

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO
PARA A TRANSFERÊNCIA DE CALOR E
MASSA EM MEIOS GRANULARES**

por

Vitor José Petry

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Matemática Aplicada.

Prof. Dr. Álvaro L. De Bortoli
Orientador

Prof. Dr. Oleg Khatchatourian
Co-Orientador

Porto Alegre, maio de 2007.

CIP - CATALOGACÃO NA PUBLICACÃO

Petry, Vitor José

Desenvolvimento de um modelo para a transferência de calor e massa em meios granulares / Vitor José Petry, — Porto Alegre: PPGMAp/UFRGS, 2007

93 p.: il.

Tese (doutorado) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2007.

Orientador: Dr. Álvaro L. De Bortoli

Co-Orientador: Dr. Oleg A. Khatchatourian

Tese: Matemática Aplicada

Modelo matemático, transferência de calor e massa, meios granulares

**DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO
PARA A TRANSFERÊNCIA DE CALOR E
MASSA EM MEIOS GRANULARES**

por

Vitor José Petry

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do título de

Doutor em Matemática Aplicada.

Linha de Pesquisa: Análise Numérica

Orientador: Prof. Dr. Álvaro L. De Bortoli

Co-Orientador Prof Dr. Oleg A. Khatchatourian

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Antônio José da Silva Neto - IPRJ/UERJ

Prof^a. Dr^a. Lígia D. F. Marczak - PPGEQ/UFRGS

Prof. Dr. Leonardo Fernandes Guidi - PPGMAp/UFRGS

Tese apresentada e aprovada em 23 de maio de 2007.

Prof^a. Dr^a. Maria Cristina Varrialle - Coordenadora

Porto Alegre, maio de 2007

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Motivação	1
1.2	O problema físico	2
1.3	Alguns modelos de transferência de calor e massa para secagem	6
1.4	Objetivos do trabalho	15
1.4.1	Objetivos gerais	15
1.4.2	Objetivos específicos	16
1.5	Roteiro do trabalho	17
2	Equações Governantes	18
2.1	Dedução das equações governantes	19
2.1.1	Equação de conservação de massa para o ar	21
2.1.2	Equação de conservação de massa para as esferas	22
2.1.3	Equação de conservação de energia para o ar	22
2.1.4	Equação de conservação de energia para as esferas	23
2.1.5	Equações para o fluxo do ar no meio granular	25
2.2	Adimensionalização das equações governantes	26
2.3	Condições iniciais e de contorno	28
3	Procedimento de solução	30
3.1	Esquema numérico	30
3.1.1	Algumas definições e teoremas	31
3.1.2	Aproximações em diferenças finitas	34
3.1.3	Análise da consistência, estabilidade e convergência	35
3.2	Solução analítica	40

3.2.1	Algumas soluções analíticas para problemas de transporte na literatura	41
3.2.2	Definições e teoremas úteis na resolução	44
3.2.3	Obtenção da solução analítica	46
4	Resultados	59
4.1	Comparação entre valores numéricos e dados experimentais de secagem em leito profundo para o caso 1-D	59
4.2	Comparação entre valores numéricos e dados experimentais de secagem em camada fina	65
4.3	Comparação entre valores numéricos e dados experimentais para a secagem intermitente	67
4.4	Simulações numéricas de secagem para o caso 2-D	74
4.5	Avaliação da influência de parâmetros adimensionais	79
5	Conclusões e contribuições	82
5.1	Contribuições do trabalho	83
	Referências Bibliográficas	85

