

Obtenção da generalização de ordem fracionária de um modelo clássico de secagem e ajuste a dados cinéticos de secagem de soja

Gustavo de Souza Matias (Universidade Estadual de Maringá - UEM) gusmatias@gmail.com
Camila Andressa Bissaro (Universidade Estadual de Maringá - UEM) camilabissaro1@gmail.com
Diogo Francisco Rossoni (Universidade Estadual de Maringá - UEM) diogo.rossoni@gmail.com
Luiz Mario de Matos Jorge (Universidade Estadual de Maringá - UEM) lmjorge@uem.com.br

Resumo:

A modelagem e simulação de processos de secagem tem o intuito de melhoria e concepção de novos sistemas, tendo importância para seu projeto e otimização. As derivadas de ordem fracionária tratam da generalização de derivadas de primeira ordem, tendo emprego em diversas áreas, este trabalho objetiva em escrever um modelo teórico clássico de secagem em ordem fracionária e ajustá-lo a dados cinéticos de secagem de soja. Os dados foram colhidos para a variedade Monsoy 6410 por meio de um secador de bancada a temperatura de 50 °C. Os modelos foram ajustados aos dados experimentais por meio do *Software R*, foram empregados os modelos de Page e Lewis no ajuste, o modelo de Lewis foi escrito em ordem fracionária e teve seu ajuste comparado aos modelos anteriores. Por meio da realização deste trabalho constatou-se que o processo de secagem para a variedade de soja estudada é descrito pela ordem fracionária do modelo uma vez que o modelo de Lewis de primeira ordem não conseguiu compreender os dados cinéticos de secagem.

Palavras chave: Modelagem, Derivada Fracionária, Cinética de Secagem.

Fractional order generalization of a classical model of drying and adjustment to kinetic data of soybean drying

Abstract

The modeling and simulation of drying processes is aimed at improving and designing new systems, having importance for their design and optimization. The fractional order derivatives deal with the generalization of first-order derivatives, having employment in several areas, this work aims to write a classical theoretical model of drying in fractional order and adjust it to kinetic data of soybean drying. Data were collected for the Monsoy 6410 variety by means of a bench drier at a temperature of 50 °C. The models were fitted to the experimental data using *Software R*, the Page and Lewis models were adjusted, the Lewis model was written in fractional order and had its adjustment compared to previous models. It was found that the drying process for the studied soybean variety is described in the fractional order of the model since the first-order Lewis model failed to understand the kinetic drying data.

Key-words: Modeling, Fractional Derivative, Kinetics of Drying.

1. Introdução

A secagem de grãos consiste na redução de sua umidade, tendo grande importância na indústria devido a permitir e facilitar a armazenagem, conservação, estabilização físico-química dos grãos (BABILIS e BELESSIOTIS, 2004).

O excesso de umidade pode contribuir para o desenvolvimento de fungos e infestação de insetos, prejudicando a colheita e o armazenamento. A necessidade de alto rendimento e armazenagem por longos períodos de tempo exige elevado controle do processo de secagem de grãos, o que reforça a importância do estudo desses processos (PARRY, 1985).

A modelagem e a simulação do processo de secagem de grãos são empregadas com o intuito de melhoria e concepção de novos sistemas de secagem. Na modelagem e simulação do processo de secagem é indispensável o uso de dados relacionados com as condições de secagem como a temperatura e a velocidade média de secagem do secador mecânico, esses dados são empregados nos modelos na forma de parâmetros como coeficientes de transferência e constantes de secagem (BABILIS E BELESSIOTIS, 2004).

2. Cinética de secagem

A cinética de secagem tem por objetivo conhecer o comportamento do material sólido durante o processo de secagem que consiste na transferência de água presente no material sólido, sendo representada pelas taxas de secagem e curvas de secagem (LUZ, 2006).

Nas curvas de secagem tem-se a variação do teor de umidade ou da razão de umidade através do tempo. Com o objetivo de descrever o comportamento das cinéticas de secagem nos grãos geralmente é empregado o ajuste de modelos cinéticos.

