

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ

LUIS GUSTAVO MÉDICE ARABEL COSTA

**ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS REOLÓGICOS DO SUCO DE LARANJA
INDUSTRIALIZADO ADICIONADO DE NANOPARTICULAS DE CURCUMINA**

CAMPO MOURÃO

2023

LUIS GUSTAVO MÉDICE ARABEL COSTA

**ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS REOLÓGICOS DO SUCO DE LARANJA
INDUSTRIALIZADO ADICIONADO DE NANOPARTICULAS DE CURCUMINA**

**Estimation of the rheological parameters of industrially processed orange juice
supplemented with curcumin nanoparticles**

Trabalho de conclusão de curso de graduação
apresentada como requisito para obtenção do título de
Bacharel em Engenharia Química da Universidade
Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR).
Orientador(a): Odinei Hess Gonçalves.
Coorientador(a): Angela Maria Gozzo.

CAMPO MOURÃO

2023



[4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

Esta licença permite remixe, adaptação e criação a partir do trabalho, para fins não comerciais, desde que sejam atribuídos créditos ao(s) autor(es). Conteúdos elaborados por terceiros, citados e referenciados nesta obra não são cobertos pela licença.

LUIS GUSTAVO MÉDICE ARABEL COSTA

**ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS REOLÓGICOS DO SUCO DE LARANJA
INDUSTRIALIZADO ADICIONADO DE NANOPARTICULAS DE CURCUMINA**

Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação
apresentado como requisito para obtenção do título de
Bacharel em Engenharia Química da Universidade
Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR).

Data de aprovação: 12/junho/2023

Odinei Hess Gonçalves
Doutorado
Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Evandro Bona
Doutorado
Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Patrícia Casarin de Lima
Mestrado
Universidade Tecnológica Federal do Paraná

CAMPO MOURÃO

2023

Dedico este trabalho a minha mãe, que me deu todo o suporte para concluir este curso, a minha irmã que sempre acreditou no meu potencial e a mim por toda a força, empenho e dedicação para chegar aqui.

AGRADECIMENTOS

Este trabalho tem um significado enorme para mim, pois é a representação da vitória de muitas batalhas em minha vida, e como toda batalha não conquistei essa sozinho e certamente contei com o apoio de muitas pessoas, desta forma faço uso deste espaço para prestar minha singela homenagem a todos que tornaram este sonho possível. Primeiramente, agradeço a minha mãe Maestelli Menezes Médice que me apoiou ainda quando falhei em entrar no curso, e me apoia agora nesta etapa de conclusão, pois sem ela eu jamais teria chegado aqui. Consequente agradeço a minha irmã Melissa Mirela Médice, que me incentivou a sonhar, ensinou a lutar e trouxe sempre um olhar analítico para minha vida acompanhada de uma perspectiva do copo meio cheio. Agradeço a minha orientadora, Fernanda Vitória Leimann, a quem tanto admiro e tenho respeito pela profissional que é, com profundo talento para educar, acompanhada de um olhar humanizado para situações sociais que envolvem a rotina de um professor, agradeço a oportunidade de tê-la conhecido ainda no início da graduação quando iniciei uma jornada de imenso aprendizado ao seu lado. Aproveito para agradecer a minha coorientadora Angela Maria Gozzo e ao Professor Odinei Hess Gonçalves que me auxiliou para a conclusão deste trabalho. Agradeço aos meus amigos de faculdade, que estiveram ao meu lado nessa caminhada, mas em especial ao meu amigo Jonatas de Medeiros Garcia, que tive o prazer de conhecê-lo na faculdade e acompanhar seu crescimento, com toda certeza fez meus dias árduos nessa caminhada tornarem-se mais prazerosos. Por fim, agradeço a todos que fizeram parte de minha vida neste curto período de grande aprendizado, quero que sintam-se abraçados, pois de alguma forma cada um foi de extrema importância para o meu crescimento.

RESUMO

O Brasil foi responsável por produzir aproximadamente 60% do volume mundial de suco de laranja entre 2020 e 2022. A *Alicyclobacillus acidoterrestris* é definida como uma bactéria capaz de deteriorar o suco de laranja industrializado, e é apontado como um grande problema para a indústria de bebidas. Desta forma visando solucionar esta problemática, foram estudados os efeitos nos parâmetros reológicos a partir da adição de nanopartículas de curcumina no suco de laranja concentrado. A mudança de parâmetros reológicos no suco de frutas pode afetar diretamente as operações unitárias presentes nas rotinas industriais, como o bombeamento. Dessa forma o presente trabalho visou avaliar a mudança dos parâmetros reológicos do suco de laranja concentrado adicionado de nanopartículas de curcumina em 3 concentrações distintas, através de duas metodologias de otimização: Otimização por Enxame de Partículas (PSO) e Curve Fitting, no Matlab. Foram utilizados três modelos matemáticos para avaliação dos parâmetros reológicos do suco de laranja concentrado, sendo eles: Lei de Potência, Hershell Bulkley e Casson. Alguns parâmetros reológicos, como a viscosidade, apresentaram alteração com o aumento da concentração de nanopartículas no suco de laranja concentrado. A otimização por enxame de partículas apresentou um ajuste similar ao obtido pelo Curve Fitting para os parâmetros avaliados com valores de RMSE aproximados, equivalentes a 2,626 e 2,606 para a menor concentração testada, respectivamente. O modelo de Hershell Bulkley apresentou um melhor ajuste para os parâmetros reológicos em ambos métodos de otimização estudados.

Palavras-chave: PSO; Levenberg-Marquardt; Reologia; Otimização.

ABSTRACT

Brazil was responsible for approximately 60% of the global orange juice production between 2020 and 2022. *Alicyclobacillus acidoterrestris* is defined as a bacterium capable of deteriorating industrialized orange juice, and it is recognized as a major issue for the beverage industry. Therefore, in order to address this problem, the effects on rheological parameters were studied by adding curcumin nanoparticles to concentrated orange juice. Changes in rheological parameters in fruit juice can directly affect unit operations in industrial routines, such as pumping. Thus, this study aimed to evaluate the changes in rheological parameters of concentrated orange juice with the addition of curcumin nanoparticles at three distinct concentrations, using two optimization methodologies: Particle Swarm Optimization (PSO) and Curve Fitting, in Matlab. Three mathematical models were employed to assess the rheological parameters of concentrated orange juice: Power Law, Herschel-Bulkley, and Casson. Some rheological parameters, such as viscosity, exhibited alterations with increasing nanoparticle concentration in the concentrated orange juice. Particle swarm optimization demonstrated a similar fit to that obtained by curve fitting for the evaluated parameters, with approximate root mean square error (RMSE) values of 2.626 and 2.606 for the lowest tested concentration, respectively. The Herschel-Bulkley model showed a better fit for the rheological parameters in both optimization methods studied.

Keywords: PSO; Levenberg Marquardt; Rheology; Optimization.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Bando de pássaros em um espaço de busca	10
Figura 2 – Partícula no espaço de busca do algoritmo PSO	11
Figura 3 – Código ilustrativo do PSO	12
Figura 4 – Análise reológica para diferentes concentrações de nanopartícula de curcumina (0 MIC: suco sem adição de nanopartículas; 1 MIC: 125 µg/mL; 5 MIC: 625 µg/mL; 10 MIC 1250 µg/mL de nanopartículas)	21
Figura 5 – Gráfico Tensão versus taxa de cisalhamento para o suco de laranja com concentração equivalente a 0 MIC de nanopartículas	27
Figura 6 – Gráfico Tensão versus taxa de cisalhamento para o suco de laranja com concentração equivalente a 1 MIC de nanopartículas	27
Figura 7 – Gráfico Tensão versus taxa de cisalhamento para o suco de laranja com concentração equivalente a 5 MIC de nanopartículas	28
Figura 8 – Gráfico Tensão versus taxa de cisalhamento para o suco de laranja com concentração equivalente a 10 MIC de nanopartículas	28

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Ajuste realizado pelo Curve Fitter para o modelo de Lei de Potência.....	23
Tabela 2 – Ajuste para o modelo de Hershell Bulkley realizado pelo Curve Fitter com intervalo de confiança equivalente a 95%	23
Tabela 3 – Ajuste para o modelo de Casson realizado pelo Curve Fitter com intervalo de confiança equivalente a 95%.....	23
Tabela 4 – Comparativo para o RMSE dos diferentes modelos ajustados com intervalo de confiança equivalente a 95%	23
Tabela 5 – Ajuste para o modelo de Lei de Potência realizado pelo algoritmo PSO com intervalo de confiança equivalente a 95%	24
Tabela 6 – Ajuste para o modelo de Hershell Bulkley realizado pelo algoritmo PSO com intervalo de confiança equivalente a 95%	25
Tabela 7 – Ajuste para o modelo de Casson realizado pelo algoritmo PSO com intervalo de confiança equivalente a 95%	25
Tabela 8 – Comparativo entre os modelos de melhor ajuste do curve fitter e PSO	26

