



## COMPARAÇÃO DE MODELOS FENOMENOLÓGICOS PARA A HIDRATAÇÃO DE GRÃOS DE SOJA

*Douglas Junior Nicolin<sup>1</sup>, Bruno Luiz Marcondes<sup>2</sup>, Cid Marcos Gonçalves Andrade<sup>3</sup>, Luiz Mario de Matos Jorge<sup>4</sup>*

**RESUMO:** Tradicionalmente o modelo de Hsu tem sido utilizado na previsão e análise do processo de hidratação de grãos. No modelo de Hsu, a variação da umidade na superfície é representada por uma condição de contorno que considera esta variação como um processo de primeira ordem. Neste trabalho foi desenvolvido um modelo fenomenológico de parâmetros distribuídos ( $PDX_{eq}$ ) similar ao modelo de Hsu, porém com uma condição de contorno na superfície diferente: admite que a superfície do grão alcance o valor de umidade de equilíbrio instantaneamente. Os experimentos de hidratação foram realizados considerando 300 g de grãos de soja que foram expostos à luz ultravioleta por 30 minutos. Uma solução de benzoato de sódio (0,1%) foi aquecida nas temperaturas do experimento e adicionada no recipiente para a hidratação. As amostras foram retiradas em tempos pré-estabelecidos até que a umidade de equilíbrio fosse atingida. A umidade em excesso foi retirada da superfície dos grãos com uso de papel toalha e a umidade dos grãos foi determinada pelo método clássico de secagem a 105°C por 24h. As simulações dos modelos  $PDX_{eq}$  e de Hsu nas condições experimentais de hidratação de grãos de soja sugerem que o modelo  $PDX_{eq}$  represente melhor o processo de hidratação de grãos. Todas as simulações foram feitas com uso do software MATLAB.

**PALAVRAS-CHAVE:** Difusão, hidratação, modelagem.

### 1 INTRODUÇÃO

Um interesse especial se encontra em caracterizar o comportamento dinâmico do processo de hidratação de grãos uma vez que este processo depende de variáveis como temperatura e umidade inicial do grão considerado. A variação da umidade de grãos com o tempo tem sido representada por dois tipos de modelos: os empíricos e os fenomenológicos (COUTINHO 2006b). Modelos empíricos são aqueles que descrevem um processo baseados em correlações matemáticas mais simples oriundas de dados experimentais observados e seus parâmetros não possuem significado físico. Já os modelos fenomenológicos são aqueles que consideram etapas elementares de transferência de massa e os parâmetros obtidos em modelos como estes possuem significado físico.

<sup>1</sup> Acadêmico do Programa de Mestrado em Engenharia Química – PEQ, da Universidade Estadual de Maringá – UEM. Bolsista do CNPq. [douglas.nicolin@gmail.com](mailto:douglas.nicolin@gmail.com)

<sup>2</sup> Acadêmico de Engenharia Química – DEQ, UEM. [brunoluizmarcondes@hotmail.com](mailto:brunoluizmarcondes@hotmail.com)

<sup>3</sup> Coordenador, Professor PhD do Departamento de Engenharia Química – DEQ – da Universidade Estadual de Maringá – UEM. [cid@deq.uem.br](mailto:cid@deq.uem.br)

<sup>4</sup> Orientador, Professor PhD do Departamento de Engenharia Química – DEQ – da Universidade Estadual de Maringá – UEM. [immj@deq.uem.br](mailto:immj@deq.uem.br)

COUTINHO *et al* (2006a) e HSU (1983) utilizaram modelos fenomenológicos para a análise do fenômeno de hidratação. Este tipo de modelo também se divide em duas vertentes conhecidas como modelos de parâmetros concentrados, que não consideram variações espaciais da propriedade descrita, e modelos de parâmetros distribuídos levam em consideração a variação da propriedade em pontos espaciais distintos do material de análise.

OMOTO *et al* (2009) propuseram um modelo fenomenológico de parâmetros concentrados para a hidratação de ervilhas.

No trabalho apresentado por COUTINHO *et al* (2009) há a solução do Modelo Fenomenológico de Parâmetros Distribuídos (MFPD), com condição de contorno de igualdade de fluxos na superfície e coeficiente de difusão constante, para a hidratação de grãos de soja na qual são introduzidas variáveis adimensionais e o modelo é resolvido numericamente.