Para a determinação do teor de umidade (X) pode-se empregar o conhecido método da estufa a $105\text{ }^{\circ}\text{C} \pm 2^{\circ}\text{C}$ durante 48 horas, assim determina-se a Massa seca da soja (M_s). A massa úmida (M_u) nesse caso é determinada por balanço de massa conforme a Equação 1:

$$M_u = M_t - M_s \quad (1)$$

Onde:

M_u – Massa úmida kg;

M_t – Massa total kg;

M_s – Massa seca kg.

Conhecendo-se M_u e M_s é possível determinar o teor de umidade (X) da soja em kg de água por kg de sólido seco (b.s), como é demonstrado pela Equação 2:

$$X = \frac{M_u}{M_s} \quad (2)$$

Uma forma muito comum na literatura de apresentar os dados cinéticos de secagem é através da razão de umidade de X (normalizada). A Razão de Umidade (RU) pode ser determinada experimentalmente por meio da Equação 3:

$$RU = \frac{(X - X_e)}{X_i - X_e} \quad (3)$$

Sendo:

X – teor de umidade do produto em decimal (b.s);

X_e – teor de umidade de equilíbrio do produto em decimal (b.s);

X_i – teor de umidade inicial do produto em decimal (b.s).

2.2 Modelos clássicos de secagem

Assumindo que a resistência ao fluxo de umidade é uniformemente distribuída por todo o interior do material isotrópico homogêneo, o coeficiente de difusividade efetiva (D) é independente do teor de umidade local e a variação de volume é insignificante, a segunda lei de Fick pode ser derivada como apresentado a seguir (CRANK, 1975). Conforme a Equação 4:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = D \nabla^2 X \quad (4)$$

Modelos semi-teóricos e empíricos são em geral generalizações ou simplificações da segunda lei de Fick e valem para os intervalos de temperatura, umidade relativa do ar, fluxo de ar e teor de umidade para as faixas em que esses modelos foram desenvolvidos (FORTES E OKOS, 1981).

O modelos semi-teóricos e empíricos são de mais simples implementação de não necessitam da determinação da geometria do sólido, dentre esses modelos destaca-se o modelo de Lewis por fazer analogia ao processo de transferência de calor (PANCHARIYA, POPOVIC e SHARMA, 2001).

Lewis (1921) descobriu que o processo de secagem em produtos agroindustriais é um processo de transferência de umidade análogo a transferência de calor em um corpo quente imerso em fluido frio. Lewis então comparou o fenômeno com a lei do resfriamento de Newton, sobre essa comparação, sabe-se que a taxa de secagem é proporcional à diferença de umidade do material que está sendo seco e o teor de umidade de equilíbrio para as respectivas condições de secagem. Conforme a Equação 5:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = -k(X - X_e) \quad (5)$$

Sendo:

k – constante cinética de secagem em min^{-1} .

Ao se integrar a Equação 5 obtém-se a seguinte relação: $X = c \cdot \exp(-k \cdot t) + X_e$, onde c é a constante de integração. Aplicando a condição inicial ($t = 0$) obtém-se a relação da Equação 6 para a razão de umidade pois c assume o valor $X_0 - X_e$ conforme observa-se:

$$\frac{X - X_e}{X_0 - X_e} = \exp(-k \cdot t) \quad (6)$$

O modelo de Page é uma modificação do modelo de Lewis na qual foi incorporado um parâmetro n mais na tentativa de obter-se melhores ajustes, esse modelo já foi empregado com sucesso no ajuste da cinética de secagem de produtos agroindustriais por diversos autores (PANCHARIYA, POPOVIC e SHARMA, 2001).

$$\frac{X - X_e}{X_0 - X_e} = \exp(-k \cdot t^n) \quad (7)$$

Sendo:

n – parâmetro de ajuste.

