



ESTIMATIVA DE PARÂMETROS EM MODELOS DE SECAGEM EMPREGANDO O MÉTODO DE MONTE CARLO VIA CADEIAS DE MARKOV

MAILSON B. de VILHENA^{1*}, CAMILA S. DIAS¹, CARLOS HENRIQUE R. de MOURA¹,
BERILO C. de MATOS JUNIOR¹, JOSIEL L. FERREIRA³, BRUNO M. VIEGAS²

¹Universidade Federal do Pará, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Naturais da Amazônia (PRODERNA)

² Universidade Federal do Pará, Faculdade de Biotecnologia/Engenharia de Bioprocessos

³ Universidade Federal do Pará, Faculdade de Engenharia Química

*e-mail: mailson.vilhena@abaetetuba.ufpa.br

RESUMO – O conhecimento da cinética de secagem pode trazer grandes benefícios quando se trata de conservação de alimentos, que está diretamente ligado a redução de sua deterioração. Neste sentido, o conhecimento teórico sobre o comportamento de determinado produto através de simulação por meio de modelagem matemática torna-se necessária. Sendo assim, este trabalho teve como objetivo a estimativa de parâmetros de modelos de curva de secagem por meio do método de Monte Carlo com Cadeias de Markov utilizando o algoritmo de Metropolis-Hastings. A informação a priori dos parâmetros foi inserida como uma distribuição de probabilidade uniforme e foi atribuído às medidas experimentais, obtidas da literatura, uma incerteza de 5%. Como forma de comparar a qualidade dos ajustes, foram utilizadas as seguintes métricas: Coeficiente de determinação, coeficiente de determinação ajustado, Akaike, Akaike corrigido e Critério Bayesiano de Schwarz. De modo geral, as estimativas apresentaram coerência em relação aos dados experimentais, no entanto menores valores obtidos para as métricas bayesianas indicaram o modelo de Midili Modificado como o mais adequado para representar os dados experimentais.

INTRODUÇÃO

O processo de secagem é muito utilizado na conservação de alimentos, principalmente na indústria de frutos (Lins *et al.*, 2021). Ele consiste basicamente no transporte de água do interior do produto até sua superfície por meio de processos que envolvem diferentes mecanismos de transferência de calor e massa (Sousa *et al.*, 2014; Keneni *et al.*, 2019; Sousa *et al.*, 2020). O objetivo do processo consiste na remoção de água no sólido para um nível no qual a deterioração microbiana e a deterioração resultantes de reações químicas são significativamente reduzidas (Mphahlele *et al.*, 2019).

A cinética de secagem é influenciada pelas particularidades intrínsecas, bem como pela umidade relativa do ar, velocidade e

temperatura. Neste sentido torna-se necessária a obtenção de informações teóricas sobre o comportamento de cada produto durante a secagem. Tais informações podem ser obtidas através de simulação de secagem, utilizando modelos matemáticos para descrever o processo de perda de água (Gomes *et al.*, 2019; Souza *et al.*, 2020).

Este trabalho teve como objetivo estimar os parâmetros de alguns modelos de secagem utilizando abordagem Bayesiana que tem sido frequentemente utilizada como ferramenta na estimativa de parâmetros. O método utilizado foi o de Monte Carlo via Cadeias de Markov no qual se estuda uma coleção de variáveis aleatórias sob o ponto de vista de suas interdependências e de seu comportamento limite. Sua implementação se deu com auxílio do algoritmo de Metropolis-

Hastings que gera um valor com base em uma distribuição auxiliar e o aceita ou não com uma dada probabilidade.

MODELO DIRETO

Os modelos diretos apresentados neste trabalho são equações que descrevem o processo de secagem com base na perda de massa em função do tempo utilizadas com frequência na predição de curvas de secagem. Há diversas propostas de modelos de secagem, no entanto, optou-se em estimar os parâmetros e comparar oito deles. Na Tabela 1 são apresentados oito modelos de secagem que foram utilizados neste trabalho.