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	OBJETIVOS	13
2.1	Objetivo geral.....	13
2.2	Objetivos específicos.....	13
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	14
3.1	Otimização de parâmetros.....	14
3.2	Determinação de parâmetros por regressão linear e não linear	15
3.3	Otimização por enxame de partículas (PSO)	15
3.4	Algoritmo de Levenberg-Marquardt.....	19
3.5	Modelos matemáticos de reologia	19
3.6	Reologia de suco de frutas.....	22
4	METODOLOGIA	23
4.1	Obtenção das nanopartículas de curcumina	23
4.2	Coleta de dados reológicos.....	23
4.3	Modelagem matemática e simulação dos parâmetros reológicos...24	
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	25
6	CONCLUSÃO	34
	REFERÊNCIAS.....	35

1 INTRODUÇÃO

Segundo dados do Escritório Técnico de Estudos Econômicos do Nordeste (ETENE) em 2020 e 2021, o Brasil foi responsável por aproximadamente 33% da produção mundial de laranja, e 62% do volume global do suco da mesma. O suco de laranja é o suco de frutas mais consumido no mundo todo e representa cerca de 35% entre todos os sucos de frutas. As frutas, em especial o suco, ocupam um lugar importante na dieta dos seres humanos. Segundo um estudo realizado por Sourri *et al.* (2022), sucos resultantes de frutas são considerados produtos de prateleira estáveis devido ao seu baixo pH que cria uma condição desfavorável e impede o crescimento da grande maioria das bactérias. Entretanto, bactérias do gênero *Alicyclobacillus* são termoacidófilas e capazes de formar endósporos, o que permite esses microrganismos causarem deterioração nos sucos de frutas pasteurizados comercialmente. Ferreira *et al.* (2022) definem a *Alicyclobacillus acidoterrestris* como uma bactéria capaz de deteriorar o suco de laranja industrializado, e vem gerando grandes problemas para a indústria de bebidas. A revisão protagonizada por Pornpukdeewattana, Jindaprasert e Massa (2019), aponta que os esporos de *Alicyclobacillus acidoterrestris* possuem a capacidade de sobreviver a processos de pasteurização comercial, de germinar e crescer em ambientes de pH baixo e de produzir compostos voláteis e de odor desagradável, como o guaiacol, afetando características sensoriais de sucos de frutas.

O método de processamento térmico para controle de crescimento de organismos patogênicos e deteriorantes é o mais utilizado hoje na indústria para tratamento de alimentos e embalagens, entretanto é um complicador quanto a alteração das características físicas e químicas do produto industrial. Métodos alternativos são buscados pela indústria alimentícia para inativação de microrganismos, visando minimizar os impactos na qualidade sensorial e nutritiva dos produtos alimentícios (SINGH; SINGH; RAMASWAMY, 2017). Gouma *et al.* (2020) realizaram a comparação entre a pasteurização do suco de cenoura combinando UV-C e calor suave com o tratamento térmico convencional. Mandal, Singh e Singh (2018) estudaram os desenvolvimentos recentes na tecnologia de descontaminação por plasma frio na indústria alimentícia. É notório que a busca por novos métodos de inativação do *Alicyclobacillus* através de bioativos naturais vem sendo estudado como solução alternativa para as indústrias produtoras de sucos cítricos. Dutra *et al.* (2019)

avaliaram a aplicação do óleo de orégano (*Origanum Vulgare*) como um inativador para diferentes isolados desta bactéria. Ferreira *et al.* (2020) avaliaram o efeito do tratamento ultravioleta (UV-C) combinado com nisina no suco de laranja industrializado em esporos de *Alicyclobacillus acidoterrestris*. Pascoli *et al.* (2018) estudaram o controle do crescimento de *Alicyclobacillus acidoterrestris* em suco de laranja comercial, fazendo o uso de extratos de *Piperaceae*. Dutra *et al.* (2021), avaliaram o uso da curcumina nanoencapsulada contra células vegetativas e esporos de *Alicyclobacillus spp.* em suco de laranja industrializado.

A curcumina é um polifenol, extraído da *Curcuma longa*, e vem sendo objeto de diversos estudos, por suas amplas características de aplicação. Giorgano e Tommonaro (2019) relatam em seus estudos que a curcumina isolada ou aliada a outros agentes, pode representar um fármaco eficaz para a terapia do câncer. Hassanzadeh *et al.* (2020) avaliaram o uso da curcumina como um bioativo com efeitos antiinflamatórios e antioxidante. Dutra *et al.* (2021) apontaram a curcumina encapsulada como um bioativo com atividade antimicrobiana e antibacteriana contra patógenos (*Staphylococcus aureus*) e bactérias deteriorantes (*Alicyclobacillus acidoterrestris*), bem como atividade antioxidante e citotóxica contra quatro linhagens de carcinoma.

Visando maior proteção do bioativo e otimização da bioatividade, a nanotecnologia vem se tornando cada vez mais utilizada nas ciências de alimentos. Sistemas com nanoestruturas promovem diferentes e amplos benefícios no uso de bioativos, como melhorar absorção, proteger contra degradação térmica, promover e ampliar a solubilidade, estabilidade e biodisponibilidade do composto de interesse (BAZANA; CODEVILLA; MENEZES, 2019). Dutra *et al.* (2021) apontaram que a curcumina nanoencapsulada apresentou maior atividade antimicrobiana e antibacteriana quando comparada com a curcumina em sua forma livre.

Diferentes métodos e formas são utilizados para avaliar os parâmetros de um objeto de estudo. Uma maneira eficiente de se avaliar esses parâmetros é através do algoritmo de otimização por enxame de partículas (PSO) (CHAUHAN *et al.*, 2018). O PSO é um método de otimização heurística, baseado em regras evolutivas empíricas que frequentemente imitam estratégias de otimização bem sucedidas encontradas na natureza (SCHWAAB *et al.*, 2008). O algoritmo PSO é inicializado com uma população de soluções aleatórias, chamadas partículas. Cada partícula está associada a uma velocidade correspondente que determina a direção e a distância de seu voo, como

pássaros em direção a suas presas. Cada partícula segue a partícula ótima para voar pelo espaço de busca na velocidade correspondente, e as velocidades são atualizadas de acordo com seus comportamentos históricos a cada voo, até que a solução ótima seja encontrada. Por fim, o uso do método de Gauss–Newton otimiza o valor inicial calculado pelo algoritmo PSO, o que melhora a eficiência computacional e a precisão do algoritmo (LI; ZHONG, 2019).

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo geral

Estimar os parâmetros reológicos do suco de laranja industrializado adicionado de nanopartículas de curcumina com o uso da otimização por Enxame de Partículas (PSO).

2.2 Objetivos específicos

- Obter as nanopartículas de curcumina com ação antimicrobiana através da metodologia de dispersão sólida;
- Adicionar as nanopartículas de curcumina ao suco industrializado em concentrações relativas à concentração inibitória mínima determinadas previamente;
- Analisar experimentalmente a reologia dos sucos adicionados de nanopartículas em diferentes concentrações;
- Otimizar os parâmetros reológicos coletados pelo método de Enxame de Partículas;
- Comparar os dados obtidos com métodos tradicionais de estimativa de parâmetros.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1 Otimização de parâmetros

Modelos matemáticos são amplamente utilizados pela comunidade científica para auxiliar a interpretação de dados experimentais, simulação e otimização dos parâmetros envolvidos em processos. Em suma, estes modelos matemáticos são contemplados por variáveis dependentes, variáveis independentes e parâmetros numéricos. Buscar por uma otimização dos parâmetros do modelo, acarreta em uma melhor correlação entre as variáveis dependentes e independentes (JI *et al.*, 2022).

Os problemas de otimização de parâmetros para modelos matemáticos têm mostrado mais complexidade no decorrer dos anos, necessitando assim de algoritmos mais avançados para solucionar estes problemas, desta forma, o estudo de otimização tem sido uma pesquisa com intensa atividade no meio científico. Em geral, o principal objetivo dos problemas de otimização é encontrar o mínimo e o máximo da função de interesse. Sendo que o Algoritmo Genético (AG) e a Otimização por Enxame de Partículas (PSO), são os métodos de otimização de maior popularidade para estes problemas, visto que estes métodos empregam uma população de indivíduos para resolvê-los (TOUSHMALANI, 2013).

Para desenvolvimento e análises, o MATLAB é um software extremamente requisitado na indústria, visto que esta pode ser uma ferramenta altamente produtiva. Esta ferramenta, oferece uma gama de soluções especializadas adicionais que são denominadas de “caixa de ferramentas”. A caixa de ferramentas estende soluções para uma ampla variedade de áreas de estudo como por exemplo processamento de sinais, sistemas de controle, redes neurais e simulação. A caixa de ferramentas do Curve Fitting é capaz de oferecer tanto soluções com interface gráfica ao usuário, quanto para aplicações de ajuste de curva. O curve fitting usa diferentes métodos para estimar os coeficientes desconhecidos de um modelo que relaciona os dados de resposta aos dados da variável de entrada. Vários métodos de ajuste possibilitam a minimização da soma dos mínimos quadrados, como as equações de Levenberg-Marquardt e Gauss-Newton. O algoritmo de Levenberg-Marquardt é popular devido a sua eficácia em modelos não lineares com uma ampla variedade de valores iniciais (WEN *et al.*, 2012).

