

# Avanços das Pesquisas e Inovações na Engenharia Química 2

Jéssica Verger Nardeli  
(Organizadora)

 **Atena**  
Editora  
Ano 2020

# Avanços das Pesquisas e Inovações na Engenharia Química 2

Jéssica Verger Nardeli  
(Organizadora)

Atena  
Editora  
Ano 2020

2020 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do Texto © 2020 Os autores

Copyright da Edição © 2020 Atena Editora

**Editora Chefe:** Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

**Diagramação:** Karine de Lima

**Edição de Arte:** Lorena Prestes

**Revisão:** Os Autores



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição *Creative Commons*. Atribuição 4.0 Internacional (CC BY 4.0).

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores. Permitido o download da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

### **Conselho Editorial**

#### **Ciências Humanas e Sociais Aplicadas**

Profª Drª Adriana Demite Stephani – Universidade Federal do Tocantins  
Prof. Dr. Álvaro Augusto de Borba Barreto – Universidade Federal de Pelotas  
Prof. Dr. Alexandre Jose Schumacher – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Mato Grosso  
Profª Drª Angeli Rose do Nascimento – Universidade Federal do Estado do Rio de Janeiro  
Prof. Dr. Antonio Carlos Frasson – Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Prof. Dr. Antonio Gasparetto Júnior – Instituto Federal do Sudeste de Minas Gerais  
Prof. Dr. Antonio Isidro-Filho – Universidade de Brasília  
Prof. Dr. Carlos Antonio de Souza Moraes – Universidade Federal Fluminense  
Prof. Dr. Constantino Ribeiro de Oliveira Junior – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Profª Drª Cristina Gaio – Universidade de Lisboa  
Profª Drª Denise Rocha – Universidade Federal do Ceará  
Prof. Dr. Deyvison de Lima Oliveira – Universidade Federal de Rondônia  
Prof. Dr. Edvaldo Antunes de Farias – Universidade Estácio de Sá  
Prof. Dr. Eloi Martins Senhora – Universidade Federal de Roraima  
Prof. Dr. Fabiano Tadeu Grazioli – Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões  
Prof. Dr. Gilmei Fleck – Universidade Estadual do Oeste do Paraná  
Profª Drª Ivone Goulart Lopes – Istituto Internazionale delle Figlie di Maria Ausiliatrice  
Prof. Dr. Julio Candido de Meirelles Junior – Universidade Federal Fluminense  
Profª Drª Keyla Christina Almeida Portela – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Mato Grosso  
Profª Drª Lina Maria Gonçalves – Universidade Federal do Tocantins  
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Marcelo Pereira da Silva – Universidade Federal do Maranhão  
Profª Drª Miranilde Oliveira Neves – Instituto de Educação, Ciência e Tecnologia do Pará  
Profª Drª Paola Andressa Scortegagna – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Profª Drª Rita de Cássia da Silva Oliveira – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Profª Drª Sandra Regina Gardacho Pietrobon – Universidade Estadual do Centro-Oeste  
Profª Drª Sheila Marta Carregosa Rocha – Universidade do Estado da Bahia  
Prof. Dr. Rui Maia Diamantino – Universidade Salvador  
Prof. Dr. Urandi João Rodrigues Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará  
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande  
Prof. Dr. William Cleber Domingues Silva – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro  
Prof. Dr. Willian Douglas Guilherme – Universidade Federal do Tocantins

#### **Ciências Agrárias e Multidisciplinar**

Prof. Dr. Alexandre Igor Azevedo Pereira – Instituto Federal Goiano  
Prof. Dr. Antonio Pasqualetto – Pontifícia Universidade Católica de Goiás  
Profª Drª Daiane Garabeli Trojan – Universidade Norte do Paraná

Profª Drª Diocléa Almeida Seabra Silva – Universidade Federal Rural da Amazônia  
Prof. Dr. Écio Souza Diniz – Universidade Federal de Viçosa  
Prof. Dr. Fábio Steiner – Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul  
Prof. Dr. Fágner Cavalcante Patrocínio dos Santos – Universidade Federal do Ceará  
Profª Drª Girlene Santos de Souza – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia  
Prof. Dr. Júlio César Ribeiro – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro  
Profª Drª Lina Raquel Santos Araújo – Universidade Estadual do Ceará  
Prof. Dr. Pedro Manuel Villa – Universidade Federal de Viçosa  
Profª Drª Raissa Rachel Salustriano da Silva Matos – Universidade Federal do Maranhão  
Prof. Dr. Ronilson Freitas de Souza – Universidade do Estado do Pará  
Profª Drª Talita de Santos Matos – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro  
Prof. Dr. Tiago da Silva Teófilo – Universidade Federal Rural do Semi-Árido  
Prof. Dr. Valdemar Antonio Paffaro Junior – Universidade Federal de Alfenas

### **Ciências Biológicas e da Saúde**

Prof. Dr. André Ribeiro da Silva – Universidade de Brasília  
Profª Drª Anelise Levay Murari – Universidade Federal de Pelotas  
Prof. Dr. Benedito Rodrigues da Silva Neto – Universidade Federal de Goiás  
Prof. Dr. Edson da Silva – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri  
Profª Drª Eleuza Rodrigues Machado – Faculdade Anhanguera de Brasília  
Profª Drª Elane Schwinden Prudêncio – Universidade Federal de Santa Catarina  
Prof. Dr. Ferlando Lima Santos – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia  
Prof. Dr. Fernando José Guedes da Silva Júnior – Universidade Federal do Piauí  
Profª Drª Gabriela Vieira do Amaral – Universidade de Vassouras  
Prof. Dr. Gianfábio Pimentel Franco – Universidade Federal de Santa Maria  
Profª Drª Iara Lúcia Tescarollo – Universidade São Francisco  
Prof. Dr. Igor Luiz Vieira de Lima Santos – Universidade Federal de Campina Grande  
Prof. Dr. José Max Barbosa de Oliveira Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará  
Profª Drª Magnólia de Araújo Campos – Universidade Federal de Campina Grande  
Profª Drª Mylena Andréa Oliveira Torres – Universidade Ceuma  
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federaci do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Paulo Inada – Universidade Estadual de Maringá  
Profª Drª Renata Mendes de Freitas – Universidade Federal de Juiz de Fora  
Profª Drª Vanessa Lima Gonçalves – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande

### **Ciências Exatas e da Terra e Engenharias**

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado – Universidade do Porto  
Prof. Dr. Alexandre Leite dos Santos Silva – Universidade Federal do Piauí  
Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade – Universidade Federal de Goiás  
Profª Drª Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná  
Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos – Instituto Federal do Pará  
Prof. Dr. Juliano Carlo Rufino de Freitas – Universidade Federal de Campina Grande  
Profª Drª Luciana do Nascimento Mendes – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Marcelo Marques – Universidade Estadual de Maringá  
Profª Drª Neiva Maria de Almeida – Universidade Federal da Paraíba  
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista

### **Conselho Técnico Científico**

Prof. Me. Abrãao Carvalho Nogueira – Universidade Federal do Espírito Santo  
Prof. Me. Adalberto Zorzo – Centro Estadual de Educação Tecnológica Paula Souza  
Prof. Dr. Adaylson Wagner Sousa de Vasconcelos – Ordem dos Advogados do Brasil/Seccional Paraíba  
Prof. Me. André Flávio Gonçalves Silva – Universidade Federal do Maranhão