Lista de Figuras

1.1	Esquema de um secador de leito fixo em forma de silo (corte vertical)	3
2.1	Esquema da câmara de Secagem	19
2.2	Volume de controle	20
2.3	Esquema da extrapolação em $x^* = 0$ e $x^* = 1$	29
3.1	Esquema de aproximações em diferenças finitas para o tempo e o espaço no caso 1-D	34
3.2	Região de estabilidade para $a = 1/4$, $b = -1$, $c = -1/2$ e $\Delta x = 1/20$.	39
3.3	Região de estabilidade para $a = 1/10000$, $b = -1$, $c = -1$ e $\Delta x = 1/40$	39
3.4	Região de estabilidade para $a = 1/10000$, $b = -1$, $c = -1$ e $\Delta x = 1/100$	40
3.5	Representação gráfica dos autovalores para $a = 1/4$, $b = -1$ e $c = -1/2$	52
3.6	Soluções analítica e numérica de Ψ como função do tempo (adimensional) para $\Psi_0 = \Psi_1 = 1$, $a = 1/4$, $b = -1$, $c = -1/2$, $f(x, t)$ dada pela equação (3.62) com $k_1 = -0.03$ e $k_2 = 0.1$	55
3.7	Valor do erro relativo entre as soluções analítica e numérica de Ψ como função do tempo (adimensional) para $\Psi_0 = \Psi_1 = 1$, $a = 1/4$, $b = -1$, $c = -1/2$, $f(x, t)$ dada pela equação (3.62) com $k_1 = -0.03$ e $k_2 = 0.1$	56
3.8	Soluções analítica e numérica de Ψ como função do tempo (adimensional) para $\Psi_0 = 0$, $\Psi_1 = 1$, $a = 1/4$, $b = -1$, $c = -1/2$, $f(x, t)$ dada pela equação (3.63) e $k_1 = -0.03$	57
3.9	Valor do erro relativo entre as soluções analítica e numérica de Ψ como função do tempo (adimensional) para para $\Psi_0 = 0$, $\Psi_1 = 1$, $a = 1/4$, $b = -1$, $c = -1/2$, $f(x, t)$ dada pela equação (3.63) e $k_1 = -0.03$. . .	57

4.1	Esquema do equipamento experimental	61
4.2	Distribuição da temperatura dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{ar} = 65^{\circ}C$, $T_{amb} = 18^{\circ}C$, $X_0 = 0,31$, $U_0 = 4,75ms^{-1}$ e $UR = 85\%$	63
4.3	Distribuição do teor de umidade dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{ar} = 65^{\circ}C$, $T_{amb} = 18^{\circ}C$, $X_0 = 0,31$, $U_0 = 4,75ms^{-1}$ e $UR = 85\%$	63
4.4	Distribuição da temperatura dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{ar} = 55^{\circ}C$, $T_{amb} = 16^{\circ}C$, $X_0 = 0,21$, $U_0 = 4,61ms^{-1}$ e $UR = 80\%$	64
4.5	Distribuição do teor de umidade dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{ar} = 55^{\circ}C$, $T_{amb} = 16^{\circ}C$, $X_0 = 0,21$, $U_0 = 4,61ms^{-1}$ e $UR = 80\%$	64
4.6	Distribuição do teor de umidade dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{ar} = 80^{\circ}C$, $T_{amb} = 22^{\circ}C$, $X_0 = 0,24$ e $UR = 68\%$. . .	66
4.7	Distribuição do teor de umidade dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{ar} = 110^{\circ}C$, $T_{amb} = 20^{\circ}C$, $X_0 = 0,24$ e $UR = 68\%$. . .	66
4.8	Distribuição da temperatura do ar no interior da câmara para $T_{amb} = 23^{\circ}C$, $T_{ar} = 70^{\circ}C$, $X_0 = 0,214$ e $U_0 = 1,25ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidas de 50 minutos de aeração	68
4.9	Distribuição do teor de umidade dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{amb} = 23^{\circ}C$, $T_{ar} = 70^{\circ}C$, $X_0 = 0,214$ e $U_0 = 1,25ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidas de 50 minutos de aeração	69
4.10	Distribuição da temperatura dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{amb} = 23^{\circ}C$, $T_{ar} = 70^{\circ}C$, $X_0 = 0,214$ e $U_0 = 1,25ms^{-1}$ com 45 minutos de secagem seguidos de 50 minutos de aeração	69
4.11	Distribuição da temperatura do ar no interior da câmara para $T_{amb} = 21^{\circ}C$, $T_{ar} = 70^{\circ}C$, $X_0 = 0,227$ e $U_0 = 2,5ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidos de 50 minutos de aeração	70