3.2 Determinação de parâmetros por regressão linear e não linear

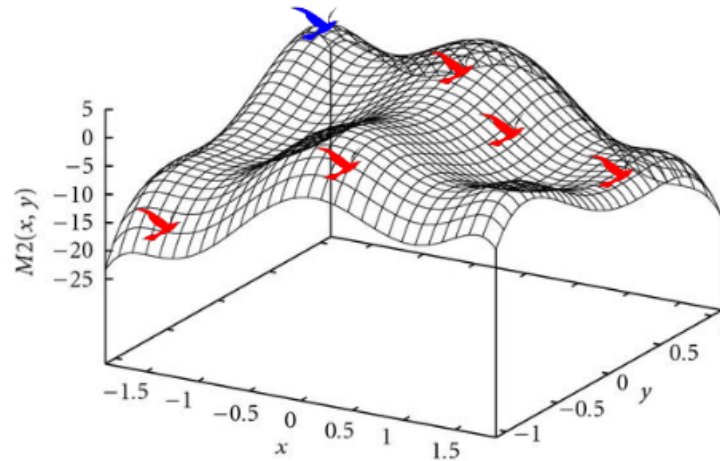
Mesmo existindo diferentes métodos para determinação de parâmetros de cinética ou isothermas, o modelo de regressão linear é o mais utilizado, isso porque aborda de maneira convencional a determinação destes parâmetros baseando-se na distribuição gaussiana de erro em cada ponto e possibilitando a linearização de equações não lineares para avaliação das expressões que permitem o melhor ajuste. Entretanto, de acordo com Myers (1990), algumas mudanças implícitas na estrutura do erro podem violar a sua variância e as suposições de normalidade, causados pela linearização de equações não lineares. Métodos mais rigorosos e complexos, como métodos não lineares de otimização podem apresentar melhores ajustes de parâmetros para alguns resultados experimentais. Métodos não lineares, resultam em diferentes conjuntos de parâmetros para diferentes avaliações da função de erro, portanto para comparar de maneira eficiente diferentes conjuntos é conveniente utilizar a soma dos erros normalizados para cada conjunto de parâmetros. Segundo Spiegel *et al.* (2013), R^2 é uma medida para a correlação linear, que pode desta forma explicitar o quão bem uma regressão linear se ajusta aos dados, por isso esta é uma medida amplamente utilizada para a determinação do melhor ajuste. A distribuição de erro não é alterada para métodos não lineares, caracterizando assim uma vantagem para este quando comparado com uma abordagem de linearização.

3.3 Otimização por enxame de partículas (PSO)

O algoritmo denominado *Particle Swarm Optimization* (PSO), ou otimização por enxame de partículas em português, teve suas primeiras linhas desenvolvidas por dois pesquisadores em 1995, Kennedy e Eberhart. A motivação para elaboração do algoritmo PSO, partiu da observação do comportamento de pássaros que voam em direção a um líder que possui maior proximidade da comida, e de cardumes de peixes. Desta forma o comportamento social dos pássaros pode ser representado por operações do algoritmo que buscam a resolução de um problema de otimização, assim o enxame de pássaros é transcrito em um enxame de partículas, e cada partícula pode representar uma solução diferente. O enxame de partículas é capaz de pesquisar o espaço de dimensões previamente inseridas, possibilitando o encontro da melhor solução de otimização através do intervalo de controle fornecido. Este algoritmo tem atraído atenção de muitos pesquisadores, dado sua simples

implementação e poucos parâmetros de controle, além de fácil hibridização com outros algoritmos de otimização (SHAMI *et al.*, 2022).

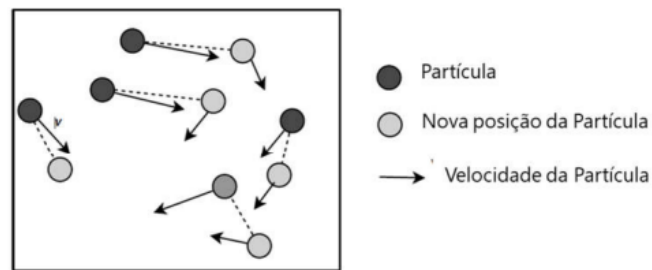
Figura 1 – Representação do bando de pássaros em um espaço de busca



Fonte: PACHECO (2016)

Para problemas de otimização, várias soluções para o problema constituem uma população, para o algoritmo PSO um enxame, e cada solução é então um organismo social, para o algoritmo uma partícula. Seu funcionamento, começa a partir da geração de uma população de partículas aleatória, cada uma contendo uma solução para o problema de otimização, composta por três parâmetros: posição, velocidade e adequação. A partir de cada iteração as partículas mudam sua posição baseando-se na velocidade calculada, considerando a melhor posição intrínseca à partícula e à melhor posição intrínseca ao exame, indicada em iterações anteriores. Assim, o algoritmo é executado até que as condições de parada sejam alcançadas (SILVA, 2021).

Figura 2 – Representação do PSO



Fonte: Adaptado de Kennedy e Eberhart (1995)

Cada partícula sobrevoa o espaço de busca por soluções e é composto por três vetores: Posição no espaço, representado pelo vetor \mathbf{x}_i nas Equações 1 e 2; sua melhor posição encontrada até a interação atual, representado por \mathbf{p}_i na Equação 1; e sua velocidade para a trajetória de busca, representado por V_i nas Equações 2. Ao executar o algoritmo do PSO, a posição e a velocidade de cada partícula são inicializadas aleatoriamente. Posteriormente, uma função objetivo avalia o valor fitness de cada partícula, afim de encontrar os dois melhores valores para aquela iteração, comumente denominados $pBest$ e $gBest$. Desta forma, o valor de $gBest$, influencia o movimento da partícula em direção à melhor posição encontrada pelo enxame, enquanto $pBest$ é intrínseco a partícula, movimentando-a em direção a melhor posição encontrada por cada uma. Assim, cada partícula é atraída para a localização de $gBest$ (melhor posição encontrada pelo enxame). São duas equações que dão norte a velocidade e a posição de cada partícula, sendo a Equação 1 responsável pela atualização da velocidade e a Equação 2 pela atualização da posição de cada partícula. O termo w na Equação 1, representa a velocidade inercial da partícula, os termos v_{id} e x_{id} , são referentes respectivamente a velocidade e posição da partícula “i”. Os termos p_{id} e p_{gd} , respectivamente referem-se à posição que foi encontrado o melhor valor de solução da partícula, e a posição que foi encontrado o melhor valor de solução entre todas as partículas, até a iteração atual. O termo c_1 , contribui para a autoexploração da partícula e c_2 contribui para o movimento da partícula no sentido do deslocamento do enxame, respeitando o espaço de busca. Por fim, r_1 e r_2 referem-se a valores aleatórios distribuídos no intervalo $[0,1]$ e gerados a cada interação através de uma função densidade de probabilidade, assim permitindo uma atualização da dimensão individual (PAIVA, 2018).

$$v_{id} = w * v_{id} + c_1 * r_1 (p_{id} - x_{id}) + c_2 * r_2 (p_{gd} - x_{id}) \quad \text{Equação 1}$$

$$x_{id} = x_{id} + v_{id} \quad \text{Equação 2}$$

As etapas supracitadas ficam perceptíveis no algoritmo genérico apresentado pela figura 3, na linha 2 ocorrendo a inicialização de valores aleatórios para velocidade e posição, posteriormente calculando os valores de pBest e gBest, até atingir a condição de parada, e por fim atualizando os valores para a velocidade e posição através das Equações 1 e 2, respectivamente (Paiva, 2018).

Figura 3 – Algoritmo genérico do PSO

Algoritmo 1 – Pseudocódigo da PSO original

```

01: para cada partícula i em S faça
02:   inicializa aleatoriamente velocidade e posição
03: fim para
04: enquanto critério de parada não satisfeito faça
05:   para cada partícula i em S faça
06:     calcula o valor de fitness
07:     se  $fit(x_{id}) < fit(pBest_i)$  então
08:        $pBest_i \leftarrow x_{id}$ 
09:     fim se
10:     se  $fit(pBest_i) < fit(gBest)$  então
11:        $gBest \leftarrow pBest_i$ 
12:     fim se
13:   fim para
14:   para cada partícula i em S faça
15:     calcula velocidade usando Equação 4
16:     atualiza posição usando Equação 5
17:   fim para
18: fim enquanto

```

Fonte: PAIVA (2018)

Em suma, o algoritmo PSO baseia-se na atualização de posição e velocidade no espaço de busca previamente determinado, até que uma solução satisfatória seja alcançada (PACHECO, 2016).

Segundo informações explicitadas pelo “Help Center” do Matlab, A função do PSO, segue o algoritmo proposto por Kennedy e Eberhart (1995), com algumas alterações propostas por Montes e Coello (2011) e Pedersen (2010). Seu funcionamento é similar ao descrito anteriormente, inicializando com a criação de partículas iniciais e atribuindo velocidades iniciais a cada uma. Então o algoritmo avalia a função objetivo em cada posição da partícula para determinar os melhores valores obtidos da função e para a localização. Com base na velocidade atual, as

melhores localizações individual e dos vizinhos, o algoritmo escolhe novas velocidades. Posteriormente o algoritmo atualiza as localizações das partículas, velocidades e vizinhos a partir da Equação 1 e 2. Assim, as iterações continuam até que o algoritmo atinja o critério de parada previamente estabelecido.