2.3 Derivadas fracionárias

O cálculo de ordem fracionária, usualmente denominado Cálculo Fracionário (CF), tem função de generalizar o cálculo integral e diferencial de ordem inteira proposto por Leibniz e Newton. Na língua portuguesa é comum utilizar a nomenclatura CF devido ao fato de estar devidamente consolidada, sendo uma tradução de *Fractional Calculus* (TENREIRO MACHADO *et al.*, 2010 *apud* RODRIGUES e OLIVEIRA, 2015).

Em termos matemáticos o cálculo fracionário desperta muito interesse, pois o mesmo se vale de diversas funções espaciais na resolução de problemas, tais como a função Gama, como uma generalização da função fatorial e a função de Mittag-Leffler de um parâmetro como uma generalização da função exponencial, além de diversas outras com finalidades acadêmicas ou práticas (MAINARD, 2010 *apud* RODRIGUES e OLIVEIRA, 2015).

Sendo uma criação de Magnus Gösta Mittag-Leffler a função Mittag-Leffler desempenha o mesmo papel da função exponencial de base e no cálculo convencional. Dessa forma a função Mittag-Leffler é a solução de equações lineares diferenciais por isso é conhecida como a generalização fracionária da função exponencial (CAMARGO e OLIVEIRA, 2015).

A função proposta por Mittag-Leffler (1903), E_α trata-se de uma função complexa de um parâmetro, sejam x e α complexos para $Re(\alpha) > 0$:

$$E_\alpha(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(x)^i}{\Gamma(\alpha_i + 1)} \quad (8)$$

Como essa função é uma generalização da função exponencial para $\alpha = 1$ é possível verificar essa relação por série de Taylor, conforme a Equação 9:

$$E_1(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(x)^i}{\Gamma(i + 1)} \quad (9)$$

A função de Mittag-Leffler pode ser empregada na obtenção da derivada fracionária de modelo Lewis, pois como $\frac{\partial X}{\partial t} = -k(X - X_e)$, logo $\frac{\partial^\alpha X}{\partial t^\alpha} = -k(X - X_e)$, de modo que α representa a ordem fracionária da derivada, assim obtém-se a seguinte relação (LEWIS, 1921; MITTAG-LEFFLER, 1903). É descrito pela Equação 10:

$$\frac{X - X_e}{X_0 - X_e} = E_\alpha(k \cdot t^\alpha) \quad (10)$$

Na forma de série, conforme a Equação 11:

$$\frac{X - X_e}{X_0 - X_e} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-kt^\alpha)^i}{\Gamma(\alpha_i + 1)} \quad (11)$$

O modelo também pode ser escrito diretamente em termos de X de modo que se obtém a

Equação 12:

$$X = (X_0 - X_e) \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-kt^{\alpha})^i}{\Gamma(\alpha_i + 1)} + X_e \quad (12)$$

Com o modelo de Lewis escrito em ordem fracionária, obtém-se uma generalização para o modelo de modo que sua ordem não precisa ser necessariamente inteira, inclusive pode-se procurar uma fração de ordem que melhor descreva o processo.

2.4. Métodos para a seleção de modelos

A seleção de um modelo deve ser baseada em um critério muito bem justificado de qual o “melhor” modelo, esse “Critério de seleção” deve ser baseado em uma filosofia que trate de modelos e inferência estatística, essa filosofia deve levar em consideração que os dados são limitados sendo finitos e contendo erros experimentais (BURNHAM e ANDERSON, 2004).

A seguir são apresentados alguns dos critérios mais utilizados na literatura para a seleção de modelos não lineares.

2.4.1 EQM – Erro Quadrático Médio

O Erro Quadrático Médio (EQM) de um modelo é dado pelos desvios do modelo, considerando a diferença entre os valores preditos e os valores experimentais ou reais (VIEIRA, *et al.*, 2008). O EQM é apresentado na Equação (13):

$$EQM = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{j} \quad (13)$$

Sendo:

y_i – i -ésimo valor da resposta;

$\hat{y}_i$ – Estimativa de y_i ;

j – Número de observações da amostra.

Quanto menor o EQM melhor um modelo representa o processo, pois, os dados simulados são mais próximos dos reais.