Profª Drª Andreza Lopes – Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento Acadêmico  
 Profª Drª Andrezza Miguel da Silva – Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia  
 Prof. Dr. Antonio Hot Pereira de Faria – Polícia Militar de Minas Gerais  
 Profª Ma. Bianca Camargo Martins – UniCesumar  
 Profª Ma. Carolina Shimomura Nanya – Universidade Federal de São Carlos  
 Prof. Me. Carlos Antônio dos Santos – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro  
 Prof. Ma. Cláudia de Araújo Marques – Faculdade de Música do Espírito Santo  
 Prof. Me. Daniel da Silva Miranda – Universidade Federal do Pará  
 Profª Ma. Dayane de Melo Barros – Universidade Federal de Pernambuco  
 Prof. Me. Douglas Santos Mezacas -Universidade Estadual de Goiás  
 Prof. Dr. Edwaldo Costa – Marinha do Brasil  
 Prof. Me. Eliel Constantino da Silva – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita  
 Profª Ma. Fabiana Coelho Couto Rocha Corrêa – Centro Universitário Estácio Juiz de Fora  
 Prof. Me. Felipe da Costa Negrão – Universidade Federal do Amazonas  
 Profª Drª Germana Ponce de Leon Ramírez – Centro Universitário Adventista de São Paulo  
 Prof. Me. Gevair Campos – Instituto Mineiro de Agropecuária  
 Prof. Me. Guilherme Renato Gomes – Universidade Norte do Paraná  
 Profª Ma. Jaqueline Oliveira Rezende – Universidade Federal de Uberlândia  
 Prof. Me. Javier Antonio Albornoz – University of Miami and Miami Dade College  
 Profª Ma. Jéssica Verger Nardeli – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho  
 Prof. Me. José Luiz Leonardo de Araujo Pimenta – Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria Uruguay  
 Prof. Me. José Messias Ribeiro Júnior – Instituto Federal de Educação Tecnológica de Pernambuco  
 Profª Ma. Juliana Thaisa Rodrigues Pacheco – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
 Prof. Me. Leonardo Tullio – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
 Profª Ma. Lilian Coelho de Freitas – Instituto Federal do Pará  
 Profª Ma. Liliani Aparecida Sereno Fontes de Medeiros – Consórcio CEDERJ  
 Profª Drª Lívia do Carmo Silva – Universidade Federal de Goiás  
 Prof. Me. Luis Henrique Almeida Castro – Universidade Federal da Grande Dourados  
 Prof. Dr. Luan Vinicius Bernardelli – Universidade Estadual de Maringá  
 Profª Ma. Marileila Marques Toledo – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri  
 Prof. Me. Rafael Henrique Silva – Hospital Universitário da Universidade Federal da Grande Dourados  
 Profª Ma. Renata Luciane Polsaque Young Blood – UniSecal  
 Profª Ma. Solange Aparecida de Souza Monteiro – Instituto Federal de São Paulo  
 Prof. Me. Tallys Newton Fernandes de Matos – Faculdade Regional Jaguaribana  
 Prof. Dr. Welleson Feitosa Gazel – Universidade Paulista

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
(eDOC BRASIL, Belo Horizonte/MG)**

A946 Avanços das pesquisas e inovações na engenharia química 2  
[recurso eletrônico] / Organizadora Jéssica Verger Nardeli. –  
Ponta Grossa, PR: Atena, 2020.

Formato: PDF  
 Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader.  
 Modo de acesso: World Wide Web.  
 Inclui bibliografia  
 ISBN 978-65-86002-51-5  
 DOI 10.22533/at.ed.515202403

1. Engenharia química – Pesquisa – Brasil. I. Nardeli, Jéssica Verger.

CDD 660.76

**Elaborado por Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422**

Atena Editora  
 Ponta Grossa – Paraná - Brasil  
[www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)  
[contato@atenaeditora.com.br](mailto:contato@atenaeditora.com.br)

## APRESENTAÇÃO

A coleção “Avanços das Pesquisas e Inovações na Engenharia Química volume 2” é uma obra que tem como foco principal a discussão e divulgação científica por meio de trabalhos com diferentes funcionalidades que compõe seus capítulos. O volume abordará em especial trabalhos que contribuem a nível educacional e aplicado tanto na área de engenharia química, química e tecnologias.

O objetivo central foi apresentar de forma categorizada e clara estudos correlacionados a energias renováveis, aproveitamento de resíduo agroindustrial, desenvolvimento de simulador de processos, simulação de custos de produção, e em especial estudos correlacionados a nível educacional por meio de jogos didáticos, quiz educativo com foco na aprendizagem de reações químicas e tabela periódica. Em todos esses trabalhos a linha condutora foi o aspecto relacionado à aproveitamento de resíduos, disseminação de conhecimento, otimização de procedimentos e metodologias, dentre outras abordagens importantes na área de exatas e engenharia. O avanço das pesquisas e divulgação dos resultados tem sido um fator importante para o desenvolvimento da ciência e estímulo de inovação.

Temas diversos e interessantes são, deste modo, discutidos aqui com a proposta de fundamentar o conhecimento de acadêmicos, mestres e todos aqueles que de alguma forma se interessam pela área de exatas e engenharia química aplicada e educacional. Possuir um material que demonstre evolução de diferentes metodologias, abordagens, otimização de processos, caracterização com técnicas substanciais, reutilização de resíduos de regiões específicas do país é muito relevante, assim como abordar temas atuais e de interesse tanto no meio acadêmico como social.

Deste modo a obra “Avanços das Pesquisas e Inovações na Engenharia Química volume 2” apresenta estudos fundamentados nos resultados práticos obtidos pelos diversos professores e acadêmicos que arduamente desenvolveram seus trabalhos que aqui serão apresentados de maneira concisa e didática. Sabemos o quão importante é a divulgação científica, por isso evidenciamos também a estrutura da Atena Editora capaz de oferecer uma plataforma consolidada e confiável para estes pesquisadores explorarem e divulgarem seus resultados.

Jéssica Verger Nardeli

## SUMÁRIO

<b>CAPÍTULO 1</b> .....	<b>1</b>
EXTRAÇÃO SÓLIDO-LÍQUIDO DE ÓLEO DE BARU ASSISTIDA POR ENERGIA SOLAR	
Caroline Santos Silva Lucas Rodrigo Custódio Kássia Graciele dos Santos	
<b>DOI 10.22533/at.ed.5152024031</b>	
<b>CAPÍTULO 2</b> .....	<b>12</b>
APROVEITAMENTO DO RESÍDUO AGROINDUSTRIAL DO CAFÉ NA PRODUÇÃO DE BIOCHAR PARA IMOBILIZAÇÃO DE LIPASE <i>RHIZOPUS ORYZAE</i> E SÍNTESE DE PALMITATO DE CETILA	
Danyelle Andrade Mota Jefferson Cleriston Barros dos Santos Lays Carvalho de Almeida Álvaro Silva Lima Laiza Canielas Krause Cleide Mara Faria Soares	
<b>DOI 10.22533/at.ed.5152024032</b>	
<b>CAPÍTULO 3</b> .....	<b>26</b>
ANÁLISE DA PERDA AO FOGO DE CORPOS DE PROVA CERÂMICOS FORMULADOS COM CINZA LEVE PROVENIENTE DA GASEIFICAÇÃO DO CARVÃO MINERAL PULVERIZADO	
Gabryella Cerri Mendonça Cristiano Corrêa Ferreira Flávio André Pavan	
<b>DOI 10.22533/at.ed.5152024033</b>	
<b>CAPÍTULO 4</b> .....	<b>34</b>
ESTABILIDADE E COMPORTAMENTO REOLÓGICO DE POLPA DE CUPUAÇU ( <i>Theobroma grandiniflorum</i> ) EM DIFERENTES CONCENTRAÇÕES E TEMPERATURAS	
Simara Ferreira Borges Harvey Alexander Villa Vélez Romildo Martins Sampaio Valkerline Pinto Pires Audirene Amorim Santana	
<b>DOI 10.22533/at.ed.5152024034</b>	
<b>CAPÍTULO 5</b> .....	<b>44</b>
ESTIMATIVA DE VARIÁVEIS DE ESTADO EM MODELO DE HIDRÓLISE DE MATÉRIAS GRAXAS	
Camila Santana Dias Leandro Santos Monteiro Bruno Marques Viegas Diego Cardoso Estumano Nielson Fernando da Paixão Ribeiro	
<b>DOI 10.22533/at.ed.5152024035</b>	
<b>CAPÍTULO 6</b> .....	<b>59</b>
APLICAÇÃO DA TÉCNICA DE MONTE CARLO VIA CADEIA DE MARKOV PARA ESTIMATIVA DE PARÂMETROS DE MODELOS DE BALANÇO POPULACIONAL PARA SISTEMAS PARTICULADOS	
Carlos Henrique Rodrigues de Moura Diego Cardoso Estumano João Nazareno Nonato Quaresma	

Emanuel Negrão Macêdo  
Bruno Marques Viegas  
Leandro Santos Monteiro  
Diego Sousa Lopes

**DOI 10.22533/at.ed.5152024036**

**CAPÍTULO 7 ..... 73**

APLICAÇÃO DA TÉCNICA DE MONTE CARLO VIA CADEIA DE MARKOV PARA ESTIMATIVA DE PARÂMETROS EM MODELO DE BALANÇO POPULACIONAL DE CRISTALIZAÇÃO DE GIBBSITA COM CINÉTICA CONSTANTE

Carlos Henrique Rodrigues de Moura  
Diego Cardoso Estumano  
João Nazareno Nonato Quaresma  
Emanuel Negrão Macêdo  
Bruno Marques Viegas  
Leandro Santos Monteiro  
Diego Sousa Lopes