3.4 Algoritmo de Levenberg-Marquardt

O algoritmo de Levenberg-Marquardt surgiu em 1960 com a proposta de resolver problemas de mínimos quadrados não lineares. Problemas como este surgem através do ajuste de um modelo matemático parametrizado a um conjunto de pontos de dados, assim minimizando um objetivo a soma dos quadrados dos erros entre a função do modelo matemático e um conjunto de pontos dados. Para modelos lineares, o objetivo pode ser minimizado em relação aos parâmetros por meio de uma equação matricial linear. Entretanto, se uma função de ajuste não é linear em seus parâmetros, o problema dos mínimos quadrados requer um algoritmo de solução iterativa, visto que estes reduzem a soma dos quadrados dos erros entre a função do modelo e os pontos de dados por meio de uma sequência de atualizações escolhidas para os valores dos parâmetros do modelo (GAVIN, 2022).

O método de Levenberg-Marquardt pode ser considerado uma combinação de um método com descida íngreme com o método de Gauss-Newton. Quando a solução está longe do mínimo local, o algoritmo se comporta como um método de descida íngreme, com uma convergência lenta e garantida. Quando a solução está próxima do mínimo local, exibe uma rápida convergência, assim comportando-se como o método de Gauss-Newton. Este algoritmo é uma técnica iterativa capaz de localizar um mínimo local de uma função objetivo expressa como a soma dos quadrados das diferenças entre as equações e os valores experimentais (LE *et al.*, 2012).

3.5 Modelos matemáticos de reologia

A reologia é uma ciência dedicada a estudar a deformação de um fluxo de matéria, dessa forma a consistência de um fluido newtoniano como a água ou sucos vegetais claros podem ser classificados quanto a sua viscosidade. O comportamento reológico de sucos vegetais e concentrados podem ser descritos por diferentes modelos matemáticos, dependendo da natureza do fluido, entretanto a maioria dos

alimentos líquidos não seguem o comportamento newtoniano simples devido a sua viscosidade ser independente da taxa e tensão de cisalhamento, bem como não são constantes com a mudança de temperatura (SALEHI, 2021).

A reologia de produtos alimentícios é uma importante ferramenta para manusear, processar, controlar a qualidade e obter avaliações sensoriais destes. A caracterização reológica de produtos processados industrialmente é de suma importância para obter parâmetros de controle da engenharia, como coeficientes de transferência de calor e massa, design e avaliação de processos de fabricação, bem como estratégias de embalagem e armazenamento. A fim de evitar o superdimensionamento de unidades e o desperdício de recursos econômicos, é necessário que se obtenha um projeto adequado de unidades operacionais (DIAMANTE; UMEMOTO, 2015).

Na indústria o estudo reológico do fluido é de suma importância para determinar cálculos do processo com tubulações, bombas, extrusoras, misturadores e trocadores de calor. Além desses importantes parâmetros para um processo já conhecido, é interessante que para o desenvolvimento de novos produtos estes fatores sejam estabelecidos, para possibilitar o desenvolvimento do projeto do processo (KIRITI; AKYILDIZ, 2022).

Tensão e deformação são os principais termos que permite a realização de um estudo reológico, sendo tensão uma medida de força por unidade de área e deformação uma medida de deformação por comprimento, intrínseca a um material. A direção da força determina o tipo de tensão aplicada sobre a superfície, sendo que quando esta possui direção perpendicular a superfície de atuação, denomina-se como tensão normal e quando a direção de atuação da força é paralela à superfície, esta é denominada tensão de cisalhamento. Por fim, a direção da tensão aplicada determina o tipo de deformação que um material sofre (KIRIT; AKYILDZ, 2022).

Diferentes modelos foram desenvolvidos para descrever o comportamento reológico de fluidos alimentícios, como as equações de Newton (Equação 3), Lei de Potência (Equação 4), Herschel Bulkley (Equação 6) e Casson (Equação 7), que são utilizadas para descrever o comportamento de fluidos quanto ao fluxo. Assim a relação linear entre tensão de cisalhamento e taxa de cisalhamento é denominado como newtoniana, como apresentado pela Equação 3 (SALEHI, 2021).

$$\tau = \mu * \gamma$$

Equação 3

A tensão de cisalhamento é apresentada na equação pelo termo τ , e a relação linear entre μ a viscosidade absoluta (Pa.s) e γ taxa de cisalhamento (s^{-1}), para fluidos de comportamento Newtoniano. Em contrapartida, para descrever o comportamento de fluidos não newtonianos usa-se os modelos de Lei de Potência, Herschel Bulkley e Casson (SALEHI, 2021).

$$\tau = k_p * \gamma^{\eta_p} \quad \text{Equação 4}$$

A Equação 4 descreve o modelo da Lei de Potência, e possui τ como tensão de cisalhamento, k_p como coeficiente de consistência da Lei de Potência medido em Pa.s, γ sendo a taxa de cisalhamento (s^{-1}) e η_p é o índice de comportamento de fluxo da lei de potência. Para o modelo de Lei de Potência as duas constantes apresentadas, k_p e η_p , são necessárias para caracterizar o comportamento do fluxo, sendo o valor de k_p correspondente a viscosidade absoluta dos fluidos newtonianos. O valor de n indica o comportamento do fluido, quando $n = 1$, o fluido apresentará um comportamento newtoniano, quando n menor que 1 o fluido possuirá comportamento de um pseudoplástico, quando n for maior que 1, o fluido se comportará como dilatante (SALEHI, 2021).

$$\tau = \tau_{0H} + k_H * \gamma^{\eta_H} \quad \text{Equação 5}$$

A Equação 5 refere-se ao modelo de Herschel Bulkley derivada do modelo de Lei de Potência adicionada do limite de escoamento. Neste modelo k_H representa o coeficiente de consistência medido em Pascal por segundo (Pa.sn), τ_{0H} é a tensão de escoamento medida em Pascal (Pa) e η_H é o índice de comportamento de fluxo para o fluido (SALEHI, 2021).

$$\tau^{0,5} = \tau_{0c}^{0,5} + \eta_c * \gamma^{0,5} \quad \text{Equação 6}$$

Por fim, o modelo de Casson é representado pela Equação 6, onde τ é dado como tensão de cisalhamento, η_c como viscosidade plástica (Pa.s), τ_{0c} como tensão de escoamento (Pa), e γ sendo a taxa de cisalhamento (s^{-1}) (SALEHI, 2021).

3.6 Reologia de suco de frutas

Os sucos de frutas são suspensões complexas e heterogêneas de grandes partículas insolúveis e coloidais formadas por fragmentos de tecidos celulares dispersos em um meio rico em compostos solúveis como açúcares, ácidos orgânicos, pectinas, compostos fenólicos e sais (LÓPEZ *et al.*, 2008).

As interações entre partículas, partícula e água e partícula e açúcar, são os principais fatores que governam a estabilidade e o comportamento reológico da dispersão de partículas sólidas em solução de açúcar (BENÍTEZ; GENOVESE; LOZANO, 2009). Além disso, as interações físico-químicas estabelecidas entre as partículas de maneira direta, estão ligadas à composição bioquímica do suco de frutas, principalmente pela presença de polissacarídeos (pectina, celulose e hemicelulose) (SILA *et al.*, 2009), proteínas (GALANT *et al.*, 2014), lipídios e solutos de baixo peso molecular como açúcares e íons (NIU *et al.*, 2008).

A aplicação de compostos livres ou encapsulados no suco de frutas pode afetar a reologia, como aponta o estudo elaborado por Marsanasco *et al.* (2015), onde realizaram a aplicação de constituintes bioativos em lipossomas incorporados ao suco de laranja para avaliar os efeitos em sua estabilidade térmica, propriedades reológicas e organolépticas. Afkhami, Goli e Keramat (2018) estudaram o enriquecimento do suco de laranja funcional com extrato polifenólico encapsulado de resíduos de limão e hesperidina, onde identificaram mudança no comportamento reológico a partir de formulações diferentes. Narin *et al.* (2020), estudaram a encapsulação da proteína de ervilha em uma matriz de alginato pelo método de gelificação a frio e uso das cápsulas em suco de frutas e puderam observar que o comportamento reológico se manteve newtoniano, entretanto o parâmetro da viscosidade sofreu aumento para os diferentes sucos testados.

4 METODOLOGIA

4.1 Obtenção das nanopartículas de curcumina

As nanopartículas de curcumina foram obtidas de acordo com a metodologia por dispersão sólida proposta por (DUTRA *et al.*, 2021). Assim, foram dispostos 30 mg de Tween 80 em 83 mL de álcool etílico absoluto (DINÂMICA) com agitador magnético (IKA, C- MAG HS7) por 5 minutos. Posteriormente adicionou-se 300 mg de PVP (SIGMA-ALDRICH) até sua diluição completa. Consequente foi adicionado 30 mg de curcumina. Por fim, levou-se a solução a um banho de gelo para controlar as elevações de temperatura enquanto estiver no sonicador (FISHER SCIENTIFIC, CL-18) por 3 minutos em intervalos de 30 segundos ligado e 10 segundos desligado. Após a sonificação, usou-se uma estufa (NEW LAB, N1040) para secagem a 40 °C durante 4 horas. Após a secagem as partículas serão raspadas e levadas para armazenamento em um freezer.