4.12	Distribuição do teor de umidade dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{amb} = 21^{\circ}C$, $T_{ar} = 70^{\circ}C$, $X_0 = 0,227$ e $U_0 = 2,5ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidos de 50 minutos de aeração	71
4.13	Distribuição da temperatura dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{amb} = 21^{\circ}C$, $T_{ar} = 70^{\circ}C$, $X_0 = 0,227$ e $U_0 = 2,5ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidos de 50 minutos de aeração	72
4.14	Distribuição da temperatura do ar no interior da câmara para $T_{amb} = 13^{\circ}C$, $T_{ar} = 50^{\circ}C$, $X_0 = 0,227$ e $U_0 = 2,5ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidos de 50 minutos de aeração	73
4.15	Distribuição do teor de umidade dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{amb} = 13^{\circ}C$, $T_{ar} = 50^{\circ}C$, $X_0 = 0,227$ e $U_0 = 2,5ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidos de 50 minutos de aeração	73
4.16	Distribuição da temperatura dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{amb} = 13^{\circ}C$, $T_{ar} = 50^{\circ}C$, $X_0 = 0,227$ e $U_0 = 2,5ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidos de 50 minutos de aeração	74
4.17	Malha para a simulação numérica no caso 2-D	75
4.18	Distribuição da temperatura (adimensional) dos grãos para $t = 0,5h$	75
4.19	Distribuição da temperatura (adimensional) dos grãos para $t = 1h$	76
4.20	Distribuição da temperatura (adimensional) dos grãos para $t = 1,5h$	76
4.21	Distribuição da temperatura (adimensional) dos grãos para $t = 2h$	77
4.22	Distribuição da umidade (adimensional) dos grãos para $t = 0,5h$	77
4.23	Distribuição da umidade (adimensional) dos grãos para $t = 1h$	78
4.24	Distribuição da umidade (adimensional) dos grãos para $t = 1,5h$	78
4.25	Distribuição da umidade (adimensional) dos grãos para $t = 2h$	79
4.26	Influência do número de Reynolds na distribuição da umidade dos grãos ao longo do tempo, $Re = 200$ a 2000	80
4.27	Influência do número de Eckert na distribuição da temperatura dos grãos ao longo do tempo, $Ec = 10^{-5}$ a 5×10^{-5}	81
4.28	Influência do número de Schmidt na distribuição do teor de umidade dos grãos ao longo do tempo, $Sc = 0.7$ a 2.0	81

Lista de Tabelas

1.1	Composição média dos grãos de soja em condições ideais para a estocagem [72]	3
3.1	Domínios e condições de contorno em que foram obtidas soluções para a equação (3.29) em [69]	43
3.2	Autovalores do problema (3.47) para os dez primeiros valores de n , com $a = 1/4$, $b = -1$ e $c = -1/2$	53

Lista de Símbolos

a	razão entre a área e o volume de um grão
a, b, c	coeficientes
A	coeficiente
A_n	coeficiente de normalização das autofunções
A_s	área da superfície de um grão
$b_n(t)$	coeficientes de Fourier com dependência do tempo
C	concentração de água em massa
C^0	espaço das funções contínuas
C_i	concentração mássica da espécie i
C_p	calor específico a pressão constante
D	coeficiente de difusão de massa de vapor de água no ar
$D(L)$	domínio do operador L
E_R	erro relativo
Ec	número de Eckert
h	coeficiente convectivo de transferência de calor entre o ar e o grão
\mathcal{H}	espaço de Hilbert
h_m	coeficiente convectivo de transferência de massa entre o grão e o ar
$j_{x,i}, j_{y,i}$	fluxo de difusão da espécie i na direção x e na direção y
k_1, k_2	parâmetros
L	operador diferencial
L^*	operador adjunto
l^2	espaço das seqüências cuja soma dos quadrados de seus termos converge
L^2	espaço das funções de quadrado integrável
L_c	comprimento característico
L_v	calor latente de vaporização da água