**DOI 10.22533/at.ed.5152024037**

**CAPÍTULO 8 ..... 85**

APLICAÇÃO DO MÉTODO DE MONTE CARLO VIA CADEIA DE MARKOV PARA ESTIMATIVA DE PARÂMETROS EM MODELOS DE CURVAS DE RUPTURA

João Paulo de Souza Coutinho  
Ianka Cristine Benicio Amador  
Bruno Marques Viegas  
Nielson Fernando da Paixão Ribeiro  
Diego Cardoso Estumano

**DOI 10.22533/at.ed.5152024038**

**CAPÍTULO 9 ..... 100**

DESCRIÇÃO FÍSICA DE FIBRAS DE COCO (*COCO NUCIFERA L.*) SUBMETIDAS A TRATAMENTO EM DIFERENTES CONDIÇÕES DE MACERAÇÃO

Nayara Maria Monteiro da Silva  
Carla Arnaud de Azevedo  
Alefhe Bernard Cordovil Mascarenhas  
Raíssa Cristine Santos de Araújo  
Gabriela Nascimento Vasconcelos  
Rafael Maia de Oliveira  
Elza Brandão Santana  
Lênio José Guerreiro de Faria

**DOI 10.22533/at.ed.5152024039**

**CAPÍTULO 10 ..... 116**

DESENVOLVIMENTO DE UM SIMULADOR DE PROCESSOS USANDO LINGUAGEM VISUAL BASIC FOR APPLICATIONS (VBA) PARA A OXIDAÇÃO DO TOLUENO

Herbert Senzano Lopes  
Vanja Maria de Franca Bezerra  
Matheus Henrique Antonio Aboukalam da Cruz  
Osvaldo Chiavone-Filho  
Carlson Pereira de Souza

**DOI 10.22533/at.ed.51520240310**

**CAPÍTULO 11 ..... 123**

O USO DA EXPERIMENTAÇÃO COMO FERRAMENTA FACILITADORA PARA O ENSINO DE REAÇÃO DE DUPLA TROCA

Luciane Neves Ribeiro  
Charles Garcia da Cunha  
Joseane Cunha da Conceição  
Layze Maria da Silva e Silva  
Lindsey Bianca Araújo Fialho  
Suzianne Saldanha da Silva  
Vitor dos Santos de Carvalho  
Miracleide de Araújo Batista Carneiro  
Kelly das Graças Fernandes Dantas  
Patrícia Santana Barbosa Marinho

**DOI 10.22533/at.ed.51520240311**

**CAPÍTULO 12 ..... 130**

O LÚDICO ATRAVÉS DE JOGOS DIDÁTICOS COMO AUXÍLIO EM AULAS DE TABELA PERIÓDICA PARA ALUNOS DO 9º ANO

Manoel Leão Lopes Junior  
Lourivaldo Silva Santos  
Marivaldo José Costa Corrêa  
Raílda Neyva Moreira Araújo  
Haroldo da Silva Ripardo Filho  
Luely Oliveira da Silva  
Catarina Estumano Bandeira  
Lucio Flavio Pires Santos  
Jéssica de Souza Viana  
Felipe Augusto da Silva Bezerra

**DOI 10.22533/at.ed.51520240312**

**CAPÍTULO 13 ..... 140**

SIMULAÇÃO EM SUPERPRO DESIGNER DOS CUSTOS DE PRODUÇÃO DO FUNGO *Metarhizium anisopliae* POR FERMENTAÇÃO EM ESTADO SOLIDO

Antonio Dheyson da Silva Oliveira  
Rodrigo Silva Dutra  
Sebastian Ospina Corral  
Cristian Orlando Avila  
Carlos Eduardo Orrego  
Lina María Grajales

**DOI 10.22533/at.ed.51520240313**

**CAPÍTULO 14 ..... 152**

O PROCESSO DE FISCALIZAÇÃO DO CONSELHO REGIONAL DE QUÍMICA 6ª REGIÃO PA/AP

Denise de Mello Lima  
Dionis Rogério Costa Peixoto  
Cristiane Maria Leal Costa  
Célio Augusto Gomes de Souza  
Antonio Claudio Lima Moreira Bastos  
Allysson Bruno Almeida Ramos

**DOI 10.22533/at.ed.51520240314**

**CAPÍTULO 15 ..... 159**

QUIZ EDUCATIVO: UMA PROPOSTA METODOLÓGICA PARA O ENSINO DE TABELA PERIÓDICA

Layze Maria da Silva e Silva

Luciane Neves Ribeiro  
Joseane Cunha Da Conceição  
Vitor Dos Santos De Carvalho  
Suzianne Saldanha Da Silva  
Lindsey Bianca Araujo Fialho  
Charles Gracia da Cunha  
Miracleide De Araújo Batista Carneiro  
Kelly Das Graças Fernandes Dantas  
Patrícia Santana Barbosa Marinho

**DOI 10.22533/at.ed.51520240315**

**CAPÍTULO 16 ..... 164**

ATIVIDADE ALELOPÁTICA DA BIOMASSA DO FUNGO *ASPERGILLUS SP*, ISOLADO COMO ENDOFÍTICO DA ESPÉCIE *Paspalum maritimum* TRIN

Manoel Leão Lopes Junior  
Lourivaldo Silva Santos  
Marivaldo José Costa Corrêa  
Raílda Neyva Moreira Araújo  
Haroldo da Silva Ripardo Filho  
Luely Oliveira da Silva  
Lucio Flavio Pires Santos  
Jéssica de Souza Viana  
Felipe Augusto da Silva Bezerra

**DOI 10.22533/at.ed.51520240316**

**CAPÍTULO 17 ..... 173**

ATIVIDADE FITOTÓXICA DA BIOMASSA PRODUZIDA PELO FUNGO ENDOFÍTICO *Glomerella cingulata*

Manoel Leão Lopes Junior  
Lourivaldo Silva Santos  
Marivaldo José Costa Corrêa  
Raílda Neyva Moreira Araújo  
Haroldo da Silva Ripardo Filho  
Luely Oliveira da Silva  
Lucio Flavio Pires Santos  
Jéssica de Souza Viana  
Felipe Augusto da Silva Bezerra

**DOI 10.22533/at.ed.51520240317**

**CAPÍTULO 18 ..... 181**

CHEMICAL CONSTITUENTS AND LARVICIDAL ACTIVITY OF ESSENTIAL OIL FROM *Murraya koenigii* (L.) Spreng. (RUTACEAE) AGAINST *Aedes aegypti* (DIPTERA: CULICIDAE)

Camila Aline Romano  
Matheus Gabriel de Oliveira  
Matheus de Sousa Melo Morais  
Andressa Tuane de Santana Paz  
Liliane de Sousa Silva  
Heloisa Helena Garcia da Silva  
Ionizete Garcia da Silva  
Adelair Helena dos Santos  
José Realino de Paula

**DOI 10.22533/at.ed.51520240318**

**CAPÍTULO 19 ..... 192**

ESTIMATIVA DA CURVA DE RUPTURA DO PROCESSO DE ADSORÇÃO ATRAVÉS DO ALGORITMO

DE REAMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA

Ianka Cristine Benicio Amador  
Bruno Marques Viegas  
Diego Cardoso Estumano  
Emanuel Negrão Macêdo  
Nielson Fernando da Paixão Ribeiro

**DOI 10.22533/at.ed.51520240319**

**CAPÍTULO 20 ..... 205**

DETERMINAÇÃO DO PERFIL ÓTIMO DE TEMPERATURA PARA UM BIOPROCESSO EM BATELADA DE PRODUÇÃO DE PENICILINA REPRESENTADO POR UM MODELO MATEMÁTICO

Samuel Conceição de Oliveira  
Angel Gustavo Tolaba

**DOI 10.22533/at.ed.51520240320**

**CAPÍTULO 21 ..... 218**

AVANÇOS RECENTES E PERSPECTIVAS FUTURAS NA MODELAGEM MATEMÁTICA DO PROCESSO DE REMOÇÃO DE SULFATO DE ÁGUAS RESIDUÁRIAS INDUSTRIAIS EM BIORREATOR ANAERÓBIO DE LEITÃO FIXO OPERADO EM BATELADAS SEQUENCIAIS

Samuel Conceição de Oliveira  
Arnaldo Sarti

**DOI 10.22533/at.ed.51520240321**

**SOBRE A ORGANIZADORA..... 228**

**ÍNDICE REMISSIVO ..... 229**

## APLICAÇÃO DA TÉCNICA DE MONTE CARLO VIA CADEIA DE MARKOV PARA ESTIMATIVA DE PARAMETROS DE MODELOS DE BALANÇO POPULACIONAL PARA SISTEMAS PARTICULADOS