4.2 Coleta de dados reológicos

As coletas de dados e análises de reologia foram realizadas de acordo com a metodologia proposta por (LEMES *et al.*, 2017). O suco de laranja industrializado foi adicionado de nanopartículas de curcumina nas concentrações relativas à atividade antimicrobiana (Minimum Inhibitory Concentration-MIC) frente ao microorganismo mais resistente avaliado por Dutra *et al.* (2021) (*Alicyclobacillus herbarius* 0246T): 1) Controle: suco sem adição de nanopartículas, 2) 1 × MIC: suco adicionado de 125 µg/mL, 3) 5 × MIC: suco adicionado de 625 µg/mL, e 4) 10 × MIC suco adicionado de 1250 µg/mL.

Após homogeneização do suco com as nanopartículas por agitação magnética (1 h), as amostras foram levadas para a análise no reômetro (Brookfield AMETEK, Middleboro, USA). Inicialmente foram realizados testes para a seleção do *spindle* adequado para as amostras. Após a seleção deste, realizou-se as análises e coletas dos dados referentes as curvas de taxa de cisalhamento (s^{-1}) versus viscosidade (mPa.s) e de taxa de cisalhamento (s^{-1}) versus tensão de cisalhamento ($N.m^{-2}$). Todas as amostras foram analisadas em quadruplicata.

4.3 Modelagem matemática e simulação dos parâmetros reológicos

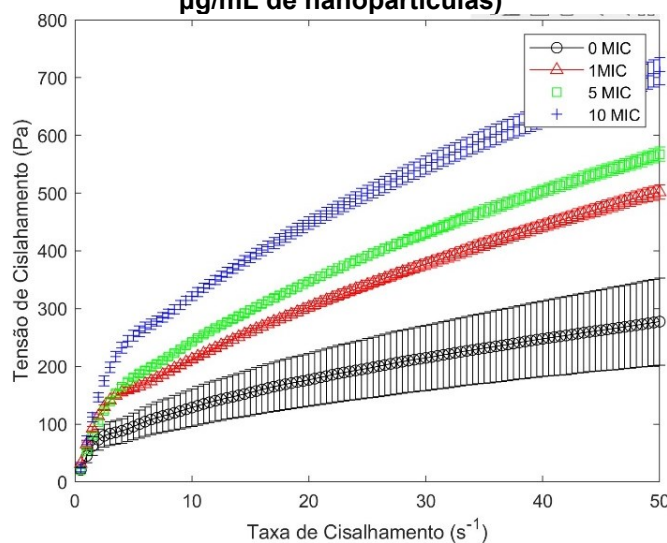
A metodologia para a modelagem matemática e simulação dos parâmetros reológicos foram propostas por SCHWAAB *et al.* (2008). Os modelos utilizados para avaliar o comportamento reológico do suco foram Lei de Potência (Equação 4), Hershell Bulkley (Equação 5) e Casson (Equação 6).

Duas estratégias foram empregadas para comparar os parâmetros estimados. Os parâmetros reológicos foram estimados com o aplicativo Curve Fitting do software Matlab (R2022, Mathworks), que utilizou o método de Levenberg–Marquardt para a determinação dos parâmetros. Adicionalmente, o método de otimização por Exame de Partículas (PSO, do inglês *Particle Swarm Optimization*) foi aplicado aos dados experimentais por meio da função PSO com o software Matlab.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O comportamento reológico das diferentes amostras foi avaliado a partir dos dados experimentais obtidos em um reômetro. A figura 4 explicita o comportamento dos dados experimentais e deixa nítido um comportamento diferente para as diferentes concentrações de nanopartículas adicionadas ao suco, sendo que para a ausência de nanopartículas (0 MIC) de curcumina houve uma menor expressão de tensão de cisalhamento, enquanto que para a maior concentração (10 MIC) houve uma maior expressão de tensão de cisalhamento, deixando assim perceptível um aumento da tensão de cisalhamento com o aumento da concentração de nanopartículas adicionadas ao suco de laranja concentrado.

Figura 4 - Análise reológica para diferentes concentrações de nanopartícula de curcumina (0 MIC: suco sem adição de nanopartículas; 1 MIC: 125 µg/mL; 5 MIC: 625 µg/mL; 10 MIC 1250 µg/mL de nanopartículas)



Fonte: Autoria própria (2023)

O estudo realizado por Xiao *et al.* (2012) possibilitou observar que para maiores concentrações de PVP na dispersão obteve-se uma viscosidade maior, marcando um pico para 0,2% de PVP, desta forma explicitando uma relação direta no impacto da concentração de PVP com as propriedades reológicas do fluido.

Quek, Chin e Yusof (2013) avaliaram o efeito da temperatura e da concentração no comportamento reológico de concentrados de suco de graviola liofilizados utilizando um reômetro para faixa de temperatura de 10 a 70 °C e para 10 a 50 °Brix de concentração, e constataram que o melhor modelo de ajuste aos dados

reológicos foi o modelo de Lei de Potência, obtendo um coeficiente de correlação equivalente a 0,9989 ($R^2 = 0,9989$). Branco e Gasparetto (2003) avaliaram o comportamento reológico da mistura ternária de polpa de manga e sucos de laranja e cenoura, nas faixas de temperatura de 10°C a 60°C, obtendo as medidas experimentais através de um reômetro e um ajuste de curva pelo modelo de Ostwald de Waele, obtendo bons resultados de ajuste para os parâmetros de escoamento com os modelos lineares e quadráticos. Hulle, Patruni e Rao (2014) avaliaram as propriedades reológicas do suco concentrado de Aloe Vera (*Barbadensis miller*) em uma faixa de concentração de 1,5 à 5,5 °Brix, e temperaturas de 15 a 55 °C, o ajuste para o efeito da temperatura nos parâmetros reológicos foram realizadas por equações do tipo Arrhenius, enquanto que para os efeitos da concentração foram usados modelos de potência e exponencial. Bozdogan (2017) estudou o comportamento reológico do concentrado de cereja cornalina com variações de concentrações entre 30,8 à 44,2 °Brix e temperaturas na faixa de 10 à 50 °C, utilizando o modelo de Arrhenius para avaliação do impacto das temperaturas nos parâmetros reológicos e os modelos quadrático, exponencial e Lei de Potência para avaliar o impacto da concentração nestes parâmetros, sendo o modelo quadrático o que apresentou melhor ajuste para os dados obtidos. Tavakolipour, Mokhtarian e Ashtari (2020), estudaram o comportamento reológico do melaço de uva persa em diferentes condições de temperatura e concentração, utilizando os modelos da lei de potência e exponencial para ajustar os dados experimentais, obtendo o melhor ajuste para a Lei de Potência.

Os resultados apresentados na Tabela 1 foram obtidos através da ferramenta “Curve Fitter” do software Matlab para o ajustar os resultados experimentais ao modelo de Power Law. A Tabela 2 explicita o ajuste realizado com o auxílio do software Matlab para o modelo de Hershell Bulkley, enquanto a Tabela 3 apresenta o ajusta realizado para o modelo de Casson. A Tabela 4 apresenta um comparativo entre os modelos.

Tabela 1 – Ajuste realizado pelo Curve Fitter para o modelo de Lei de Potência

AMOSTRAS	Lei de Potência		
	ni	n	RMSE
0 MIC	44,5094	0,4646	2,9291
1 MIC	64,9226	0,5197	7,256
5 MIC	72,3879	0,5255	5,2263
10 MIC	105,227	0,4866	9,1887

Fonte: Autoria própria (2023)

Tabela 2 – Ajuste para o modelo de Hershell Bulkley realizado pelo Curve Fitter com intervalo de confiança equivalente a 95%

AMOSTRAS	Hershel Bulkley			RMSE
	k	n	t0	
0 MIC	35,5394	0,5101	14,1718	2,626
1 MIC	43,5038	0,6041	38,637	5,7805
5 MIC	77,402	0,5117	-8,4469	5,1803
10 MIC	114,55	0,4696	-14,5689	9,1419

Fonte: Autoria própria (2023)

Tabela 3 – Ajuste para o modelo de Casson realizado pelo Curve Fitter com intervalo de confiança equivalente a 95%

AMOSTRAS	Casson		RMSE
	k	k0	
0 MIC	1,4206	6,7913	5,7837
1 MIC	2,0595	8,0503	8,2556
5 MIC	2,2258	8,418	13,7627
10 MIC	2,3612	10,323	19,251

Fonte: Autoria própria (2023)

Através dos valores demonstrados pelas tabelas 1, 2 e 3 fica perceptível a diferença dos valores calculados para o RMSE (Raiz quadrática média dos erros entre os valores observados e preditivos), apontando menores valores para o modelo de Power Law e Hershell Bulkley, sendo que o segundo apresentou uma diferença relativamente melhor quando comparado ao primeiro, desta forma apontando um melhor ajuste para estes modelos em todas as concentrações testadas.