\dot{m}	taxa de geração de massa por unidade de volume
m	massa
\vec{n}	vetor normal
$O(\Delta x, \Delta t)$	ordem de aproximação no espaço e no tempo
P	pressão
Pr	número de Prandtl
q	quantidade de calor gerada por unidade de volume
\dot{q}	taxa de geração de energia por unidade de volume
Re	número de Reynolds
Sc	número de Schmidt
$S(\cdot)$	símbolo de Fourier
t	tempo
T	temperatura
u	componente da velocidade na direção x
\vec{u}	vetor velocidade
U_0	velocidade do ar na entrada da câmara de secagem
UR	umidade relativa do ar
v	componente da velocidade na direção y
V	volume
x, y, z	coordenadas cartesianas
X	teor de umidade dos grãos em base seca
X_e	teor de umidade de equilíbrio entre o ar e o grão
Y	teor de umidade do ar em base seca
w	componente da velocidade na direção z

Lista de Símbolos Especiais

α	difusividade térmica
$\gamma_n(t)$	coeficientes de Fourier com dependência do tempo
ΔC	variação de concentração de massa
λ, λ_n	autovalores
μ, β	parâmetros
ν	viscosidade cinética
ρ	massa específica
ϕ	porosidade da massa granular
$\sigma(L)$	espectro de L
τ	tempo de relaxação térmica
$\Phi_n(x)$	autofunções normalizadas
$\hat{\Psi}$	transformada discreta de Fourier para a seqüência $\{\Psi_k\}$
Ψ_0, Ψ_1	constantes
$\Psi(x, t)$	função
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	produto interno
$\mathcal{L}(\mathcal{H})$	espaço dos operadores lineares contínuos de H em H
$\ \cdot \ $	norma euclidiana
$\ \cdot \ _H$	norma no espaço de Hilbert H
$\ \cdot \ _{\mathcal{L}(\mathcal{H})}$	norma no espaço $\mathcal{L}(\mathcal{H})$

Sobrescritos

- * variável adimensional
- n índice de discretização temporal

Subscritos

0	valor inicial
amb	ambiente
ar	ar de secagem
atm	atmosférica
c	referente ao volume de controle
g	gás (ar)
i	referente à espécie i
i, j, k	índices de discretização espacial
l	líquido (água)
s	sólido (grão)
v	vapor

Resumo

Problemas de transferência de calor e de massa em meios granulares são encontrados em inúmeras situações de interesse tecnológico. Particularmente, o processo de secagem de grãos envolve esses dois fenômenos. Nesta tese é desenvolvido um modelo matemático que descreve os balanços de energia e de massa para o ar e os grãos baseado nas equações de Navier-Stokes. O coeficiente convectivo de transferência de massa entre o grão e o ar é obtido a partir de dados experimentais para a secagem de grãos de soja.

As equações governantes do modelo são resolvidas numericamente por um esquema em diferenças finitas. A análise de consistência, estabilidade e convergência também é realizada para o caso unidimensional. Uma solução analítica da equação diferencial parcial com a forma das equações de balanço da energia e da massa para o ar (caso unidimensional) é obtida, fazendo-se comparações entre dados numéricos e a solução analítica, para funções testes no termo fonte, com o objetivo de avaliar o esquema numérico utilizado.

Resultados são apresentados fazendo comparações dos valores numéricos calculados através do modelo com dados experimentais encontrados na literatura. Avalia-se também a influência de parâmetros adimensionais envolvidos nos processos de transferência de calor e massa.

Estes resultados contribuem para obter um melhor entendimento da transferência de calor e massa em meios granulares, cujas aplicações são encontradas em muitas situações de interesse prático.

