, o que pode ser explicado por falta, no modelo 5, de parâmetros que considerem a variação de temperatura em função da massa de líquido ainda restante para evaporar.

### Conclusões

Desenvolveu-se uma estrutura de algoritmo que estimou a constante cinética, a energia de ativação e o fator pré-exponencial de um modelo de secagem, bem como os coeficientes de transferência de massa e calor para o modelo de duas fases que descreve a secagem de grãos de pimenta preta.

Todos os parâmetros foram validados pelo grau de ajuste obtido a partir do cálculo do coeficiente de determinação  $R^2$  e do desvio médio relativo.

O ajuste de parâmetros na modelagem de sistemas de secagem é fundamental para que os modelos

sejam mais precisos, gerando melhores simulações, o que permite otimizar processos e melhorar eficiência de equipamentos. Nesse contexto, a rotina desenvolvida neste trabalho possui uma estrutura simples e leve de ser executada, o que permite que a resolução de modelos exponenciais com poucos parâmetros a serem estimados. No entanto, tal algoritmo não é eficiente para realizar cálculos com modelos mais completos, a exemplo da limitação do ajuste da equação 3.

### Agradecimentos

Agradecimentos ao CNPq pelo financiamento a esta pesquisa e à UNIFEI.

### Referências

MELLO, A. T. G. Proposta de novos métodos para a estimação de parâmetros em equações diferenciais ordinárias. 2020. 83 f. Dissertação de Mestrado – Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2020.

ARAÚJO, C. D. M. **Eficiência energética em sistemas de secagem. Estudo de caso: Produção de farinha de cascas de banana.** 2013. 69 p. Dissertação (Mestrado – Programa de pós-graduação em engenharia de energia) – Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, 2013.

MORAIS, S. J. S. *et al.* Modelagem matemática das curvas de secagem e coeficiente de difusão de grãos de feijão-caupi. **Revista Ciência Agrônoma**, Fortaleza, v.44, n.3, p 455-463, jul-set, 2013.

PERAZZINI, H. *et al.* Convective drying of black pepper: Experimental measurements and mathematical modeling of the process. **Journal Elsevier**, Itajubá, v. 143, p 102-116, ago-out, 2023.