COUTINHO *et al* (2010) compara os parâmetros obtidos pela solução numérica do MFPD com os obtidos pelo ajuste do modelo de HSU (1983) que considera que a umidade na superfície do grão é descrita como um processo de primeira ordem e coeficiente de difusão como uma função da umidade.

O presente trabalho tem como objetivo propor um modelo fenomenológico de parâmetros distribuídos com condição de contorno de umidade na superfície do grão constante e compará-lo com as do modelo de HSU (1983).

## 2 MATERIAIS E MÉTODOS

Os dados experimentais utilizados para a validação dos modelos do presente trabalho são os obtidos por COUTINHO (2006b) de acordo com o seguinte procedimento experimental:

O equipamento utilizado neste estudo se constituiu de um banho termostático, no qual foi colocado um recipiente retangular de alumínio com amostras de grãos de soja com umidade inicial de 10% (peso).

Os experimentos foram realizados como segue:

- 1) Pré-tratamento:
  - a) As amostras foram expostas a luz ultravioleta por 30 min;
  - b) Uma solução diluída (0,1%) de benzoato de sódio foi preparada;
  - c) O benzoato de sódio foi aquecido a 10, 30 e 50 °C e adicionado no recipiente.
- 2) Aproximadamente 300 g de grãos de soja foram adicionados na hidratação;
- 3) Amostras da hidratação foram retiradas em tempos pré-estabelecidos até que a umidade de equilíbrio fosse atingida;
- 4) As amostras foram colocadas em papel toalha para remoção do excesso de água na superfície;
- 5) A umidade das amostras foram determinadas pelo método clássico de secagem a 105°C por 24h (ADOLFO LUTZ, 1985).

Os modelos a serem resolvidos diferem da condição de contorno na superfície. A equação diferencial que descreve o processo de hidratação leva em consideração um coeficiente de difusão que é função da umidade e é mostrada a seguir.

$$\frac{\partial X}{\partial t} = D_o e^{k_1 X} \left[ \frac{\partial X}{\partial r} \left( \frac{2}{r} + k_1 \frac{\partial X}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 X}{\partial r^2} \right] \quad (1)$$

Condição inicial e condição de contorno em  $r = 0$ :

$$X = X_o \text{ para todo } r \text{ e } t = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial X}{\partial r} = 0 \text{ para } r = 0 \text{ e } t \geq 0 \quad (3)$$

Condições de contorno na superfície:

Modelo PDX<sub>eq</sub>:

$$X = X_{eq} \text{ para } r = R \text{ e } t > 0 \quad (4)$$

Modelo de Hsu:

$$X = (1 - e^{-\beta t})X_{eq} + X_0 e^{-\beta t} \text{ para } r = R \text{ e } t > 0 \quad (5)$$

Os modelos foram resolvidos pelo comando “ode23s” do MATLAB por se tratarem de problemas do tipo “stiff”. O ajuste dos parâmetros foi feito a partir da minimização da função objetivo pelo comando “fminsearch” do MATLAB. A função objetivo é mostrada a seguir.

$$\phi^2 = \sum_{i=1}^{N+2} (X_{calc}^i - X_{exp}^i)^2 \quad (6)$$

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Tabela 1 mostra os parâmetros obtidos no ajuste dos modelos e a Tabela 2 mostra os resíduos quadráticos provenientes da minimização da função objetivo para cada modelo em várias temperaturas.

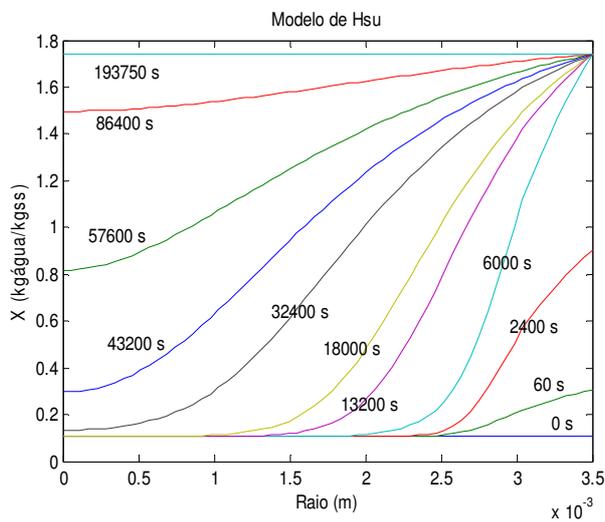
**Tabela 1:** Parâmetros ajustados

T (°C)	Modelo PDX <sub>eq</sub>		HSU		
	k <sub>1</sub> (kg/kg)	D <sub>o</sub> .10 <sup>11</sup> (m <sup>2</sup> /s)	k <sub>1</sub> (kg/kg)	β.10 <sup>3</sup> (1/s)	D <sub>o</sub> .10 <sup>11</sup> (m <sup>2</sup> /s)
10	0,693	1,334	0,998	5,121	1,006
30	0,272	6,292	0,778	3,810	3,642
50	0,042	20,716	0,464	8,813	13,182