Para o modelo da Lei de potência os valores de ni referem-se à viscosidade aparente e apresentam uma tendência de aumento com o aumento da viscosidade do fluido, deste modo indo de encontro com os resultados apresentados pela figura 4. Os

valores obtidos para k , referem-se à viscosidade aparente para o modelo reológico de Hershell Bulkley, e seguem uma tendência de aumento para viscosidades maiores, deste modo a tabela 2 corrobora com os resultados obtidos pela figura 4, onde é apresentado um aumento da viscosidade com o aumento de concentração de nanopartículas de curcumina no suco de laranja concentrado. Os valores de t_0 no modelo de Hershell Bulkley referem-se a tensão inicial, sendo assim valores negativos não são representativos para os resultados, e provavelmente foram obtidos devido a inércia do equipamento de análise reológica. Para o modelo de Casson, os valores de k e k_0 , referem-se à viscosidade aparente e tensão inicial, respectivamente. Os resultados obtidos para a viscosidade aparente neste modelo também foram de encontro com o apresentado pela figura 4, seguindo uma tendência de aumento com o aumento da concentração de nanopartículas de curcumina no suco de laranja concentrado.

Tabela 5 - Ajuste para o modelo de Lei de Potência realizado pelo algoritmo PSO com intervalo de confiança equivalente a 95%

AMOSTRAS	Lei de Potência		
	n_i	n	RMSE
0 MIC	44,509	0,464615	2,8996
1 MIC	64,9239	0,519673	7,1831
5 MIC	72,3915	0,525448	5,1738
10 MIC	105,2076	0,486629	9,0963

Fonte: Autoria própria (2023)

Tabela 6 – Ajuste para o modelo de Hershell Bulkley realizado pelo algoritmo PSO com intervalo de confiança equivalente a 95%

AMOSTRAS	HERSHELL BULKLEY			
	t_0	k	n	RMSE
0 MIC	10,92417	37,59142	0,498402	2,6063
1 MIC	39,7351	42,8966	0,607249	5,6951
5 MIC	0	72,3732	0,525516	5,1738
10 MIC	0	105,9787	0,485059	9,1569

Fonte: Autoria própria (2023)

Tabela 7 – Ajuste para o modelo de Casson realizado pelo algoritmo PSO com intervalo de confiança equivalente a 95%

AMOSTRAS	CASSON		
	t0	k	RMSE
0 MIC	6,79119	1,420643	5,7256
1 MIC	8,049898	2,059508	8,1726
5 MIC	8,419673	2,225476	13,6244
10 MIC	10,32269	2,361225	19,0575

Fonte: Autoria própria (2023)

A tabela 5 apresenta os resultados obtidos para a otimização dos parâmetros para o modelo da Lei de Potência, onde observa-se um ajuste para dois parâmetros parâmetros, sendo eles “ni” e “n”, chegando a um baixo resultado para o RMSE calculado em todas as concentrações, com destaque para os valores obtidos para a concentração de 5 e 10 MIC, sendo que o primeiro igualou-se ao valor obtido para a mesma concentração no modelo de Hershell Bulkley, e o segundo apresentando resultado inferior para a mesma concentração, como explicitado na tabela 6. Torna-se importante salientar que não existem valores negativos para a tensão inicial (t0), apresentados na tabela 6 para o ajuste realizado para o modelo de Hershel Bulkley, deste modo é provável que o algoritmo do PSO tenha ajustado os valores negativos encontrados para o mesmo modelo no curve fitter e arredondado para zero. Para o algoritmo do PSO a viscosidade aparente também seguiu uma tendência de aumento com o aumento da concentração de nanopartículas de curcumina no suco de laranja concentrado, corroborando com os resultados obtidos para o curve fitter.

A tabela 6, elucida os parâmetros otimizados para o modelo reológico de Hershell Bulkley, onde obteve-se um ajuste para os parâmetros “t0”, “k” e “n”, possibilitando contabilizar o RMSE para o modelo ajustado. Os resultados obtidos para este modelo explicitaram um melhor ajuste quando comparado aos demais modelos, visto que o RMSE para as concentrações 0 e 1 MIC, obteve-se valor relativamente menor quando comparado ao modelo de ajuste da “Lei de Potência” e “Casson”, e igualou-se ao valor obtido para a concentração de 5 MIC pelo modelo da “Lei de Potência”.

Por fim, a tabela 7 explicitou as otimizações obtidas para os parâmetros do modelo reológico de “Casson” através do algoritmo de PSO no software MATLAB,

onde apresentou o pior ajuste quando comparado aos modelos supracitados (Lei de Potência e Hershell Bulkley), com resultados para a raiz quadrática média dos erros entre os valores observados e preditivos acima consideravelmente acima dos calculados para as mesmas concentrações nos modelos anteriores.

Através da comparação entre os resultados da otimização obtidos para os 3 modelos testados é perceptível um melhor ajuste para o modelo de Hershell Bulkley, condizendo com os resultados obtidos para os mesmos modelos avaliados pelo curve fitter do software Matlab.

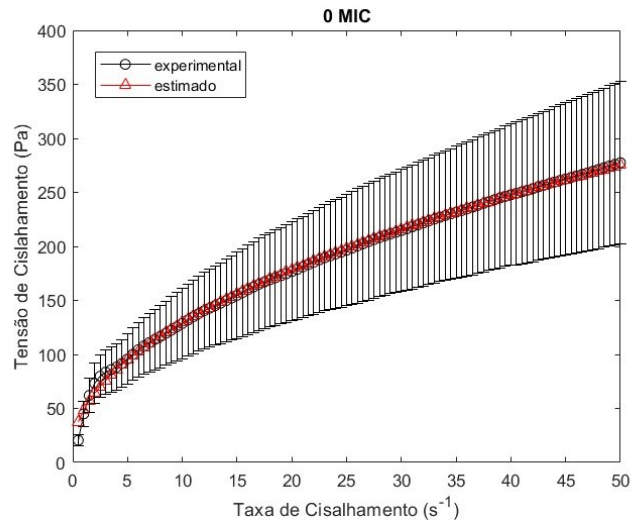
Tabela 8 – Comparativo entre os modelos de melhor ajuste do curve fitter e PSO

AMOSTRAS	Hershell Bulkley – Curve Fitting	Hershell Bulkley - PSO
	RMSE	RMSE
0 MIC	2,626	2,6063
1 MIC	5,7805	5,6951
5 MIC	5,1803	5,1738
10 MIC	9,1419	9,1569

Fonte: Autoria própria (2023)

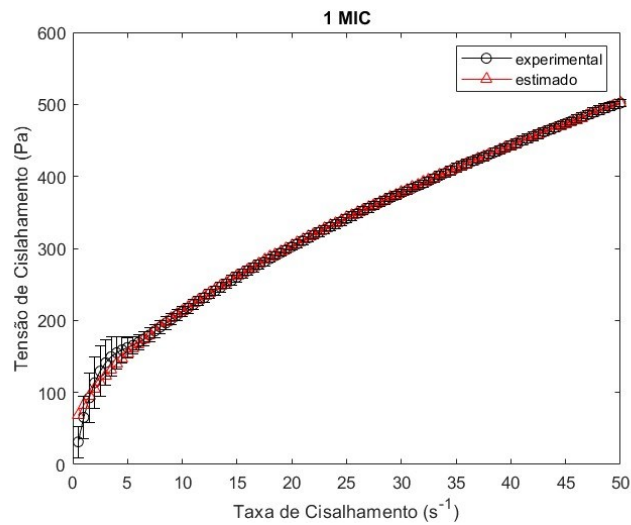
A tabela 8 possibilita realizar um comparativo entre o modelo de melhor ajuste (Hershell Bulkley) para as duas metodologias testadas: Curve Fitter (Levenberg Marquardt) e PSO (ajuste por enxame de partículas). A partir da comparação entre o RMSE calculado para ambos métodos é perceptível um ajuste melhor para a metodologia do PSO, alcançando valores menores para as 4 primeiras concentrações, obtendo um valor maior na segunda casa decimal para última concentração, quando comparado ao primeiro método.