Para predição da curva de secagem e estimativa de parâmetros é necessário se ter alguma informação a respeito da *priori* de cada modelo. Na Tabela 2 são apresentados os valores que foram utilizados como informação a priori dos parâmetros retirados dos trabalhos de Araújo *et al.*, 2017, Keneni *et al.*, 2019 e Mphahlele *et al.*, 2019 e os pontos experimentais foram extraídos do estudo da cinética de secagem de acerolas em leito de espuma (Araújo *et al.*, 2017).

A secagem em leito de espuma é um sistema de desidratação pela qual alimentos líquidos ou semilíquidos são transformados em uma espuma estável pela adição de agentes espumantes e aeração. Tal método destaca-se pela fácil reconstituição em água da polpa transformada em pó, alta relação massa/volume possibilidade de formulação com outros produtos e redução de custos com espaço de armazenamento (Araújo *et al.*, 2017).

PROBLEMA INVERSO

Problemas inversos fazem uso de medidas experimentais para o conhecimento de propriedades físico-químicas que auxiliam na análise de problemas físicos em vários campos de estudo. A solução de problemas inversos geralmente envolve estimativa de parâmetros e/ou funções. Pela ótica da inferência Bayesiana, a formulação do problema inverso envolve a informação a *priori* $\pi(\mathbf{P})$ dos parâmetros e a modelagem das informações contidas nas observações experimentais por meio de uma função de verossimilhança $\pi(\mathbf{Y} | \mathbf{P})$. Esta abordagem estatística é baseada nos seguintes princípios: (i) todos os parâmetros do modelo são modelados como variáveis aleatórias; (ii) a aleatoriedade descreve o nível de informação a *priori*; (iii) o nível de informação a priori deve ser modelado dentro de uma distribuição de probabilidades; (iv) a solução do problema inverso é a distribuição a *posteriori* $\pi(\mathbf{P}|\mathbf{Y})$. desta forma todas as informações a *priori* sobre os parâmetros do modelo podem ser incorporados na formulação do problema inverso (Silva *et al.*, 2014; Dias *et al.*, 2020). O teorema de Bayes em problemas inversos representado pela Equação 1 pode ser expresso da seguinte forma:

$$\pi(P|Y) \propto \pi(P)\pi(Y|P) \quad (1)$$

Tabela 1: Modelos para curva de secagem.

Modelo	Equação	Referência
Page	$RU = e^{(-kt^n)}$	(Page, 1949)
Henderson Pabis	$RU = ae^{(-kt)}$	(Henderson-Pabis, 1961)
Lewis	$RU = e^{(-kt)}$	(Robert <i>et al.</i> , 2008)
Logaritmo	$RU = ae^{(-kt)} + b$	(Chandra & Singh, 1995)
Midili Modificado	$RU = e^{(-kt^n)} + bt$	(Ghazanfari et al., 2006)
Aproximação da Difusão	$RU = ae^{(-kt)} + (1 - a)e^{(-kbt)}$	(Kassem, 1998)
Dois Termos	$RU = ae^{(-kt)} + be^{(-ct)}$	(Henderson, 1974)
Verma	$RU = ae^{(-kt)} + (1 - a)e^{(-bt)}$	(Verma et al., 1985)

Tabela 2: Parâmetros utilizados como priori para estimativa.

Modelo	Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
Page	k	0,5	n	1	-	-	-	-
Henderson-Pabis	k	0,6	a	1	-	-	-	-
Lewis	k	0,3	-	-	-	-	-	-
Logaritmo	k	0,5	a	0,8	b	0,1	-	-
Midili								
Modificado	k	0,5	c	0,7	b	0,02	-	-
Aprox. da								
Difusão	k	0,09	a	0,2	b	3	-	-
Dois Termos	k	0,3	a	0,7	b	0,08	c	0,2
Verma	k	0,3	a	0,7	b	0,09	-	-

em que $\pi(\mathbf{P}|\mathbf{Y})$ é a densidade de probabilidade a posteriori, $\pi(\mathbf{P})$ é a densidade a priori e $\pi(\mathbf{P}|\mathbf{Y})$ é a função de verossimilhança.