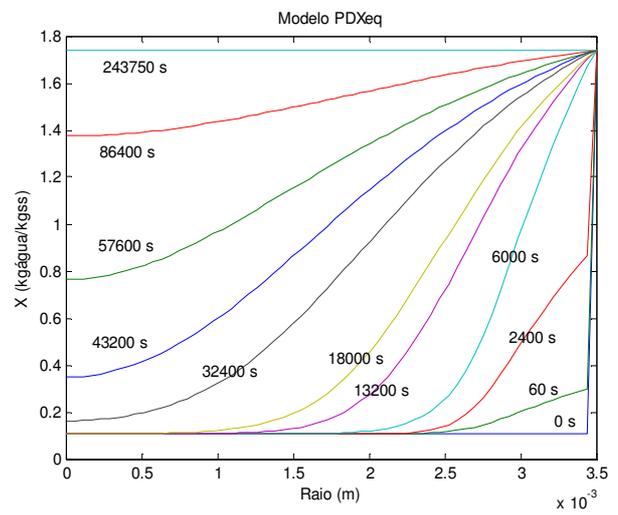
**Tabela 2:** Resíduos quadráticos

HSU		Modelo PDX <sub>eq</sub>	
T (°C)	φ <sup>2</sup> médio	T (°C)	φ <sup>2</sup> médio
10	0,0025	10	0,0014
30	0,0078	30	0,0054
50	0,0122	50	0,0089

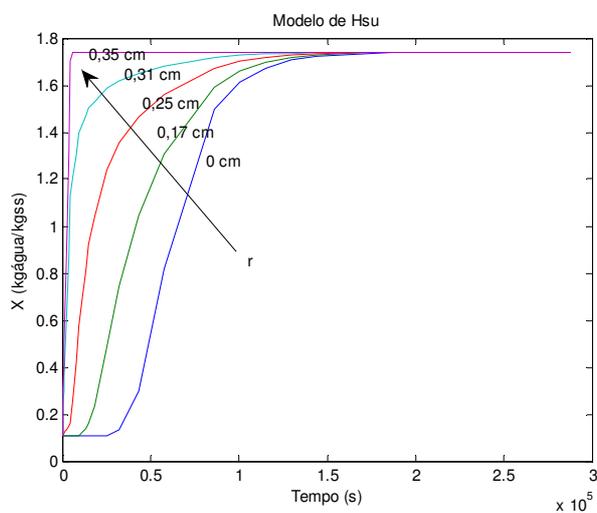
As Figuras 1 e 2 mostram os perfis de umidade em função do raio para vários valores de tempo. As Figuras 3 e 4 mostram os perfis de umidade em função do tempo para várias posições. Todas mostram perfis para a temperatura de 10°C.



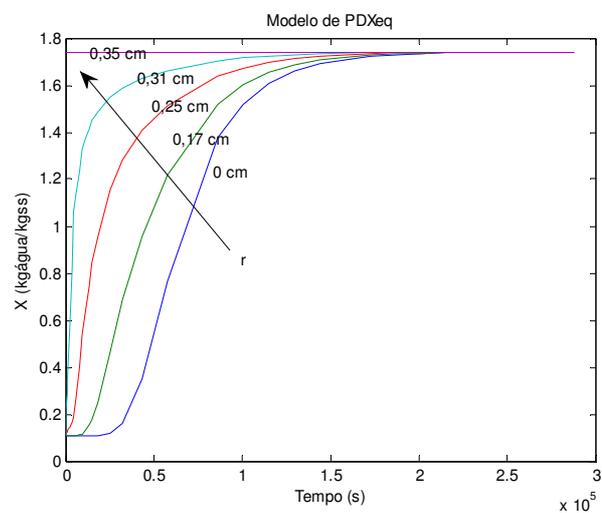
**Figura 1:** Perfis de umidade em função do raio para vários valores de tempo – Modelo de Hsu.