2.4.2 Raiz de EQM

Hallak e Pereira Filho (2011) empregam a Raiz de EQM como Critério de Informação, a Equação (14) apresenta a relação utilizada pelos autores para calcular o critério:

$$\text{Raiz de EQM} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{j}} \quad (14)$$

A Raiz de EQM proporciona a vantagem de estimar o modulo do erro em suas proporções reais (HALLAK e PEREIRA FILHO, 2011).

2.4.3 AIC – Critério de Informação de Akaike

Conforme Akaike (1974), o viés dos dados é fornecido de forma assintótica pelo número de

parâmetros a serem estimados no modelo, dessa forma o autor definiu um critério de informação pela relação da Equação (15):

$$AIC = 2k - 2\ln(\hat{L}) \quad (15)$$

$\hat{L}$ – Valor da função máxima verossimilhança do modelo;

k – O número de parâmetros estimados pelo modelo

O modelo Akaike baseia-se na existência de um modelo real que é desconhecido, dessa forma baseia-se em quantificar a diferença entre o modelo avaliado e esse modelo real desconhecido. Portanto, quanto menor o valor de Akaike para o modelo, melhor o modelo se ajusta aos dados experimentais. O Critério de Informação Akaike pode ser empregado para comparar diversos modelos (AKAIKE, 1974).

2.4.4 BIC- Critério de Informação Bayesiano

O Critério de Informação Bayesiano é um modelo proposto por Schwarz (1978), sendo representado pela Equação (16):

$$BIC = \ln(j)k - 2\ln(\hat{L}) \quad (16)$$

O critério da Informação BIC de Schwarz (1978) é semelhante ao modelo proposto por Akaike (1974), porém em estrutura Bayesiana.

3. Materiais e métodos

Para a realização do experimento foram empregados os seguintes materiais e equipamentos: sementes da variedade Monsoy 6410, um secador de leito fixo de 6 cm de diâmetro interno com 30 cm de comprimento isolado com papelão, um anemômetro para controlar a vazão do secador, uma balança semi-analítica para a realização das pesagens periódicas com o objetivo de determinar a variação do teor de umidade (X) das amostras, um cronômetro para controlar os intervalos de tempo entre as pesagens, um banho termostático para hidratar as sementes por cerca de um minuto de modo a proporcionar um teor de umidade próximo a 19%, uma peneira Tyler/Mesh 12 para levar as sementes ao banho e ao secador, um papelão com mesma dimensão que a bandeja do secador e com um furo circular no meio de mesmo raio da peneira, uma estufa empregada na determinação do peso seco da soja e o dessecador para acondicionar as amostras que saiam da estufa até que estas resfriassem.

O experimento foi realizado em duplicatas, para a determinação do teor de umidade inicial das amostras primeiramente foi determinado o peso seco pelo método da estufa a 105 °C por 48 horas. Após determinado o peso seco foi determinado o teor de umidade X da amostra pelas Equações 1 e 2, respectivamente. Assim foram obtidos os dados cinéticos de secagem.

Durante o processo de secagem o ar presente no ambiente segue até a peneira através de um tubo que conecta o ventilador e a mesa que dá suporte à bandeja do secador. Dentro do tubo há resistências, estas são empregadas no aquecimento do ar durante o processo de secagem, conforme a Figura 1. Neste estudo, operou-se com temperatura de ar de secagem de 50°C.

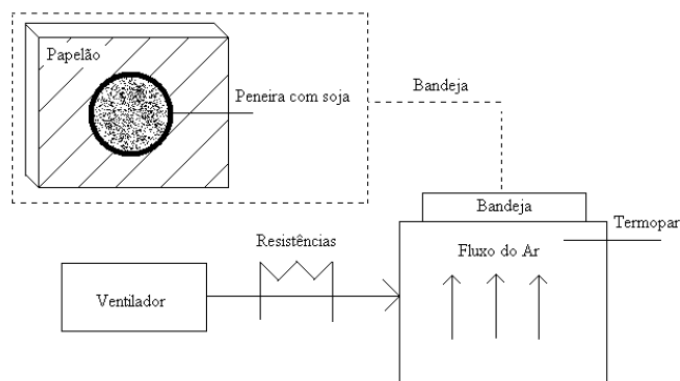


Figura 1 – Esquema ilustrativo do secador de bandeja de leito fixo

Fonte: DEFENDI *et al.*, (2015)