MONTE CARLO VIA CADEIAS DE MARKOV (MCMC)

Técnicas de amostragens são muito utilizadas quando a distribuição a *posteriori* não pode ser obtida através de expressões analítica ou simulação numérica (Teixeira *et al.*, 2015).

Neste caso, o método de Monte Carlo com Cadeia de Markov utiliza um processo de amostragem para obter informações sobre a densidade de probabilidade de uma *posteriori* (Moura *et al.*, 2021). O método é um processo estocástico no qual cada parâmetro (P_i) simulado, dados os valores anteriores P_0, \dots, P_{i-1} , depende apenas de seu antecessor P_{i-1} (Dias *et al.*, 2020).

Um dos algoritmos mais utilizados para implementar o MCMC é o Metropolis-Hastings que utiliza uma distribuição proposta para gerar um vetor de parâmetros candidatos, \mathbf{P}^* . Estes parâmetros serão aceitos ou não de acordo com a probabilidade dada pela razão de Hastings (α) como mostra a Equação 2 (Metropolis *et al.*, 1953; Hastings, 1970; Dias *et al.*, 2020).

$$\alpha(P^{i-1}, P^*) = \min \left[1, \frac{\pi(P^*|Y)q(P^{i-1}|P^*)}{\pi(P^{i-1}|Y)q(P^*|P^{i-1})} \right] \quad (2)$$

Em termos práticos o algoritmo de Metropolis-Hasting pode ser especificado pelos

seguintes passos (Estumano *et al.*, 2014, Pasqualetto *et al.*, 2017; Oliveira *et al.*, 2019; Dias *et al.*, 2020; Moura *et al.*, 2021; Nunes *et al.*, 2021):

- 1 – Na primeira iteração ($i = 1$) especificar um valor inicial para \mathbf{P} (\mathbf{P}^0);
- 2 – Gerar um novo valor \mathbf{P}^* a partir de uma distribuição $q(\mathbf{P}^*|\mathbf{P}^{i-1})$;
- 3 – Calcular a probabilidade de aceitação $\alpha(\mathbf{P}^{i-1}|\mathbf{P}^*)$ dada pela Equação (2);
- 4 – Se $u \leq \alpha$ então aceita-se o novo valor e faça $\mathbf{P}^{i-1} = \mathbf{P}^*$, caso contrário descartar o valor;
- 5 – Incremente o contador i para $i + 1$ e retorne ao passo 2.

RESULTADOS

As estimativas dos parâmetros para o ajuste dos modelos foram realizadas com base nos dados experimentais gerados no processo de secagem de acerola em leito de espuma a uma temperatura de 55 °C (Araújo *et al.*, 2017).

A figura 1 mostra as comparações entre as razões de umidade estimadas e experimentais para todos os modelos. Os resultados das estimativas de parâmetros são apresentados na Tabela 3.

Como forma de comparar a qualidade dos ajustes, a Tabela 4 apresenta algumas métricas como: Coeficiente de determinação (R^2), coeficiente de determinação ajustado (R^2_{ajud}), Critério de Informação de Akaike (AIC), Akaike corrigido (AIC_C) e Critério Bayesiano de Schwarz (BIC).