Data de submissão: 03/12/2019  
Data de aceite: 16/03/2020

### **Carlos Henrique Rodrigues de Moura**

Universidade Federal do Pará, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química  
Belém – Pará  
<http://lattes.cnpq.br/3965235559226123>

### **Diego Cardoso Estumano**

Universidade Federal do Pará, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos  
Belém – Pará  
<http://lattes.cnpq.br/5521162828533153>

### **João Nazareno Nonato Quaresma**

Universidade Federal do Pará, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Química  
Belém – Pará  
<http://lattes.cnpq.br/7826389991864785>

### **Emanuel Negrão Macêdo**

Universidade Federal do Pará, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química  
Belém – Pará  
<http://lattes.cnpq.br/8718370108324505>

### **Bruno Marques Viegas**

Universidade Federal do Pará, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos  
Belém – Pará  
<http://lattes.cnpq.br/1196600058247902>

### **Leandro Santos Monteiro**

Universidade Federal do Pará, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

Belém – Pará

<http://lattes.cnpq.br/1473089897349088>

### **Diego Sousa Lopes**

Universidade Federal do Pará, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química  
Belém – Pará  
<http://lattes.cnpq.br/5921071838518219>

**RESUMO:** Modelos de balanço populacional incorporam dentro de sua estrutura coeficientes de quebra, aglomeração e crescimento que representam os mecanismos presentes na formação de partículas em sistemas particulados. Muitas vezes, tais coeficientes são difíceis de estimar devido a sua natureza não linear. Nesse trabalho foi aplicada a metodologia de obter a estimativa desses parâmetros a partir da técnica bayesiana de Monte Carlo via cadeia de Markov. Assim sendo, foram estimados os parâmetros de modelos propostos por Gelbard e Seinfeld (1978) que descrevem o comportamento de sistemas particulados. Utilizando medida simulada, a técnica foi aplicada nos parâmetros dos modelos propostos e obteve-se boas estimativas, gerando resultados satisfatórios e mostrando que a técnica teve boa aplicabilidade nos parâmetros dos modelos em estudo.

**PALAVRAS-CHAVE:** Problemas Inversos, Monte Carlo via Cadeia de Markov, Balanço Populacional, Sistemas Particulados

## APPLICATION OF MARKOV CHAIN MONTE CARLO TECHNIQUE FOR ESTIMATION OF POPULATION BALANCE MODEL PARAMETERS IN PARTICULATE SYSTEMS

**ABSTRACT:** Population balance models incorporate within their framework rupture, agglomeration and growth coefficients that represent the mechanisms present in particle formation in particulate systems. Often, such coefficients are difficult to estimate because of their nonlinear nature. In this paper, we applied the methodology of obtaining the estimation of these parameters from the Monte Carlo Markov chain Bayesian technique. Thus, the model parameters proposed by Gelbard and Seinfeld (1978) that describe the behavior of particulate systems were estimated. Using simulated measurement, the technique was applied to the parameters of the proposed models and good estimates were obtained, generating satisfactory results and showing that the technique had good applicability in the parameters of the models under study.

**KEYWORDS:** Inverse Problems, Markov Chain Monte Carlo, Population Balance, Particulate Systems.

### 1 | INTRODUÇÃO

Processos particulados nas últimas décadas ganharam grande destaque na Engenharia Química, principalmente por que se tornaram economicamente vantajosos e tecnicamente atraentes para algumas unidades de bens de produção (Duarte e Batista, 2008; Gunawan, 2004). Hulburt e Katz (1964) forneceram uma estrutura para a análise de sistemas particulados, apresentando uma equação que veio a ser conhecida como a equação do balanço populacional. A equação de balanço populacional busca entender a mudança ao longo do tempo de uma propriedade dentro da população para determinadas condições do processo. Para tanto, torna-se impreterível o conhecimento dos fenômenos que possam modificar a distribuição de partículas no tempo, como nucleação, crescimento, quebra e aglomeração de partículas (Ramkrishna, 2000).

Esses mecanismos dentro da estrutura do balanço populacional são expressos por coeficientes que contem parâmetros que precisam ser estimados para avaliar a cinética das partículas. O método mais direto para essa observação é a observação individuais para determinar seu comportamento (Chakraborty, 2015). Entretanto, a observação de partículas específicas pode ser difícil num cenário contendo várias partículas onde deseja-se monitorar suas interações para observar os efeitos que as mesmas possuem na distribuição do tamanho de partículas (Ramkrishna, 2000). Dessa forma, problemas inversos surgem quando a solução para a equação governante é conhecida, mas taxas fenomenológicas (como, agregação, crescimento e quebra) do modelo não são.

O presente trabalho introduz a técnica Bayesiana de Monte Carlo via Cadeia de Markov para estimar os parâmetros dos modelos propostos por Gelbard e Seinfeld (1978) que regem a dinâmica de sistemas particulados. Tal técnica tem como mote

obter uma amostra da distribuição a posteriori e calcular estimativas amostrais das características desta distribuição. Com isso, visa obter inferências acerca dos parâmetros que regem o mecanismo do processo e se obter conclusões sobre esses mecanismos.

## 2 | MODELOS DIRETOS

Um sistema particulado é determinado pela influência de diversos fenômenos tais como: nucleação, crescimento, aglomeração e quebra. A formulação matemática da dinâmica desses sistemas pode ser expressa pela equação geral do balanço populacional (Ramabhadran et al., 1976; Gelbard e Seinfeld, 1978; Peterson et al., 1978):

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = - \underbrace{\frac{\partial [I_v(v,t)n(v,t)]}{\partial v}}_{(I)} + \underbrace{\frac{1}{2} \int_0^{v/2} \beta_v(v-\bar{v},\bar{v},t)n(v-\bar{v},t)n(\bar{v},t)d\bar{v}}_{(II)} - \underbrace{\int_0^\infty \beta_v(v,\bar{v},t)n(v,t)n(\bar{v},t)d\bar{v}}_{(III)} + \underbrace{S_v[n(v,t),v,t]}_{(IV)} \quad (1)$$

onde,  $I_v(v, t)$  é a taxa de mudança de volume  $v$  pela transferência de massa entre partículas e fase fluida,  $\beta_v(v, \bar{v})$  é o coeficiente de coagulação da partícula para volumes  $v$  e  $\bar{v}$ , e  $S_v$  é a taxa líquida de adição de partículas novas no sistema. As condições inicial e de contorno requeridas para a Equação (1) são geralmente fornecidas como

$$n(v, 0) = \frac{N_0}{v_0} e^{-v/v_0} \quad (2)$$

$$n(0, t) = 0 \quad (3)$$

Na Equação (2), inicialmente considera-se uma distribuição de volume inicial exponencial, onde  $N_0$  é o número de partículas inicial total e  $v_0$  é o volume inicial. A condição de contorno da Equação (3) indica que não há partículas de tamanho zero.

O termo (I) está relacionado à taxa de crescimento de partículas por transferência de massa para uma única partícula, o termo (II) representa o nascimento de partículas pela colisão de uma partícula de tamanho  $v - \bar{v}$  com outra partícula de tamanho  $\bar{v}$  para formar uma partícula de volume  $v$  (assumindo conservação de volume durante a coagulação), o termo (III) representa a taxa de morte de partículas pela colisão com outras partículas, e o termo (IV) pode representar a taxa de adição ou remoção de partículas no sistema (Ramabhadran et al., 1976; Gelbard e Seinfeld, 1978; Peterson et al., 1978).

A partir dessa equação, e dada a grande variedade de contextos ao qual está inserida, Gelbard e Seinfeld (1978) propuseram 4 modelos os quais serão detalhados

nos tópicos seguintes.