A soja é colocada dentro da peneira, a qual é alocada no centro do papelão sobre a bandeja do secador, com o objetivo do fluxo de ar passar apenas dentro da peneira. A soja que foi hidratada a uma umidade inicial de 19 % (b.s) é pesada em uma balança analítica em intervalos pré-determinados de tempo até peso constante. Dessa forma, obteve-se a cinética de secagem. A Figura 1 ilustra o sistema de funcionamento do secador.

3.1 Ajuste e modelagem dos dados experimentais

Para o tratamento de dados e ajuste de modelos não lineares foi empregado o *Software R* desenvolvido por R Core Team (2016). Para o ajuste dos dados experimentais da cinética de secagem da soja foram empregados os modelos de Lewis e Page. Esses modelos foram rearranjados em Termos de X e comparados com o modelo de Lewis escrito em ordem fracionária.

O termo X_e foi tratado como parâmetro de ajuste, pois o experimento de secagem durou uma hora apenas, não havia certeza de que foi possível determinar X_e .

O ajuste foi feito pelo método Gauss-Newton, com a finalidade de determinar-se o melhor ajuste. Foram utilizados os critérios de seleção de modelos Akaike (AIC), Critério de informação Bayesiano (BIC), Erro Quadrático Médio (EQM) e Raiz do Erro Quadrático Médio ($\sqrt{\text{EQM}}$).

4. Resultados e discussão

Os modelos de Page, Lewis e Lewis de ordem fracionária foram ajustados pelo *Software R*. Os valores dos parâmetros ajustados dos modelos são apresentados na Tabela 1.

Parâmetros	Page	Lewis Primeira ordem	Lewis fracionário
k	0.3070	0.1753	0.24245
X_e	0.1005	0.1166	0.08773
n	0.5158	--	--
α	--	--	0.57478

Fonte: Autores (2017).

Tabela 1 – Ajuste de parâmetros dos modelos

Constata-se que os valores do X_e são muito próximos como esperado, uma vez que esse parâmetro tem significado físico, os valores de X_e obtido possuem uma média de 0.10161, o

que indica que se chegou ao equilíbrio ou muito próximo desse estado durante a realização do experimento, já que foi obtido um valor de X_e de 0.1077067, portanto, muito próximo do estimado.

Com a finalidade de comparação dos ajustes dos modelos foram construídas as Figuras 2 e 3 que demonstram respectivamente a comparação dos ajustes do modelo de Lewis ordem fracionária com o modelo de Page e com o modelo de Lewis de primeira ordem. Observou-se que os ajustes do modelo de Page e o modelo de Lewis de ordem fracionária ficaram muito próximos e descreveram bem os dados, enquanto o modelo de Lewis de primeira ordem falhou ao descrever o processo apresentando um ajuste grosseiro, isso indica que o processo se dá na ordem fracionária.

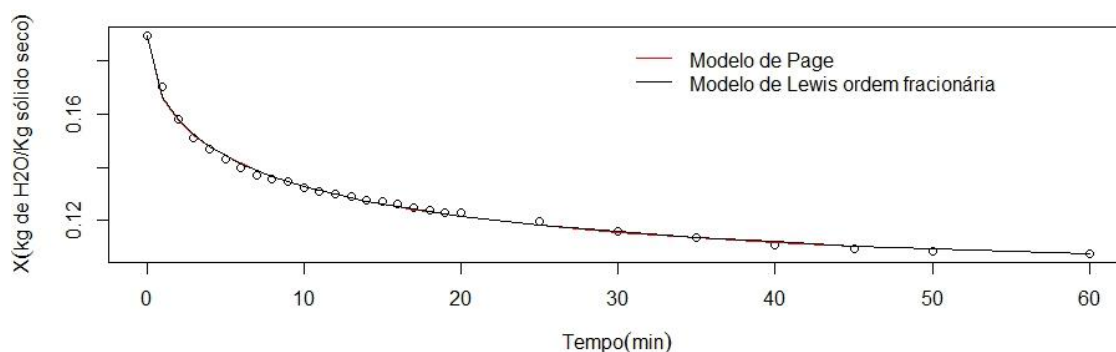


Figura 2 – Comparação modelo de Lewis ordem fracionária e modelo de Page.