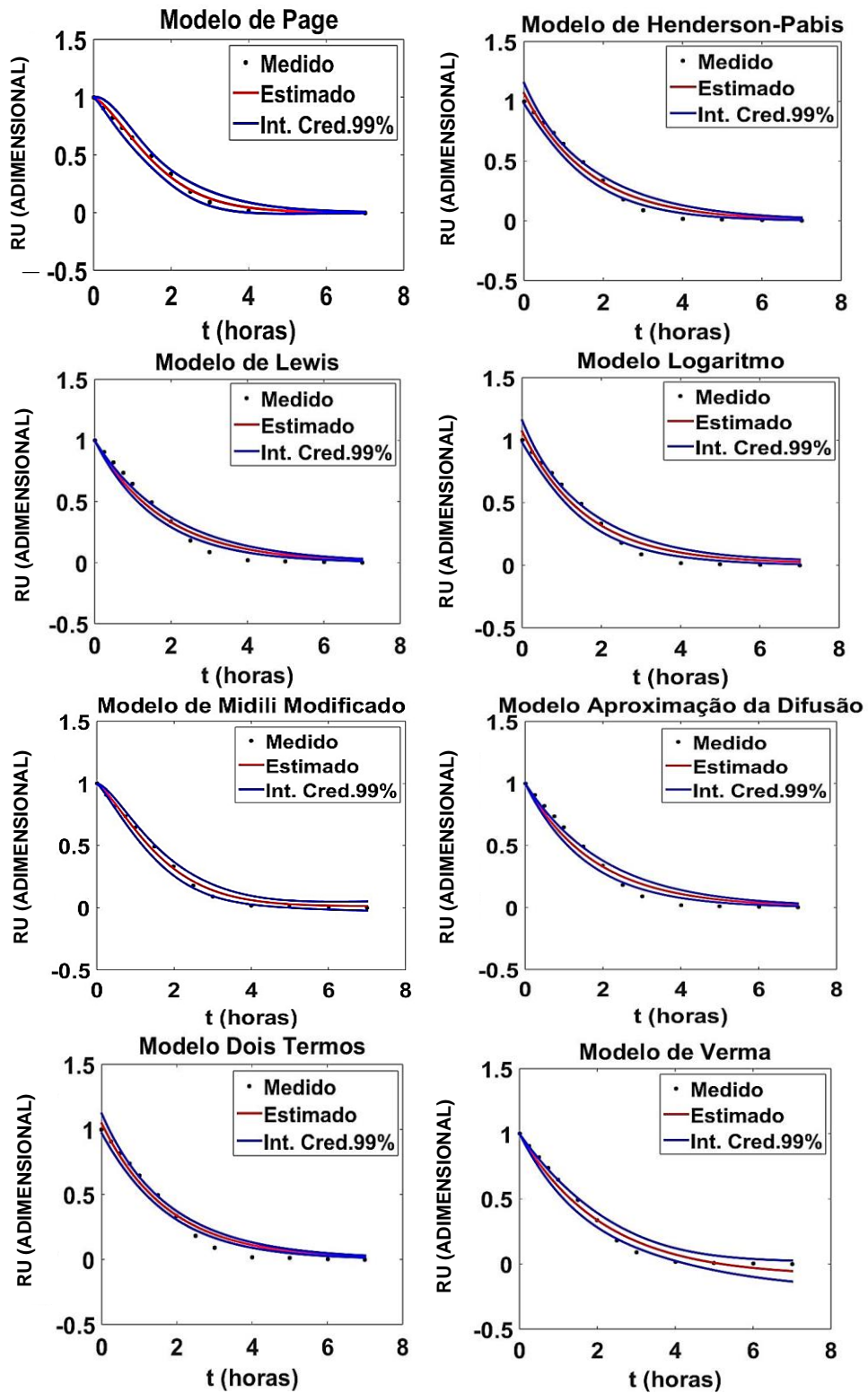


Figura 1: Ajustes dos modelos com intervalo de credibilidade de 99%.

Tabela 3: Parâmetros estimados com intervalo de credibilidade.

Modelo	Parâmetros de Partida		Estimados	Intervalo de Credibilidade	
				Limite Inferior	Limite Superior
Modelo de Page	k	0,5	0,4431	0,3410	0,5559
	n	1	1,4239	1,1288	1,7829
Modelo de Henderson-Pabis	k	0,6	0,6063	0,5152	0,7166
	a	1	1,0678	0,9843	1,1594
Modelo de Lewis	k	0,3	0,5547	0,4899	0,5985
Modelo Logaritmo	k	0,5	0,6097	0,5134	0,7068
	a	0,8	1,0659	0,9746	1,1530
	b	0,1	0,0037	0,0001	0,0237
Modelo de Midili Modificado	k	0,50	0,4791	0,4046	0,5825
	c	0,70	1,3099	1,1198	1,3989
	b	0,02	0,0012	0,0001	0,0063
Modelo Aproximação da Difusão	k	0,09	0,1286	0,0881	0,1785
	a	0,2	0,0038	0,000014	0,0641
	b	3	4,5427	3,0290	5,9774
Modelo Dois Termos	k	0,3	0,5716	0,5137	0,5996
	a	0,7	1,0407	0,9499	1,1241
	b	0,08	0,0070	0,0002	0,0675
	c	0,2	0,0742	0,0027	0,3741
Modelo de Verma	k	0,3	0,4461	0,3536	0,5614
	a	0,7	1,1692	1,0162	1,3889
	b	0,09	0,0562	0,0043	0,1754

Tabela 4: Métricas de ajustes dos modelos.