## 2.1 Modelo 1 - Aglomeração pura com coeficiente de aglomeração constante

O Modelo 1 considera um sistema particulado submetido apenas por aglomeração pura com coeficiente de aglomeração constante, assumindo que no processo de aglomeração de partículas o tamanho das partículas não é levado em consideração e que o coeficiente é independente do tamanho, o que implica que as partículas possuem uma probabilidade igual de formar um aglomerado permanente, independente do seu tamanho (Kapul e Fuerstenau, 1969). Dessa forma, o modelo de balanço populacional assume a forma (Scoot, 1968; Ramabhadran et al., 1976; Gelbard e Seinfeld, 1978; Peterson et al., 1978)

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{\beta_0}{2} \int_0^v n(v-\bar{v},t)n(\bar{v},t)d\bar{v} - \beta_0 \int_0^\infty n(v,t)n(\bar{v},t)d\bar{v} \quad (4)$$

onde  $\beta_0(t)$  representa o coeficiente de aglomeração constante. Com o coeficiente de aglomeração constante, Scoot (1968) apresentou uma solução analítica para a Equação (4) utilizando a transformada de Laplace e a mesma é apresentada a seguir

$$n(v,t) = \frac{4 \binom{N_0/v_0}{v}}{(2 + \beta_0 N_0 t)^2} \exp\left[-\frac{2}{(2 + \beta_0 N_0 t)} \frac{v}{v_0}\right] \quad (5)$$

## 2.2 Modelo 2 - Aglomeração pura com coeficiente de aglomeração variável

O Modelo 2 considera um sistema particulado submetido apenas por aglomeração pura com coeficiente de aglomeração variável, levando em consideração o tamanho das partículas. Esse coeficiente expressa que partículas maiores tem aglomeração mais favorável que partículas menores, que estão quase sempre presentes no meio (Salman, Hounslow e Seville, 2007). Este coeficiente de aglomeração pode ser explicado a partir da difusão turbulenta no meio (Golovin, 1963; Hidy e Brock, 1970). Dessa forma, o modelo de balanço populacional assume a forma (Scoot, 1968; Ramabhadran et al., 1976; Gelbard e Seinfeld, 1978; Peterson et al., 1978)

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{\beta_1}{2} \int_0^v (v+\bar{v})n(v-\bar{v},t)n(\bar{v},t)d\bar{v} - \beta_1 n(v,t) \int_0^\infty (v+\bar{v})n(\bar{v},t)d\bar{v} \quad (6)$$

onde  $\beta_1(v+\bar{v})$  representa o coeficiente de aglomeração dependente do tamanho das partículas. Para o fenômeno de aglomeração pura, com coeficiente de aglomeração variável, Golovin (1963) e Scoot (1968) obtiveram como solução analítica

$$n(v,t) = -\frac{N_0(1-T)}{v\sqrt{T}} \exp\left[-\frac{(1+T)v}{v_0}\right] I_1\left[2\sqrt{T}\frac{v}{v_0}\right] \quad (7)$$

onde  $T = 1 - \exp(-\tau)$  e  $\tau = \beta_1 N_0 v_0 t$ .  $I_1$  é uma função de Bessel modificada de primeira ordem.

### 2.3 Modelo 3 - Aglomeração pura com coeficiente de aglomeração variável e taxa de remoção de partículas

O Modelo 3 considera um sistema particulado submetido por aglomeração pura com coeficiente de aglomeração variável e taxa de remoção de partículas, representado por  $R_0$ . Essa taxa de remoção representa a quantidade de partículas removidas por procesos como sedimentação e difusão (Slama et al., 2014). Dessa forma, o modelo de balanço populacional assume a forma (Gelbard e Seinfeld, 1978; Peterson et al., 1978)

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = \frac{\beta_1}{2} \int_0^v (v+\bar{v}) n(v-\bar{v},t) n(\bar{v},t) d\bar{v} - \beta_1 n(v,t) \int_0^\infty (v+\bar{v}) n(\bar{v},t) d\bar{v} - R_0 n(v,t) \quad (8)$$

O modelo matemático dado pela equação integro-diferencial parcial (8) admite solução analítica na forma (Peterson et al., 1978; Gelbard e Seinfeld, 1978)

$$n(v,t) = -\frac{\tilde{T} N_0 \exp\left(\frac{(\tilde{T}-1)}{\theta}\right)}{v\sqrt{\tilde{g}}} \exp\left[-\left(1+\tilde{g}\right)\frac{v}{v_0}\right] I_1\left[2\sqrt{\tilde{g}}\frac{v}{v_0}\right] \quad (9)$$

onde,  $\tilde{T} = \exp(-\theta\tau)$ ;  $\tau = \beta_1 N_0 v_0 t$ ;  $\tilde{g} = 1 - \exp\left(\frac{\tilde{T}-1}{\theta}\right)$ ,  $\theta = \frac{R_0}{\beta_1 N_0 v_0}$  e  $I_1$  é uma função de Bessel modificada de primeira ordem.

### 2.2 Modelo 4 - Aglomeração pura com coeficiente de aglomeração constante e taxa de crescimento de partículas

O Modelo 4 considera um sistema particulado submetido apenas por aglomeração pura com coeficiente de aglomeração constante e taxa de crescimento de partícula por condensação heterogênea, ou seja, a deposição de massa em fase vapor diretamente em partículas já existente (Hidy and Brock, 1970; Ramabhadran et al., 1976; Peterson et al., 1978). Dessa maneira, o modelo de balanço populacional assume a forma (Hidy and Brock, 1970; Ramabhadran et al., 1976; Peterson et al., 1978)

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} = -\sigma \frac{\partial [vn(v,t)]}{\partial v} + \frac{\beta_0}{2} \int_0^{v/2} n(v-\bar{v},t) n(\bar{v},t) d\bar{v} - \beta_0 n(v,t) \int_0^\infty n(\bar{v},t) d\bar{v} \quad (10)$$

onde  $\sigma$  representa a diferença na concentração das espécies difusoras no ambiente e na superfície da partícula para uma taxa de crescimento controlada pela reação química no meio. A solução analítica da Equação (10) é (Ramabhadran et al., 1976):

$$n(v,t) = \frac{4\left(\frac{N_0}{v_0}\right)}{(2+\tau)^2} \exp\left[-\frac{2v}{(2+\tau)v_0} \exp(-\Lambda\tau) - \Lambda\tau\right] \quad (11)$$

onde  $\Lambda = \frac{\sigma}{\beta_0 N_0}$ .

### 3 | MONTE CARLO VIA CADEIA DE MARKOV

O método de Monte Carlo via Cadeia de Markov é uma versão iterativa dos métodos de Monte Carlo tradicionais. A ideia é obter uma amostra da distribuição a posteriori e calcular estimativas amostrais das características desta distribuição usando técnicas de simulação iterativa, baseadas em Cadeias de Markov (Ehlers, 2007).

No presente trabalho foi utilizado o algoritmo de Metropolis-Hastings para a implementação do método de Monte Carlo com cadeias de Markov. Este algoritmo é baseado no método de aceitação-rejeição, onde são gerados valores candidatos  $\theta^*$  que pertencem a uma distribuição proposta  $p(\theta^*|\theta)$ . O algoritmo de Metropolis-Hastings é descrito a seguir (Kaipio e Somersalo, 2004):

1. Inicializa-se o contador de iterações  $i=0$  e especifica-se um valor inicial  $\theta_0$ .
2. Gera-se um valor candidato  $\theta^*$  da distribuição  $p(\theta^*|\theta)$ :

$$\theta^* = \theta(1+w\varepsilon) \quad (12)$$

onde  $\varepsilon$  é uma variável  $N(0,1)$  e  $w$  é o passo de procura.

3. Calcula-se a probabilidade de aceitação  $\alpha(\theta, \theta^*)$  do valor candidato na forma:

$$\alpha(\theta, \theta^*) = \min\left[1, \frac{p(\theta^*|Y)q(\theta^*|\theta)}{p(\theta|Y)q(\theta|\theta^*)}\right] \quad (13)$$

4. Gera-se uma amostra aleatória auxiliar de uma distribuição uniforme:  $u \sim U(0,1)$
5. Se  $u \leq \alpha$  então aceita-se o novo valor e faz-se  $\theta_{i+1} = \theta^*$ , caso contrário rejeita-se e faz-se  $\theta_{i+1} = \theta_i$ .
6. Incrementa-se o contador de  $i$  para  $i+1$  e volta-se para o passo 2.

## 4 | RESULTADOS E DISCUSSÕES

Aplicou-se o método MCMC com algoritmo de Metropolis-Hastings para estimar os parâmetros dos modelos propostos por Gelbard e Seinfeld (1978) para sistemas particulados. Neste trabalho foram utilizadas medidas simuladas com o objetivo de fazer as verificações dos códigos desenvolvidos.

