

RESUMO - ENGENHARIAS - ENGENHARIA QUÍMICA

**ESTIMATIVA DE PARÂMETROS E DISCRIMINAÇÃO DE MODELOS
MATEMÁTICOS DE ISOTERMAS DE EQUILÍBRIO DE AMÊNDOAS DE
CACAU SUBMETIDAS À SECAGEM CONVECTIVA**

Sergio Henrique Gomes Da Silva Lima (sergiolima3000@gmail.com)

Maria Fernanda Leite Alcantara (maria.alcantara@ufrj.br)

Pedro Henrique De Souza Vargas (pedrovargas@ufrj.br)

Maurício Cordeiro Mancini (mancinimc@gmail.com)

Vinícius Barroso Soares (vinicius.b.soares@ufes.br)

As amêndoas de cacau apresentam relevância dentre os produtos de exportação, em 2024 as exportações de cacau em pó, manteiga e pasta de cacau ultrapassaram 45 mil toneladas, além de ser fonte de renda para muitos agricultores. Os métodos de secagem têm grande utilidade na preservação de grãos por longos períodos, uma vez que a presença de água promove atividade microbiana, levando à degradação do material. Desta forma, o conhecimento das isotermas de equilíbrio termodinâmico é fundamental para o projeto de secadores, a modelagem e a simulação destes equipamentos, visando prever o comportamento e garantir uma produção de qualidade. Esse estudo tem como objetivo discriminar o melhor modelo matemático para descrever as isotermas de equilíbrio das amêndoas de cacau quando submetidas à secagem convectiva nas temperaturas de 30 °C, 40 °C e 50 °C. As amostras de cacau passaram por uma série de etapas para determinar experimentalmente a atividade de água (a_w) e a umidade de equilíbrio (Y_{se})

nas respectivas temperaturas. Com os resultados experimentais obtidos a partir destes processos, foi realizada a estimativa de parâmetros de diversos modelos matemáticos e a discriminação daquele que melhor prevê a umidade de equilíbrio das amêndoas de cacau em condições de secagem convectiva. Nove modelos matemáticos foram avaliados, quais sejam: Halsey Original, Halsey Modificado I, Halsey Modificado II, Oswin Original, Oswin Modificado, Smith Original, Smith Modificado, Copace Original e Copace Modificado. O programa estatístico R foi utilizado para a estimativa dos parâmetros dos modelos avaliados e o cálculo de alguns dos critérios de discriminação aplicados nesta pesquisa. Diversas sub-rotinas de regressão não linear foram implementadas no programa R, uma para cada modelo, todas baseadas na rotina Nonlinear Least Squares – $nls()$, disponível na biblioteca de funções do programa R, que realiza a estimativa não linear de parâmetros pelo método de mínimos quadrados. Além dos parâmetros que melhor ajustam os modelos aos dados experimentais, as sub-rotinas também calculam os valores preditos da umidade de equilíbrio, o desvio relativo médio (DRM%) e o coeficiente de determinação (R^2), com opção de gerar os gráficos de valores preditos versus valores observados e de distribuição de resíduos para cada modelo avaliado. Para discriminar o modelo mais adequado, alguns indicadores devem ser levados em consideração, sendo eles a significância dos parâmetros, baixos valores de desvio relativo médio e maiores valores do coeficiente de determinação. Na discriminação dos modelos, observou-se que os modelos modificados, que levam em conta a dependência da temperatura na predição da umidade de equilíbrio, não tinham todos os parâmetros significativos, não podendo, portanto, ser aplicados como modelos de predição, sendo descartados com base neste primeiro critério de discriminação. Além disso, com essa informação, constatou-se que o comportamento do grão permanece o mesmo independente da temperatura, diferentemente de todos os outros produtos vegetais que o LSP - Laboratório de Sistemas Particulados da UFRRJ já estudou, como a maçã e larvas de mosca por exemplo. Para aqueles em que todos os parâmetros são significativos, os resultados obtidos foram: Halsey Original – DRM = 8,39 %, $R^2 = 0,9595$; Oswin Original – DRM = 7,06 %, $R^2 = 0,9718$; Smith Original – DRM = 6,08 %, $R^2 = 0,9779$; Copace Original – DRM = 6,70 %, $R^2 = 0,9771$, sendo o modelo Smith Original o que melhor descreve a isoterma das amêndoas de cacau. Desta forma, conclui-se que as amêndoas de cacau representam um caso excepcional, dentre os estudados no LSP/UFRRJ, pois não se observa influência da temperatura e que o modelo Smith Original pode ser utilizado como ferramenta para a predição da umidade

de equilíbrio das amêndoas de cacau, na faixa de condições experimentais avaliadas neste trabalho.

Palavras-chave: amêndoas de cacau; secagem convectiva; isothermas de equilíbrio; discriminação de modelos.