Métricas	Modelo							
	Page	Henderson Pabis	Lewis	Logaritmo	Midili Modificado	Aprox. da Difusão	Dois Termos	Verma
R^2	0,9964	0,9801	0,9742	0,9799	0,9945	0,9732	0,9768	0,9839
R^2_{ajtd}	0,9956	0,9761	0,9719	0,9732	0,9927	0,9643	0,9652	0,9785
AIC	8,5125	3,0918	5,3721	5,1996	-5,2012	10,1113	9,4602	2,3243
AIC _C	7,3125	4,2918	5,7357	7,8662	-2,5345	12,7780	14,4602	4,9910
BIC	7,3826	4,2217	5,9370	6,8944	-3,5063	11,8062	11,7200	4,0191

As estimativas apresentadas na Figura 1 foram obtidas em um cenário em que a informação a priori dos parâmetros foi considerada como uma distribuição de probabilidade uniforme. Foi atribuído às medidas experimentais, obtidas da literatura,

uma incerteza de 5% e o número de estados da cadeia de Markov foi de 20.000.

De modo geral, as estimativas apresentaram coerência em relação aos dados experimentais, estando compreendidas dentro de um intervalo de credibilidade de 99%.

As razões de umidade estimadas foram obtidas utilizando os parâmetros estimados, por meio da média da distribuição de probabilidade *a posteriori*. É observado que as razões de umidade estimadas e experimental apresentaram boa concordância nos perfis, mostrando que todos os modelos são capazes de reproduzir estes dados experimentais.

A partir dos parâmetros estimados, a qualidade do ajuste obtido de um modelo em relação ao outro pode ser observada a partir dos valores obtidos pelas métricas bayesianas assim como o coeficiente de correlação conforme apresentado na Tabela 4.

Os valores obtidos para os coeficientes de determinação, apresentaram valores próximos à unidade, sendo $R^2 = 0,9964$ para o modelo de Page o maior observado e $R^2_{ajustado} = 0,9643$ para o modelo de Aproximação da Difusão menor.

Contudo é possível realizar uma análise mais criteriosa do ajuste por meio das métricas bayesianas, em que os modelos podem ser classificados do melhor ao pior com baseado nos dados empíricos disponíveis (Burnham, Anderson, 2004).

De acordo com os menores valores obtidos para as métricas bayesianas, o modelo mais adequado para representar os dados experimentais foi o de Midili Modificado. Esta constatação encontra-se coerente com o resultado gráfico das estimativas na Figura 1, em que tanto a curva da estimativa juntamente com os dados analisados, encontram-se dentro do intervalo de credibilidade de 99%.

O segundo melhor modelo foi o de Verma com os menores valores de AIC, AICc e BIC, seguido por Henderson Pabis. Nesse cenário, em que todos os modelos demonstraram boa tendência em descrever os dados experimentais, as métricas bayesianas foram úteis em indicar àquele que seria o melhor entre todos para o estudo da razão de umidade de morangos.

A Tabela 3 mostra o valor inicial adotado como referência e o estimado para os parâmetros, estes últimos ficaram todos compreendidos dentro do intervalo de credibilidade de 99%.

A coerência observada entre o perfil dos modelos em relação ao perfil obtido experimentalmente, demonstra que o valor

estimado para os parâmetros, apresentaram qualidade suficiente para que o modelo siga a tendência da física do problema.

É relevante destacar que o levantamento e validação de informações a respeito de parâmetros de modelos de razão de umidade, pode contribuir como informação a priori em trabalhos futuros na temática de secagem abordada no presente trabalho.