As estimativas realizadas foram consideradas distribuições gaussianas para as distribuições de probabilidade a priori dos parâmetros. Para as estimativas dos parâmetros dos modelos de Gelbard e Seinfeld (1978) foram utilizadas as seguintes condições iniciais para a variável de estado :  $n(D, t): N_0 = 1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  e  $D_0 = 1 \text{ }\mu\text{m}$ . Foi considerado a análise do processo para o tempo de 2 segundos. Em relação aos parâmetros adotados como referência, estes são apresentados na Tabela 1

Parâmetros	Modelo	Valores (Unidades)
$\beta_0 (\times 10^{-10})$	1 e 4	1.2 (cm <sup>3</sup> /s)
$\beta_1 (\times 10^{-10})$	2 e 3	1.8 (cm <sup>3</sup> /s)
$R_0$	3	1 (cm <sup>3</sup> /s)
$\sigma$	4	1 (cm <sup>3</sup> /s)

Tabela 1: Parâmetros de referência para os modelos propostos por Gelbard e Seinfeld

Antes da aplicação do algoritmo MCMC foi realizada uma análise de sensibilidade para verificar quais parâmetros podem ser estimados simultaneamente dos modelos 3 e 4, dado que os modelos 1 e 2 possuem apenas um parâmetro e esses parâmetros possuem magnitude considerável em relação a variável de estado medida. Para os parâmetros dos modelos 3 e 4, é necessário que os coeficientes de sensibilidade dos mesmos apresentem considerável magnitude em relação a variável de estado medida e sejam linearmente dependentes.

O modelo 3 é composto por 2 parâmetros, o coeficiente de aglomeração  $\beta_1$  e a taxa de remoção de partículas  $R_0$ . São apresentados os coeficientes de sensibilidade na faixa de tempo e diâmetro para os dois parâmetros para verificar a dependência linear e sua magnitude. Estes coeficientes são mostrados a seguir na Figura 1 para os diâmetros e tempos analisados.

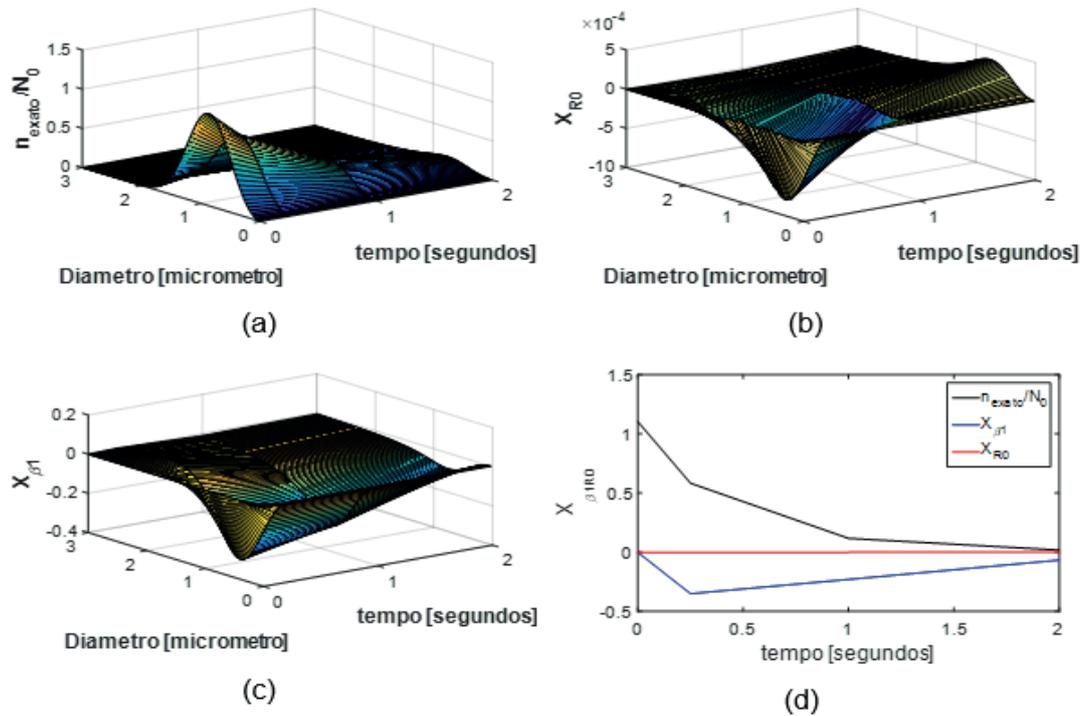


Figura 1– Análise do coeficiente de sensibilidade reduzido para os parâmetros do modelo 3

A análise do coeficiente de sensibilidade reduzido na faixa de diâmetro da partícula para os parâmetros do modelo 3 mostrada nas Figuras 1(a)-(c) conclui que os parâmetros  $\beta_1$  e  $R_0$  apresentam considerável magnitude na faixa de 1  $\mu\text{m}$ , logo as análises do comportamento temporal dos parâmetros e da variável de estado dos modelos serão consideradas nesse diâmetro de partícula. Contudo, ao analisar a Figura 1(d) é verificado que os coeficientes reduzidos do parâmetro  $\beta_1$  apresenta considerável magnitude em relação a variável de estado analisada e, portanto, pode ser estimado. Em relação ao parâmetro  $R_0$  este apresenta magnitude praticamente nula em relação a variável de estado analisada e, portanto, não será estimado.

O modelo 4 é composto por 2 parâmetros, o coeficiente de aglomeração ( $\beta_0$ ) e a taxa de crescimento por coagulação ( $\sigma$ ). Primeiramente, a análise do coeficiente de sensibilidade é análoga ao modelo 3 e está presente na Figuras 2.

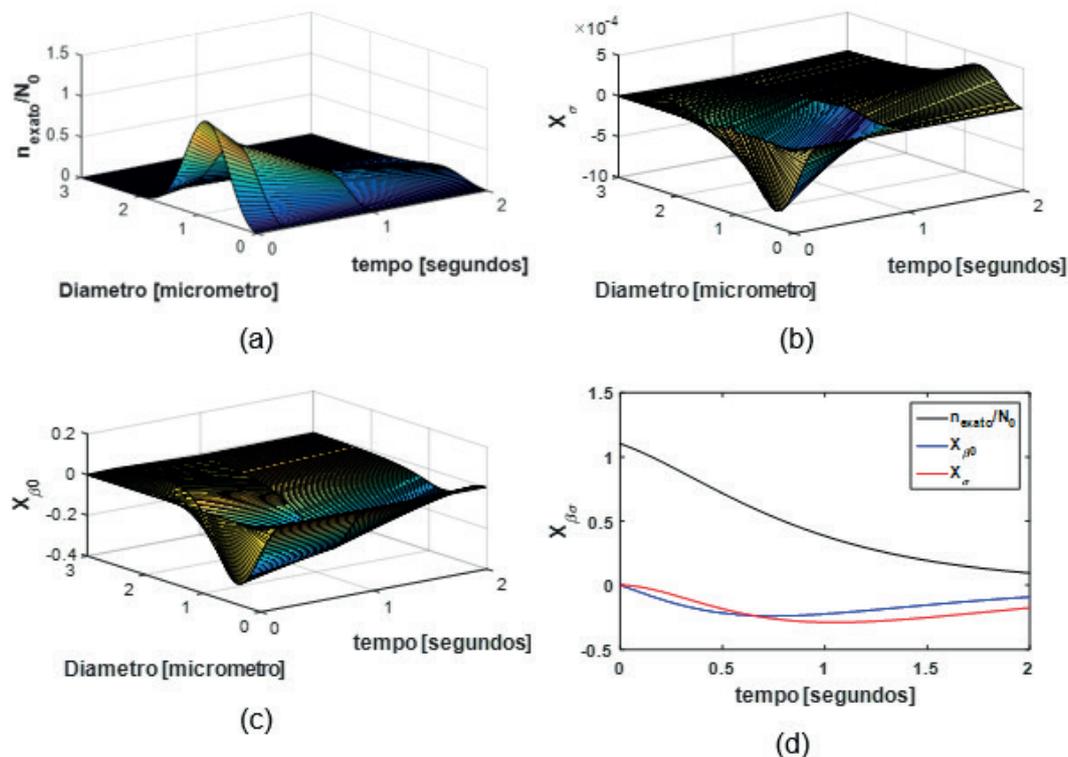


Figura 2– Análise do coeficiente de sensibilidade reduzido para os parâmetros do modelo 4

Pelas Figuras 2.(a)-(c), a análise do coeficiente de sensibilidade reduzido na faixa de diâmetro da partícula para os parâmetros do modelo 4 é análoga ao modelo 3. Ao analisar a Figura 2.(d) é verificado que os coeficientes reduzidos dos parâmetros  $\beta_0$  e  $\sigma$  são linearmente independentes e apresentam considerável magnitude em relação a variável de estado analisada. Assim sendo, é inferido a partir das análises que estes parâmetros podem ser estimados simultaneamente.