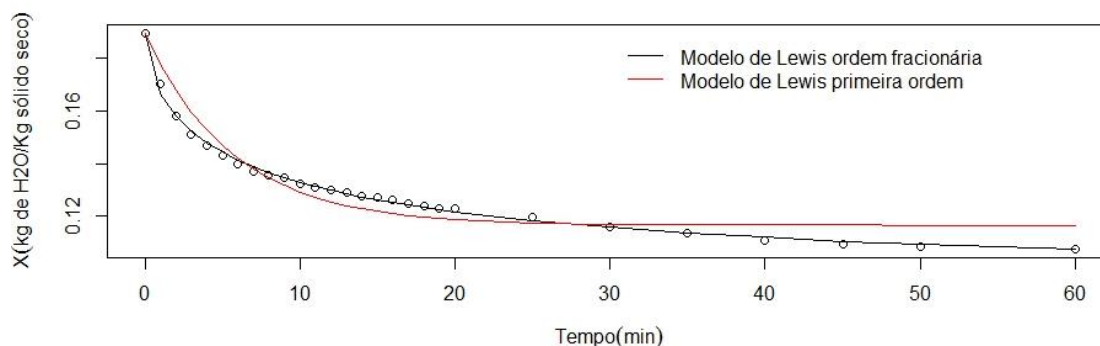


Figura 3 – Comparação modelo de Lewis ordem fracionária e modelo de Lewis primeira ordem.

Para realizar comparação entre os ajustes dos modelos também foi construída a Tabela 2 que apresenta os critérios de seleção de modelos AIC, BIC, EQM e $\sqrt{EQM}$, nela são apresentados os valores desses critérios para cada modelo.

Critério de seleção	Page	Lewis primeira ordem	Lewis fracionário
AIC	-287.3028	-208.6905	-292.5512
BIC	-281.9739	-204.6939	-287.2224
EQM	1.538959e-06	2.73883e-05	1.275913e-06
$\sqrt{EQM}$	0.001240548	0.005233383	0.001129563

Fonte: Autores (2017).

Tabela 2 – Comparação de modelos.

Conforme se observa pela Tabela 2 o modelo de Lewis em ordem fracionária apresentou o melhor ajuste, apresentando melhores resultados tanto para AIC e BIC, quanto para EQM e $\sqrt{EQM}$, já modelo de Lewis de primeira ordem apresentou os piores resultados apresentou os maiores valores nos critérios empregados na comparação.

Os resultados obtidos pelo modelo de Page foram muito próximos ao modelo de Lewis de ordem fracionária, isso provavelmente se deve ao fato de ambos os modelos possuírem três parâmetros, pois a ordem da derivada α foi tratada como um parâmetro de ajuste, enquanto o modelo de primeira ordem possui apenas 2 parâmetros.

Vale ressaltar que o modelo de Lewis em ordem fracionária possui significado físico uma vez que é uma generalização do modelo de primeira ordem em que se procurou determinar a ordem em que a taxa de variação da umidade ocorre. Enquanto o modelo de Page cujo parâmetro n é tratado como um parâmetro de ajuste empírico não possuindo um significado físico.

4. Considerações finais

O modelo de Lewis de primeira ordem não apresenta um ajuste satisfatório aos dados cinéticos de secagem soja.

O modelo de Lewis de ordem fracionária pode ser empregado com sucesso na descrição de dados cinéticos de soja, o que é reforçado pelo fato da ordem fracionária ter apresentado um ajuste de 0.57, portanto, bem diferente de 1.