Figura 4 – Gráfico Tensão versus taxa de cisalhamento para o suco de laranja com concentração equivalente a 0 MIC de nanopartículas



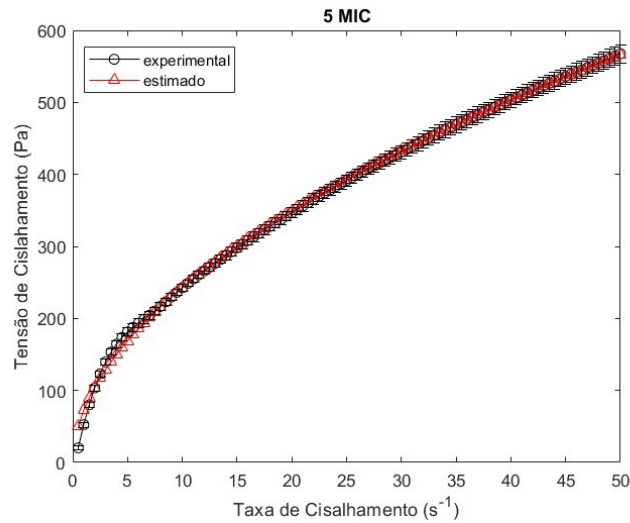
Fonte: Autoria própria (2023)

Figura 5 - Gráfico Tensão versus taxa de cisalhamento para o suco de laranja com concentração equivalente a 1 MIC de nanopartículas



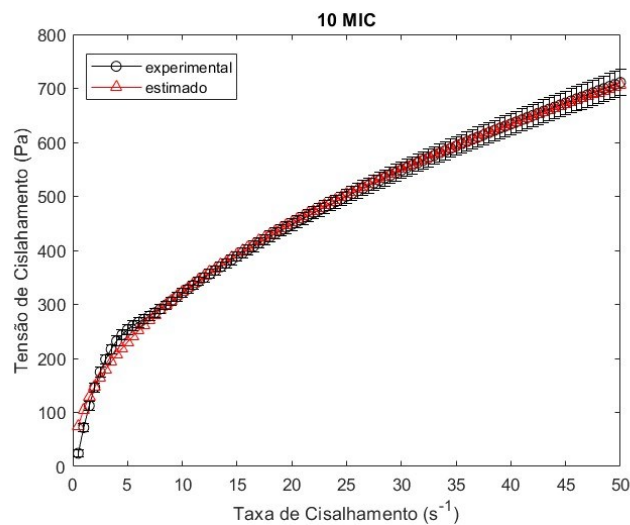
Fonte: Autoria própria (2023)

Figura 6 - Gráfico Tensão versus taxa de cisalhamento para o suco de laranja com concentração equivalente a 5 MIC de nanopartículas



Fonte: Autoria própria (2023)

Figura 7 - Gráfico Tensão versus taxa de cisalhamento para o suco de laranja com concentração equivalente a 10 MIC de nanopartículas



Fonte: Autoria própria (2023)

As Figuras 4, 5, 6 e 7 apresentam gráficos de tensão de cisalhamento versus taxa de cisalhamento, para uma comparação entre os resultados experimentais e estimados nas concentrações de 0, 1, 5 e 10 MIC, respectivamente. Através destas figuras é perceptível um ajuste bem definido para o modelo reológico, sendo que as linhas do experimental e estimado situam-se sobrepostas uma à outra, para a maioria dos resultados, tendo apenas como considerável discrepância os resultados iniciais para valores entre 0 e 3 s⁻¹ para a taxa de cisalhamento e 0 e 150 Pa para a tensão

de cisalhamento, desta forma o modelo de Hershel Bulkley apresentou um excelente ajuste aos valores experimentais obtidos. É possível observar uma redução para os erros quadráticos com a crescente concentração de nanopartículas no suco concentrado de laranja. Para os dois métodos de ajuste de parâmetros testados, no modelo de Lei de Potência os parâmetros n ficou abaixo de 1, obtendo como menor valor 0,46 e maior valor equivalente a 0,525, desta forma possibilitando identificar um comportamento pseudoplástico para o fluido em estudo (SALEHI, 2021). Os dois melhores modelos de ajuste para o suco de laranja estudado, foram o da Lei de Potência e o modelo de Hershell Bulkley, sendo que o segundo deriva-se do primeiro modelo com a adição do parâmetro de tensão de escoamento, assim possivelmente influenciando na diferença sutil de melhores resultados para a otimização obtida para o modelo de Hershell Bulkley.

6 CONCLUSÃO

A adição de nanopartículas de curcumina ao suco de laranja concentrado influenciou os parâmetros reológicos deste, visto que houve um aumento da tensão de cisalhamento, tensão inicial e viscosidade aparente para o aumento da concentração de nanopartículas no suco. Para além da influência dos parâmetros reológicos, fora constatado um melhor ajuste aos modelos reológicos de Lei de Potência e Hershell Bulkley, visto que se obteve um RMSE menor para ambas metodologias de otimização testadas (Levenberg-Marquardt e PSO). Por fim, foi observado um ajuste similar para os parâmetros reológicos utilizando o algoritmo do PSO e para o curve fitter, visto que os valores do RMSE foram menores quando comparados aos obtidos pela ferramenta do curve fitter, entretanto a diferença entre os valores de RMSE para as duas metodologias foram aproximadas.

REFERÊNCIAS

- AFKHAMI, R.; GOLI, M.; KERAMAT, J. Functional orange juice enriched with encapsulated polyphenolic extract of lime waste and hesperidin. **International Journal of Food Science and Technology**, [s. l.], v. 53, n. 3, p. 634–643, 2018.
- BAZANA, M. T.; CODEVILLA, C. F.; DE MENEZES, C. R. Nanoencapsulation of bioactive compounds: challenges and perspectives. **Elsevier Ltd**, v. 26, p. 47-76, 2019.
- BENÍTEZ, E. I.; GENOVESE, D. B.; LOZANO, J. E. Effect of typical sugars on the viscosity and colloidal stability of apple juice. **Food Hydrocolloids**, [s. l.], v. 23, n. 2, p. 519–525, 2009.
- BOZDOGAN, A. Viscosity and physicochemical properties of cornelian cherry (*Cornus mas L.*) concentrate. **Journal of Food Measurement and Characterization**, [s. l.], v. 11, n. 3, p. 1326–1332, 2017.
- BRANCO, I. G.; GASPARETTO, C. A. Aplicação da metodologia de superfície de resposta para o estudo do efeito da temperatura sobre o comportamento reológico de misturas ternárias de polpa de manga e sucos de laranja e cenoura 1. [S. l.: s. n.], 2003.
- CHAUHAN, G.; VERMA, A.; DAS, A.; OJHA, K. Rheological studies and optimization of Herschel-Bulkley flow parameters of viscous karaya polymer suspensions using GA and PSO algorithms. **Rheologica Acta**, v. 57, n. 3, p. 267–285, 2018.
- PACHECO, A. Computação inteligente. **Otimização por enxame de partículas**. 9 abr. 2016. Disponível em: <http://computacaointeligente.com.br/algoritmos/otimizacao-por-enxame-de-particulas/>. Acesso em: 20 jan. 2023.
- DIAMANTE, L.; UMEMOTO, M. Rheological properties of fruits and vegetables: A review. **International Journal of Food Properties**, [s. l.], v. 18, n. 6, p. 1191–1210, 2015.
- DUTRA, T. V.; CASTRO, J. C.; MENEZES, J. L.; RAMOS, T. R.; DO PRADO, I. N.; MACHINSKI, M.; MIKCHA, J. M. G.; FILHO, B. A. de A. Bioactivity of oregano (*Origanum vulgare*) essential oil against *Alicyclobacillus* spp. **Industrial Crops and Products**, v. 129, p. 345–349, 2019.
- DUTRA, T. V.; MENEZES, J. L.; MIZUTA, A. G.; OLIVEIRA, A.; MOREIRA, T. F. M.; BARROS, L.; MANDIM, F.; PEREIRA, C.; GONÇALVES, O. H.; LEIMANN, F. V.; MIKCHA, J. M. G.; MACHINSKI JUNIOR, M.; ABREU FILHO, B. A. de. Use of nanoencapsulated curcumin against vegetative cells and spores of *Alicyclobacillus* spp. in industrialized orange juice. **International Journal of Food Microbiology**, v. 360, 2021.
- ETENE. Escritório Técnico de Estudos Econômicos do Nordeste. **Produção de laranja na área de atuação do BNB**. 2021. Disponível em:

[https://www.bnb.gov.br/s482-](https://www.bnb.gov.br/s482-dspace/bitstream/123456789/1041/1/2021_CDS_198.pdf)

[dspace/bitstream/123456789/1041/1/2021_CDS_198.pdf](https://www.bnb.gov.br/s482-dspace/bitstream/123456789/1041/1/2021_CDS_198.pdf). acesso em: 12 abr. 2022.

FERREIRA, T. V.; MIZUTA, A. G.; MENEZES, J. L. de; DUTRA, T. V.; BONIN, E.; CASTRO, J. C.; SZCZEREPA, M. M. dos A.; PILAU, E. J.; NAKAMURA, C. V.; MIKCHA, J. M. G.; ABREU FILHO, B. A. de. Effect of ultraviolet treatment (UV-C) combined with nisin on industrialized orange juice in *Alicyclobacillus acidoterrestris* spores. **LWT – Food Science and Technology**, v. 133, 2020.

GALANT, A. L.; WIDMER, W. W.; LUZIO, G. A.; CAMERON, R. G. Characterization of molecular structural changes in pectin during juice cloud destabilization in frozen concentrated orange juice. **Food Hydrocolloids**, [s. l.], v. 41, p. 10–18, 2014.

GAVIN, H. P. The Levenberg-Marquardt algorithm for nonlinear least squares curve-fitting problems. [S. l.: s. n.], 2022.