As estimativas de parâmetros realizadas com a Técnica de Monte Carlo via Cadeia de Markov foram realizadas para estimar os parâmetros do modelo 1 ( $\beta_0$ ), do modelo 2 ( $\beta_1$ ), do modelo 3 ( $\beta_1$  e  $R_0$ ) e do modelo 4 ( $\beta_0$  e  $\sigma$ ). A geração de parâmetros candidatos foi realizada por meio de um passeio aleatório com distribuição Gaussiana com média igual ao parâmetro do estado anterior e desvio padrão igual ao passo de procura,  $w$ , vezes o parâmetro do estado anterior.

A análise da influência do passo de procura foi realizada na estimativa do parâmetro  $\beta_0$  do primeiro modelo. Esta análise foi realizada com três valores:  $1 \times 10^{-3}$ ,  $3 \times 10^{-3}$  e  $5 \times 10^{-3}$ . Considerando uma distribuição de probabilidade a priori gaussiana, com a média é igual ao valor exato do parâmetro e desvio-padrão igual a 10% do valor do parâmetro de referência e incerteza de medida de 1% da variável de estado.

As análises da influência do passo de procura foram baseadas em: evolução das cadeias de Markov e taxa de aceitação. A seguir são mostradas na Figura 3 a evolução das cadeias de Markov para o parâmetro do modelo 1 com os passos de procura.

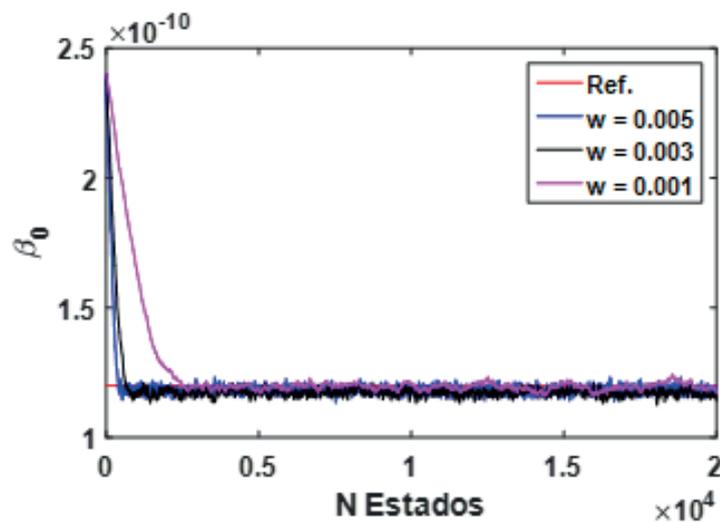


Figura 3: Evolução das cadeias de Markov para diferentes passos de procura para o parâmetro  $\beta_0$

A análise da Figura 3 permite inferir que para todos os passos de procura analisados as estimativas alcançadas foram boas, uma vez que as cadeias convergiram no valor de referência do parâmetro. Verificou-se também que para o parâmetro ser estimado são necessários mais estados de aquecimento da cadeia para valores menores de passo de procura, como pode ser visto na Tabela 2 a seguir.

Passo de procura	Estados de Aquecimento
$1 \times 10^{-3}$	2500
$3 \times 10^{-3}$	600
$5 \times 10^{-3}$	400

Tabela 2: Influência do passo de procura nos estados de aquecimento.

Esta análise do passo de procura é importante para reduzir a quantidade de estados na cadeia. Isto é interessante, pois há redução de custo computacional. Por este ponto de vista, seria conveniente usar passos de procura com altos valores. Porém, ao fazer isso reduz-se a taxa de aceitação conforme apresentado na Figura 4.

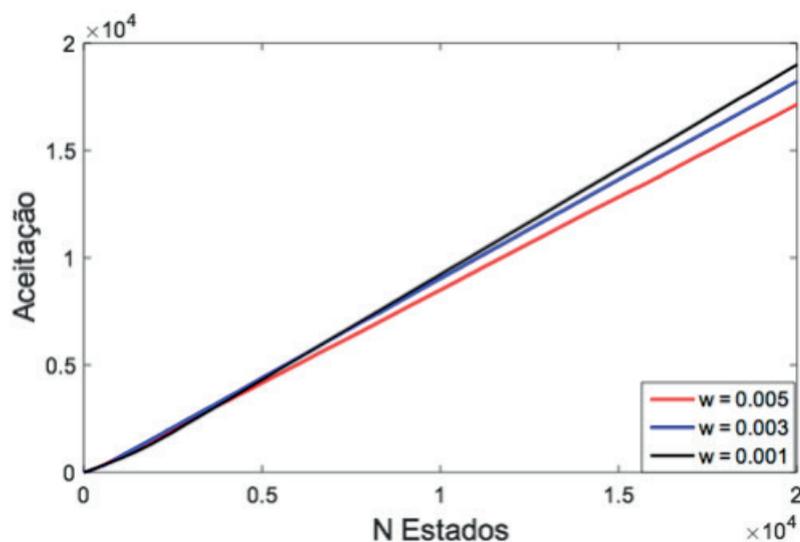


Figura 4: Taxa de aceitação para diferentes passos de procura

Além da análise da influência do passo de procura, foram realizadas a avaliação da média e intervalo de credibilidade das distribuições a posteriori dos parâmetros estimados. Considerando como distribuição de probabilidade a priori uma distribuição gaussiana, com média igual ao valor do parâmetro de referência e desvio-padrão igual a 30% do parâmetro de referência, um valor considerado relativamente alto. O desvio de medida é igual a 5% da variável de estado e o passo de procura utilizado para essa análise foi o de  $5 \times 10^{-3}$ . As informações acerca das estimativas dos parâmetros (distribuição de probabilidade a posteriori) dos 4 modelos são apresentadas na Tabela 3

$\theta$	Exato	M1	M2	M3	M4
$\beta_0$ ( $\times 10^{-10}$ )	1.2	1.22 (1.08; 1.38)	-	-	1.39 (1.06; 1.65)
$\beta_1$ ( $\times 10^{-10}$ )	1.8	-	1.80 (1.72; 1.89)	1.77 (1.67; 1.90)	-
$\sigma$	1	-	-	-	0.91 (0.74; 1.15)

Tabela 3 - Estimativa dos Parâmetros (média e intervalo de credibilidade 99%)

A Tabela 3 mostra que em todos os casos analisados, os parâmetros tiveram excelentes estimativas. O algoritmo apresentou precisão, uma vez que a medida das estimativas se apresentaram muito próximas dos valores exatos. Como os intervalos de credibilidade de 99% apresentam faixa (limites máximo e mínimo) consideravelmente pequena, isso mostra que houve acurácia nas estimativas.

Para finalizar a análise da verificação do algoritmo MCMC é apresentado o gráfico das estimativas da variável de estado para o modelo 1, contendo a média, a medida simulada e os intervalos de credibilidade. Esse gráfico é apresentado na Figura 5.

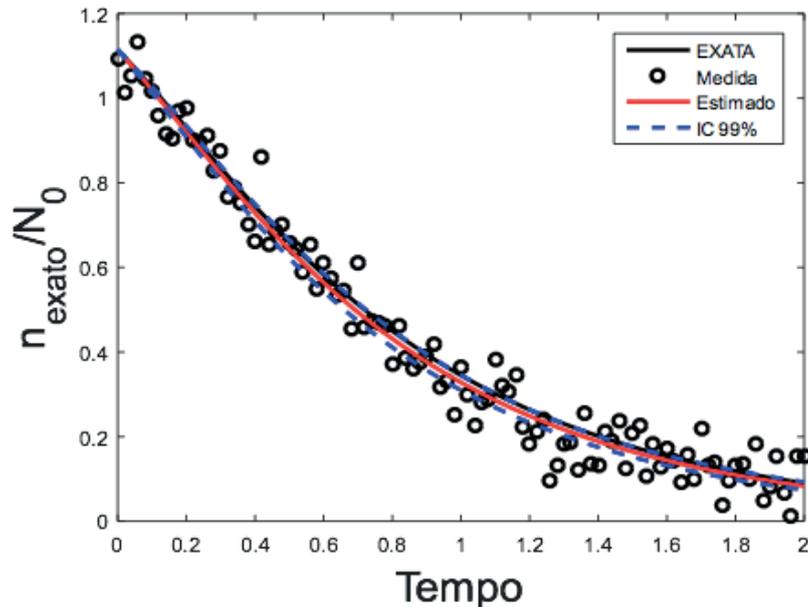


Figura 5: Gráfico das estimativas da variável de estado para o modelo 1

Ao analisar a figura acima, observa-se que os resultados foram bem satisfatórios, uma vez que os valores estimados, medidos e do intervalo de credibilidade tiveram boa concordância com as medidas simuladas e o intervalo de credibilidade. Fisicamente, nota-se que a função densidade de distribuição de tamanho diminui quando o tempo aumenta, isso ocorre devido a colisão entre partículas, para formar corpos maiores.