O modelo de Page descreve bem os dados cinéticos de secagem, tendo ajuste muito próximo ao modelo de Lewis de ordem fracionária. Porém, os parâmetros do modelo não tem interpretação física uma vez que, é uma variação do modelo de Lewis de primeira ordem com um parâmetro a mais, mas esse parâmetro é apenas um parâmetro de ajuste empírico colocado no modelo para melhorar o ajuste.

Por fim, verificou-se que a derivadas fracionárias podem ser empregadas com sucesso na descrição de processos de secagem de produtos agroindustriais, uma vez que os modelos que descrevem esses processos não precisam ser necessariamente de ordem inteira.

Referências

AKAIKE, H. *A new look at the statistical model identification*. IEEE Transactions on Automatic. IEEE Transactions on Automatic, v. 19, n. 6, p. 716-723, 1974.

BABILIS, S. J.; BELESSIOTIS, V. G. *Influence of the drying conditions on drying constants and moisture diffusivity during the thin-layer drying of figs*. Journal of Food Engineering, v. 65, n. 3, p. 449-458, 2004.

BURNHAM, K. P.; ANDERSON, D. R. *Multimodel inference: understanding aic and bic in model*. Sociological Methods and Research, Beverly Hills, v. 33, n. 2, p. 261-304, 2004.

CAMARGO, R. F.; OLIVEIRA, E. C. *Cálculo Fracionário*. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2015.

CRANK, J. *The mathematics of diffusion*. Clarendon Press, Oxford, 1975.

DEFENDI, R. O.; PARAÍSO, P. R.; JORGE, L.M.M. *Modulação Simultânea da Temperatura e da Vazão do ar na Entrada de um Secador em Leito Fixo*. Blucher Chemical Engineering Proceedings Vol. 2, n. 1, p. 1424-1433, 2015.

FORTES, M.; OKOS, M. R. *Non-equilibrium thermodynamics*. Transactions of ASAE, v. 22, p. 761-769, 1981.

HALLAK, R.; PEREIRA FILHO, A. J. *Metodologia para análise de desempenho de simulações de sistemas convectivos na região metropolitana de São Paulo com o modelo ARPS: sensibilidade a variações com os esquemas de advecção e assimilação de dados*. Revista Brasileira de Meteorologia Vol 26, n. 4, p. 591-608, 2011.

LUZ, G. R.; GONÇALVES ANDRADE, C. M.; JORGE, L. M.M.; PARAÍSO, P. R. *Análise energética da secagem de farelo de soja em secador rotativo indireto*. Acta Scientiarum. Technology Vol. 28, n. 2, p. 173-180, 2006.

MITTAG-LEFFLER, G. M. *Sur la Nouvelle fonction $E(x)$* . Comptes Rendus de l'Academie des Sciences, Vol. 2, n. 137, p. 554-1558, 1903.

PANCHARIYA, P. C.; POPOVIC, D.; SHARMA, A. L. *Thin-layer modelling of black tea drying process*. Journal of Food Engineering, Mar. p. 349-357, 2001.

PARRY, L. *Mathematical modelling and computer simulation of heat and mass transfer in agricultural grain drying: a review*. Journal of Food Engineering Vol. 32, n. 1, p. 1-29, 1985.

R CORE TEAM. *R: A language and environment for statistical computing*. R Foundation for Statistical Computing. Viena, Áustria, 2016

RODRIGUES, F. G.; OLIVEIRA, E. C. *Introdução às técnicas do cálculo fracionário para estudar modelos da física matemática*. Revista Brasileira de Ensino de Física Vol. 37, n. 3, p. 3305-1-3305-12, 2015.

SCHWARZ, G. *Estimating the dimensional of a model*. Annals of Statistics. Annals of Statistics, Hayward Vol 6, n. 2, p. 461-464, 1978.

VIEIRA, F. H. T.; SOUSA, L. M. C.; LING, L. L. *Esquema de controle adaptativo de tráfego de redes baseado em um algoritmo de predição fuzzy*. Sba Controle & Automação, Goiás, v. 19, n. 3, p. 281-301, Sept 2008.