**Figura 2:** Perfis de umidade em função do raio para vários valores de tempo – Modelo  $PDX_{eq}$ .



**Figura 3:** Perfis de umidade em função do tempo para várias posições – Modelo de Hsu



**Figura 4:** Perfis de umidade em função do tempo para várias posições – Modelo  $PDX_{eq}$ .

O fato de o modelo  $PDX_{eq}$  conduzir a menores valores dos resíduos quadráticos com um parâmetro ajustável a menos sugere que o modelo tem uma capacidade de predição maior que o modelo de HSU. As Figuras 1 e 2 mostram a variação da umidade do grão em função do raio para vários valores de tempo. Analisando-as, pode-se observar que o grão de soja atinge a umidade de equilíbrio depois de 193750 s no modelo de HSU, enquanto no  $PDX_{eq}$ , o grão leva 243750 s para que este valor de umidade seja alcançado. Logo, o modelo  $PDX_{eq}$  apresenta um tempo para alcançar a umidade de equilíbrio 25,80% maior do que o modelo de HSU. Esta tendência manteve-se para todas as temperaturas de hidratação.

As duas diferentes condições de contorno ficam nítidas ao se observar as Figuras 7 e 8 para  $r = 0,35$  cm. Embora estas condições representem situações diferentes na superfície do grão de soja, a simulação dos perfis como um todo praticamente não se alteram. Analisando-se as curvas restantes das Figuras 7 e 8, observa-se uma considerável similaridade entre os perfis.

## 4 CONCLUSÃO

Comparando-se os dois modelos pode-se concluir que o modelo  $PDX_{eq}$  representou melhor a realidade do fenômeno ao se analisar os resíduos quadráticos médios que representam o desvio entre dados calculados pelo modelo e dados obtidos experimentalmente. Isoladamente, para cada temperatura, o modelo  $PDX_{eq}$  apresentou menores valores de  $\varphi^2_{\text{médio}}$  do que o modelo de HSU. Para que todo o grão de soja atingisse a 99% do valor da umidade de equilíbrio  $X_{eq}$  na temperatura de 10°C, o modelo  $PDX_{eq}$  estimou que fossem necessários 243750 s, enquanto que o modelo de HSU forneceu um tempo de 193750 s, 25,80% menor do que o modelo  $PDX_{eq}$ . Por mais que as condições de contorno dos modelos de  $PDX_{eq}$  e Hsu representassem situações diferentes ocorrendo na superfície do grão de soja, os resultados obtidos por simulação são similares.

## REFERÊNCIAS

ADOLF LUTZ, Normas Analíticas do Instituto Adolf Lutz, v. 1, 3ª ed., São Paulo: O Instituto, 1985.

COUTINHO, M. R.; OMOTO, E. S.; PARAÍSO, P. R.; ANDRADE, C. M. G.; JORGE, L. M. M. "Modelagem da Hidratação de Grãos de Soja Segundo a Abordagem de Parâmetros Distribuídos". XVI COBEQ, Santos, SP, 2006a.

COUTINHO, M. R. Modelagem, Simulação e Análise de Hidratação de Grãos de Soja. 2006, 220f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Estadual de Maringá, Maringá, PR. 2006b.

COUTINHO, M. R.; OMOTO, E. S.; CONCEIÇÃO, W. A. S.; ANDRADE, C. M. G.; JORGE, L. M. M. Modeling of the Soybean Grains Hydration by a Distributed Parameters Approach. International Journal of Food Engineering, vol. 5, iss. 3, art. 11, 2009.

COUTINHO, M. R.; OMOTO, E. S.; CONCEIÇÃO, W. A. S.; ANDRADE, C. M. G.; JORGE, L. M. M. Evaluation of Two Mathematical Models Applied to Soybean Hydration. International Journal of Food Engineering, vol. 6, iss. 6, art. 7, 2010.

HSU, K. H. A Diffusion Model with a Concentration-Dependent Diffusion for Describing Water Movement in Legumes During Soaking. Journal of Food Science, v. 48, p. 618 – 622 e 645, 1983.

OMOTO, E. S.; ANDRADE, C. M. G.; JORGE, R. M. M.; COUTINHO, M. R.; PARAÍSO, P. R.; JORGE, L. M. M. Modelagem Matemática e Análise da Hidratação de Grãos de Ervilha. Ciênc. Tecnol. Aliment., Campinas, 29(1): 12 – 18, jan-mar. 2009.