## 5 | CONCLUSÃO

O presente trabalho apresentou a utilização da técnica bayesiana de Monte Carlo via Cadeia de Markov para estimativa dos parâmetros dos modelos de balanço populacional propostos por Gelbard e Seinfeld (1978) para sistemas particulados. Inicialmente foi realizada a análise dos coeficientes de sensibilidade reduzido, onde constatou-se que os parâmetro  $\beta_0$  (modelo 1 e modelo 4),  $\beta_1$  (modelo 2 e modelo 3) e  $\sigma$  (modelo 4) poderiam ser estimados. Ao analisar os casos estudados com o MCMC, constatou-se que o passo de procura,  $w$ , influencia no aquecimento da cadeia de Markov e quanto maior for o passo de procura menos estados serão requeridos para o aquecimento da cadeia. Desta maneira, mostrou-se que a técnica de Monte Carlo via Cadeia de Markov é capaz de estimar os parâmetros dos modelos de balanço populacional estudado neste trabalho.

Agradecimento às agências de fomento FAPESPA, CAPES e CNPq que financiaram esse trabalho.

## 6 | NOMENCLATURA

$D$	Diâmetro da partícula, $\mu\text{m}$
$n(D, t)$	Densidade de tamanho de partículas, $\mu\text{m}^{-3}\cdot\text{cm}^{-3}$
$N_0$	Numero total de partículas no tempo zero, $\text{cm}^{-3}$
$R_0$	Taxa de remoção de partículas, $\text{cm}^3/\text{s}$

### 6.1 LETRAS GREGAS

$\beta_0$	Coeficiente de coagulação constante, $\text{cm}^3/\text{s}$
$\beta_1$	Coeficiente de coagulação variável, $\text{cm}^3/\text{s}$
$\sigma_0$	Condensação constante para crescimento uniforme, $\text{cm}^3/\text{s}$

## REFERÊNCIAS

- CHAKRABORTY, J., KUMAR, J., SINGH, M., MAHONEY, A., & RAMKRISHNA, D. **Inverse Problems in Population Balances. Determination of Aggregation Kernel by Weighted Residuals.** *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 54(42), 10530–10538. (2015)
- DUARTE, B., BAPTISTA, C. **Moving Finite Elements Method Applied to Dynamic Population Balance Equations.** *AIChE Journal*. vol.54, p.673-692. 2008
- EHLERS, R.S. **Introdução à Inferência Bayesiana, Departamento de Estatística, Universidade Federal do Paraná.** 2007
- GELBARD, F., SEINFELD, J. H. **Numerical solution of the dynamic equation for particulate systems.** *Journal of Computational Physics*, 28(3), 357–375. 1978
- GOLOVIN, A. M. **The Solution of the Coagulation Equation for Raindrops. Taking Condensation into Account.** *Soviet Physics Doklady*, Vol. 8, p.191. 1963
- GUNAWAN, R., FUSMAN, I., & BRAATZ, R. D. **High resolution algorithms for multidimensional population balance equations.** *AIChE Journal*, 50(11), 2738–2749. 2004
- HIDY, G. M. & BROCK, J. R. **The Dynamics of Aerocolloidal Systems.** Pergamon, Oxford. 1970
- HULBURT, H. M., & KATZ, S. **Some problems in particle technology. A statistical mechanical formulation.** *Chemical Engineering Science*, 19(8), 555–574. 1964
- KAPIO, J.P., SOMERSALO, E. **Computational and Statistical Methods for Inverse Problems,** Springer, Berlin. 2004
- KAPUR, P.C., FUERSTENAU, D.W. **A coalescence model for granulation.** *I & C Process Design and Development*, 56-62. 1969
- PETERSON, T. W., GELBARD, F., & SEINFELD, J. H. **Dynamics of source-reinforced, coagulating, and condensing aerosols.** *Journal of Colloid And Interface Science*, 63(3), 426–445. 1978
- RAMABHADRAN, T. E., PETERSON, T. W., & SEINFELD, J. H. **Dynamics of aerosol coagulation and condensation.** *AIChE Journal*, 22(5), 840–851. 1976
- RAMKRISHNA, D. **Population Balances: Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering.** New York: Academic. 2000

SALMAN, A.D., HOUNSLOW, M.J., SEVILLE, J.P.K. **Handbook of Powder Technology Vol.11 Granulation**. 2007

SCOTT, W. T. **Analytical Studies of Cloud Droplet Coalescence**. *Journal of the Atmospheric Sciences* 1968

SLAMA, M., SHAKER, M. O., ALY, R., & SIRWAH, M. **Applications of aerosol model in the reactor containment**. *Journal of Radiation Research and Applied Sciences*, 7(4), 499–505. 2014

## ÍNDICE REMISSIVO

### A

Aedes aegypti 181, 182, 189, 190, 191  
Algoritmo 37, 49, 64, 65, 69, 76, 77, 78, 90, 92, 192, 197, 199, 201, 210  
Análise do coeficiente de sensibilidade 66, 67, 78, 83, 91, 93  
Atividade alelopática 164, 165, 166, 171  
Atividade fitotóxica 173, 174

### B

Balanço Populacional 59, 60, 61, 62, 63, 70, 73, 74, 75, 83, 84

### C

Carvão mineral 26, 28, 32, 33, 220  
Coeficiente de aglomeração 62, 63, 65, 66  
Comportamento reológico 34, 36, 38, 40, 41, 42, 43  
Concentrador solar 1, 3, 4, 5, 9, 11  
Concentrador solar biangular 1, 3, 4, 11  
Conselho Regional de Química 152, 153  
Curva de ruptura 85, 86, 87, 89, 96, 97, 192, 194, 201, 202  
Custos de produção 140, 141, 142, 143, 144, 145, 148, 150

### E

Energia solar 1, 3, 5, 6, 10, 11  
Energias renováveis 1, 2  
Ensino 32, 123, 124, 125, 126, 127, 128, 129, 130, 131, 132, 133, 134, 136, 137, 138, 139, 159, 160, 161, 162, 164, 173  
Extração sólido-líquido 1, 2, 3, 4

### F

Fibras de coco 100, 102, 103, 105, 106, 107, 109, 112, 113, 114, 115  
Fiscalização do CRQ 152, 153

### G

Gaseificação do carvão 26, 32

### H

Hidrólise de matérias graxas 44, 45, 46, 56

### I

Imobilização de lipase 12, 21, 23

### J

Jogos didáticos 130, 131, 133, 134, 138

## L

Larvicidal activity 181, 183, 186, 187, 190

Lixiviação 1, 2, 3, 5, 6

Lixiviação assistida por energia solar 5, 6

## M

Maceração 40, 100, 101, 102, 105, 106, 107, 108, 109, 110, 111, 112, 113, 114, 168

Modelo de balanço populacional 62, 63, 73, 83

Monte Carlo via Cadeia de Markov 59, 60, 64, 67, 70, 73, 74, 76, 79, 83, 85, 89, 97

## O

Óleo de Baru 1, 6, 9, 10

Oxidação do tolueno 116, 121

## P

Perda ao fogo 26, 27, 29, 30, 31, 32

Polpa de cupuaçu 34, 36, 37, 38, 40, 41, 42

Processo de adsorção 85, 86, 87, 89, 97, 192, 194

## Q

Quiz educativo 159, 160, 161, 162

## R

Reação de dupla troca 123, 125

Reamostragem por importância 192

Resíduo agroindustrial 12, 14

Resíduo agroindustrial do café 12

## S

Simulador de processos 116, 117

Sistemas particulados 10, 59, 60, 65, 70, 151

Superpro Designer 140, 141, 143, 144, 148, 150

Sustentabilidade 1, 114

## T

Tabela Periódica 130, 131, 133, 134, 136, 137, 138, 139, 159, 160, 161, 163

Taxa de crescimento por coagulação 66

## U

Unidade experimental de extração sólido-líquido 4

## V

Variáveis de estado 44, 45, 47, 51, 54, 55, 56, 57, 74, 75, 77, 78, 80, 81, 82, 83, 85, 192, 194, 196, 202, 203, 206, 210, 218, 224, 225, 227

 **Atena**  
Editora

**2 0 2 0**