CONCLUSÃO

O processo de secagem é relevante na conservação de alimentos. Nesse sentido, buscar modelos capazes de representar a física desse problema se mostra vantajosa para antecipação de cenários e possível redução de custos.

A partir desta perspectiva, este trabalho utilizou oito modelos de razão de umidade e com o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov, estimou os parâmetros de cada um a fim de contribuir com informações a priori para trabalhos futuros na área. A validação dos modelos foi feita utilizando dados experimentais da literatura.

Os menores valores obtidos para as métricas bayesianas indicaram o modelo de Midili Modificado como o mais adequado para representar os dados experimentais.

NOMECLATURA

RU – Razão de umidade (adimensional)

t – tempo (h)

k – Coeficiente de secagem

n – Parâmetro de ajuste

a – Parâmetro de ajuste

b – Parâmetro de ajuste

P – Vetor de parâmetros

MCMC – Monte Carlo Via Cadeias de Markov

R^2 – Coeficiente de determinação

R^2_{ajtd} – Coeficiente de determinação ajustado

AIC – Akaike

AIC_C – Akaike corrigido

BIC - Critério Bayesiano de Schwarz

REFERÊNCIAS

ARAÚJO, C. da S.; MACEDO, L. L.; VIMERCAT, W. C; SARAIVA, S. H.; OLIVEIRA, A. do N.; TEIXEIRA, L. J.

- Q. (2017), Cinética de secagem de acerola em leite de espuma e ajuste de modelos, *Brazilian Journal of Food Technology*, v. 20. <http://dx.doi.org/10.1590/19816723.15216>
- BURNHAM, K. P., ANDERSON, D. R. (2004), Multimodel inference: understanding AIC and BIC in model selection. *Sociological methods & research*, v. 33, n. 2, p. 261-304.
- CHANDRA, P. K.; SINGH, R. P. (1995), *Applied numerical methods for food and agricultural engineers*. Boca Raton: CRC Press, 512 p.
- COELHO, B. E. S.; NASCIMENTO, M. M. de; SOUSA, K. dos S. M. de; COELHO, C. L.; MACHADO, N. S. (2020), Cinética de secagem e avaliação físico-química da goiaba desidratada em um protótipo de secador solar, *Nucleus*, v. 17, n. 2. DOI 10.3738/1982.2278.3749
- DIAS, C. S.; MATOS JUNIOR, B. C. de; VIEGAS, B. M.; RIBEIRO, N. F. da P.; MACÊDO, E. N.; ESTUMANO, D. C. (2020), Análise da influência do kernel de transição na estimativa de parâmetros em modelo aplicado ao processo de produção de etanol por *Saccharomyces cerevisiae*, *Brazilian Journal of Development*, v. 6, n. 6, p.34023-34042. DOI:10.34117/bjdv6n6-087
- GHAZANFARI, A.; EMAMI, S.; TABIL, L. G.; PANIGRAHI, S. (2006), Thin-layer drying of flax fiber: II. Modeling drying process using semi-theoretical and empirical models. *Drying Technology*, New York, v. 24, n. 12, p. 1637-1642. <http://dx.doi.org/10.1080/07373930601031463>
- GOMES, M. E. de M.; ALBUQUERQUE, A. P.; RODRIGUES, T. J. A.; WANDERLEY, D. M. A.; ROCHA, A. P. T.; SILVA, O. S. (2019), Predição de modelos de secagem de folhas da erva cidreira em secador, *Research, Society and Development*, v. 9, n. 2. DOI: <http://dx.doi.org/10.33448/rsd-v9i2.2052>
- HASTINGS, W. K. (1970), Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chain and Their Applications, *Biometrika*, v. 57, p.97-109.
- HENDERSON, S. M.; PABIS, S. (1961), Grain drying theory. I. Temperature effect on drying coefficient. *Journal of Agriculture Engineering Research*, v. 6, n. 3, p. 169-174.
- HENDERSON, S. M. (1974), Progress in developing the thin-layer drying equation. *Transactions of the ASAE. American Society of Agricultural*, St. Joseph, v. 17, n. 6, p. 1167-1168. <http://dx.doi.org/10.13031/2013.37052>
- KASSEM, A. S. (1998), Comparative studies on thin layer drying models for wheat. In: *International Congress On Agricultural Engineering*, 13., Rabat. *Proceedings...* Rabat:ANAFID, v. 6, p. 2-6.
- KENENI, Y. G.; HVOSLEF-EIDE, A. K. (Trine); MARCHETTI, J. M. (2019), Mathematical modelling of the drying kinetics of *Jatropha curcas* L. seeds, *Industrial Crops & Products*, v. 132, p. 12-20. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2019.02.012>
- LINS, B. V. P; FARIAS, F. P. M.; SILVA, D. R. S.; CANUTO, M. F. C.; MEIRA, A. C. S. (2021), Modelos de predição aplicados a cinética de secagem solar de goiaba, *Research, Society and Development*, v. 10, n. 11. DOI: <http://dx.doi.org/10.33448/rsd-v10i11.19761>
- METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; ROSENBLUTH, M. N.; TELLER, A. H.; TELLER, E. (1953), Equation of state calculation by fast computing machines, *J. Chem. Phys.*, v. 21, p.1087-1092.
- MPHAHLELE, R. R.; PATHARE, P. B.; OPARA, U. L. (2019), Drying kinetics of pomegranate fruit pell (cv. Wonderful), *Scientific African*, v. 5. <https://doi.org/10.1016/j.sciaf.2019.e00145>
- MOURA, C. H. R.; VIEGAS, B. M.; TAVARES, M. R. M.; MACÊDO, E. N.; ESTUMANO, D. C.; QUARESMA, J. N. N. (2021), Parameter estimation in population balance through Bayesian