GIORDANO, A.; TOMMONARO, G. Curcumin and cancer. **MDPI AG**, Pazzouli, v 11, n. 2376, p. 1-20, 2019.

GOUMA, M.; ÁLVAREZ, I.; CONDÓN, S.; GAYÁN, E. Pasteurization of carrot juice by combining UV-C and mild heat: Impact on shelf-life and quality compared to conventional thermal treatment. **Innovative Food Science and Emerging Technologies**, v. 64, 2020.

HASSANZADEH, S.; READ, M. I.; BLAND, A. R.; MAJEED, M.; JAMIALAHMADI, T.; SAHEBKAR, A. Curcumin: an inflammasome silencer. **Pharmacological Research**, v. 159, n. 104921, 2020.

JI, K.; ZHAO, P.; ZHOU, X.; CHEN, Y.; DONG, Z.; ZHENG, J.; FU, J.; ZHOU, H. Uniform Initialization in Response Space for PSO and its Applications. **Applied Mathematics and Computation**, [s. l.], v. 431, 2022.

Rui, J. V. A. S. Discretização e parametrização do algoritmo de otimização por enxame de partículas. [S. l.: s. n.], 2021.

Kennedy, J., and R. Eberhart. "Particle Swarm Optimization." **Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks**. Perth, Australia, 1995, pp. 1942–1945.

KIRITI, B. D.; AKYILDIZ, A. Rheological properties of thermally or non-thermally treated juice/néctar/puree: A review. **Journal of Food Processing and Preservation**, v. 46, 2022.

LE, D. H.; PHAM, C. K.; NGUYEN, T. T. T.; BUI, T. T. Parameter extraction and optimization using Levenberg-Marquardt algorithm. **International Conference on Communications and Electronics, ICCE 2012**. [S. l.: s. n.]. p. 434–437, 2012.

LEMES, G. F.; MARCHIORE, N. G.; MOREIRA, T. F. M.; DA SILVA, T. B. V.; SAYER, C.; SHIRAI, M. A.; GONÇALVES, O. H.; GOZZO, A. M.; LEIMANN, F. V. Enzymatically crosslinked gelatin coating added of bioactive nanoparticles and antifungal agent: Effect on the quality of Benitaka grapes. **LWT**, v. 84, p. 175–182, 2017.

LI, W.; ZHONG, K. Application of improved particle swarm optimization algorithm in solving camera extrinsic parameters. **Journal of Modern Optics**, v. 66, n. 18, 2019.

LÓPEZ, G. F. G.; BELTRÁN, L. A.; PÉREZ, J. C.; ARIAS, E. P.; VARGAS, C. O. Towards an Integrated Approach to Food Engineering: Structure-Function Relationships And Convective Drying. **Food Engineering: Integrated Approaches**, [s. l.], p. 268–475, 2008.

MANDAL, R.; SINGH, A.; PRATAP SINGH, A. Recent developments in cold plasma decontamination technology in the food industry. **Elsevier Ltd**, 2018.

MARSANASCO, M.; PIOTRKOWSKI, B.; CALABRÓ, V.; DEL VALLE ALONSO, S.; CHIARAMONI, N. S. Bioactive constituents in liposomes incorporated in orange juice as new functional food: thermal stability, rheological and organoleptic properties. **Journal of Food Science and Technology**, [s. l.], v. 52, n. 12, p. 7828–7838, 2015.

Mezura-Montes, E., and C. A. Coello Coello. "Constraint-handling in nature-inspired numerical optimization: Past, present and future." **Swarm and Evolutionary Computation**. 2011, pp. 173–194.

Myers, R.H., 1990. Classical and modern regression with applications. **PWS-KENT** 298, 444–445.

NARIN, C.; ERTUGRUL, U.; TAS, O.; SAHIN, S.; OZTOP, M. H. Encapsulation of pea protein in an alginate matrix by cold set gelation method and use of the capsules in fruit juices. **Journal of Food Science**, [s. l.], v. 85, n. 10, p. 3423–3431, 2020.

NIU, L.-Y.; WU, J.-H.; LIAO, X.-J.; FANG, C.; WANG, Z.-F.; ZHAO, G.-H.; HU, X.-S. Physicochemical Characteristics of Orange Juice Samples From Seven Cultivars. **Agricultural Sciences in China**. [S. l.: s. n.], 2008.

PAIVA, F. A. P. **Otimização por enxame de partículas**: usando uma adaptação de serendipidade. Rio Grande do Norte: Editora IFRN, 2018. E-book. Disponível em: [https://memoria.ifrn.edu.br/bitstream/handle/1044/1663/Otimiza%
20por%20Enxame%20-%20E-BOOK.pdf?sequence=1&isAllowed=y](https://memoria.ifrn.edu.br/bitstream/handle/1044/1663/Otimiza%c3%a7%c3%a3o%20por%20Enxame%20-%20E-BOOK.pdf?sequence=1&isAllowed=y). Acesso em: 24 fev. 2023.

PASCOLI, I. C.; DOS ANJOS, M. M.; SILVA, A. A.; LORENZETTI, F. B.; CORTEZ, D. A. G.; MIKCHA, J. M. G.; NAKAMURA, T. U.; NAKAMURA, C. V.; ABREU FILHO, B. A. Piperaceae extracts for controlling Alicyclobacillus acidoterrestris growth in commercial orange juice. **Industrial Crops and Products**, v. 116, p. 224–230, 2018.

Pedersen, M. E. "Good Parameters for Particle Swarm Optimization.". **Luxembourg: Hvass Laboratories**, 2010.

PORNPUKDEEWATTANA, S.; JINDAPRASERT, A.; MASSA, S. Alicyclobacillus spoilage and control - a review. **Taylor and Francis Inc.**, 2020.

QUEK, M. C.; CHIN, N. L.; YUSOF, Y. A. Modelling of rheological behaviour of soursop juice concentrates using shear rate-temperature-concentration superposition. **Journal of Food Engineering**, [s. l.], v. 118, n. 4, p. 380–386, 2013.

SALEHI, F. Rheological and physicochemical properties of vegetable juices and concentrates: A review. [S. l.]: Blackwell Publishing Ltd, 2021.

SCHWAAB, M.; BISCAIA, E. C.; MONTEIRO, J. L.; PINTO, J. C. Nonlinear parameter estimation through particle swarm optimization. **Chemical Engineering Science**, v. 63, n. 6, p. 1542–1552, 2008.

SHAMI, T. M.; EL-SALEH, A. A.; ALSWAITTI, M.; AL-TASHI, Q.; SUMMAKIEH, M. A.; MIRJALILI, S. Particle Swarm Optimization: A Comprehensive Survey. **IEEE Access**, [s. l.], v. 10, p. 10031–10061, 2022.

SILA, D. N.; VAN BUGGENHOUT, S.; DUVETTER, T.; FRAEYE, I.; DE ROECK, A.; LOEY, A. Van; HENDRICKX, M. Pectins in Processed Fruits and Vegetables: Part II-Structure-Function Relationships. **Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety** [s. l.], 2009.

SINGH, A. P.; SINGH, A.; RAMASWAMY, H. S. Heat transfer phenomena during thermal processing of liquid particulate mixtures—A review. **Critical Reviews in Food Science and Nutrition**, v. 57, n. 7, p. 1350–1364, 2017.

SOURRI, P.; TASSOU, C. C.; NYCHAS, G. J. E.; PANAGOU, E. Z. Fruit Juice Spoilage by Alicyclobacillus: Detection and Control Methods—A Comprehensive Review. **Multidisciplinary Digital Publishing Institute - MDPI**, 2022.

SPIEGEL, Murray R.; SCHILLER, John J.; SRINIVASAN, R. A. **Probabilidade e estatística**. (Schaum). E-book. ISBN 9788565837477. Disponível em: <https://integrada.minhabiblioteca.com.br/#/books/9788565837477/>. Grupo A, 2013.

SWAMI HULLE, N. R.; PATRUNI, K.; RAO, P. S. Rheological properties of aloe vera (aloe barbadensis miller) juice concentrates. **Journal of Food Process Engineering**, [s. l.], v. 37, n. 4, p. 375–386, 2014.

TAVAKOLIPOUR, H.; MOKHTARIAN, M.; KALBASI-ASHTARI, A. Rheological modeling and activation energy of Persian grape molasses. **Journal of Food Process Engineering**, [s. l.], v. 43, n. 12, 2020.

TOUSHMALANI, R. Comparison result of inversion of gravity data of a fault by particle swarm optimization and Levenberg-Marquardt methods. **SpringerPlus**, [s. l.], v. 2, n. 1, p. 1–6, 2013.

WEN, H.; MA, J.; ZHANG, M.; MA, G. The comparison research of nonlinear curve fitting in matlab and LabVIEW. **Proceedings - 2012 IEEE Symposium on Electrical and Electronics Engineering, EEESYM 2012**. [S. l.: s. n.], 2012. p. 74–77.

XIAO, C.; NI, Q.; CHEN, H.; GUO, L. Effect of polyvinylpyrrolidone on rheology of aqueous SiC suspensions dispersed with poly (aspartic acid). **Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects**, [s. l.], v. 399, p. 108–111, 2012.