technique Markov Chain Monte Carlo, Journal of Applied and Computational Mechanics, v. 7, n. 2. DOI: 10.22055/JACM.2021.35741.2725

Engineers, St. Joseph, v. 28, n. 1, p. 296-301.

<http://dx.doi.org/10.13031/2013.32245>

PAGE, G. E. (1949), Factors influencing the maximum of air drying shelled corn in thin layer. Dissertation (Master's Thesis)-Department of Mechanical Engineering, Purdue University, Purdue.

ROBERT, J. S.; KIDD, D. R.; PADILLA-ZAKOUR, O. (2008), Drying kinetics of grape seeds, Journal of Food Engineering, v. 89, p. 460-465. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2008.05.030>.

SOUSA, F. A. de; ANDRADE, E. T. de; FIGUEIRA, V. G.; D'ANDREA, E. de M.; CORRÊA FILHO, L. C. (2014), Estudo da cinética de secagem, contração volumétrica e análise da difusão líquida do morango (Frangaria SP.), ENGEVISTA, v. 1, p.8-18.

SOUSA, E. L.; SILVA, D. S.; SOUSA, A. M. B. de; ALVES, R. de A.; ABREU, V. K. G.; PEREIRA, A. L. F. (2020), Estudo do processo de secagem convectiva do pimentão (*Capsicum annuum L.*), Revista Desafios.

SILVA, L. G. da; KNUPP, D. C.; BEVILACQUA, L.; GALEÃO, A. C. N. R.; NETO, A. J. da S. (2014), Formulação e solução de um problema inverso de difusão anômala com técnicas estocásticas, Ciência e Natura, v. 36, p. 82-96.

TEIXEIRA, J. da S.; STUTZ, L. T.; KNUPP, D. C.; NETO, A. J. da S.; MESA, M. I.; SANTIAGO, O. L. (2015), Estimação de parâmetros cinéticos do modelo de transferência de massa da cromatografia em coluna empregando o método de Monte Carlo com Cadeia de Markov, Proceeding of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 3, n. 2. DOI: 10.5540/03.2015.003.02.0123

VERMA, L. R.; BUCKLIN, R. A.; ENDAN, J. B.; WRATTEN, F. T. (1985), Effects of drying air parameters on rice drying models. Transactions of the ASAE. American Society of Agricultural