Abstract

Problems of heat and mass transfer in granular media are found in countless situations of technical interest. Particularly, the grain drying process involves those two phenomena. In the present work we develop a mathematical model that describes the energy and the mass balance for the air and the grain based on the Navier-Stokes equations. The convective mass transfer coefficient between the grain and the air is obtained from experimental data for the soy grain drying process.

The governing equations of the model are approximated by means of a finite differences scheme. The analysis of consistency, stability and convergence is also made for the unidimensional case. An analytical solution for a partial differential equation with the form similar to the energy and mass balance equations for the air (in the unidimensional case) is obtained; comparisons are realized between the numerical data and the analytical solution for chosen test functions in the source term, with the objective of evaluating the numerical scheme used.

Numerical results are presented and compared with the experimental data found in the literature. We evaluate the influence of dimensionless parameters involved in the heat and mass transfer processes as well.

These results contribute to obtain a better understanding of the heat and mass transfer in a granular medium, whose applications are found in many situations of technical interest.

Capítulo 1

Introdução

Neste capítulo apresentamos a motivação para a realização da presente tese e fazemos uma descrição do problema físico a ser abordado, seguido de uma rápida revisão bibliográfica, que irá recordar alguns dos principais modelos matemáticos desenvolvidos para descrever os processos de transferência de calor e massa. Após indicamos os principais objetivos traçados para a realização do trabalho. Para encerrar o capítulo apresentamos um roteiro que foi seguido na organização e elaboração da presente tese.

1.1 Motivação

Em inúmeras situações de interesse tecnológico nos deparamos com problemas de transferência de calor e massa em meios granulares. Dentre esses problemas destacamos o da secagem de grãos, dentre eles os grãos de soja. Neste casos, torna-se necessário o conhecimento de modelos matemáticos capazes de prever a evolução da temperatura e da umidade, tanto do ar que envolve o meio granular, como dos próprios grãos.

Atualmente o Brasil, especialmente nas regiões Sul e Centro Oeste, é um dos grandes produtores de grãos, principalmente de soja, que é destinada na sua maioria para as indústrias de produção de óleos e de alimentação humana e animal, tanto no mercado interno como no exterior. Já se verifica também o desenvolvimento de tecnologias para a redução do consumo de petróleo, tentando utilizar óleos de origem

vegetal.

Para se ter maior segurança na secagem, garantindo a conservação da qualidade dos grãos e para evitar desperdícios, é importante que se tenha, no momento da secagem, controle das temperaturas do ar e dos grãos, das trocas de calor e massa entre os grãos e o ar, bem como dos teores de umidade no interior de todo o secador [72]. Tais necessidades, associadas aos elevados custos da construção de protótipos baseados em modelos teóricos, têm aumentado a importância do desenvolvimento de pesquisas de modelos matemáticos, com simulações das condições de secagem e armazenamento, baseadas em dados experimentais.

Muitos trabalhos sobre processos de transferência de calor e massa são apresentados na literatura. Dos trabalhos encontrados nesta linha de pesquisa, a maioria se refere a processos de secagem. Na seqüência, faremos uma exposição do problema físico de secagem artificial (objetivo desta pesquisa) a ser resolvido, seguido de um breve apanhado dos principais trabalhos encontrados na literatura sobre esse tema.

1.2 O problema físico

Os grãos de cereais em geral, entre eles os de soja, são formados por um composto de matéria seca e úmida. De acordo com Puzzi [72], a composição química de um grão varia com vários fatores, tais como as condições ambientais, a variedade do produto e o próprio teor de umidade. Uma composição média de um grão de soja em condições ideais para a estocagem e/ou comercialização, segundo este autor, é dada na tabela 1.1.

Quando a quantidade de água está muito acima dos 10% (base úmida), é necessário que os grãos passem por um processo de secagem antes do armazenamento com o objetivo de retirar a água excedente.

Para uma boa conservação dos grãos estocados, evitando oscilações muito bruscas nos preços de mercado, devem ser tomados alguns cuidados de forma que sua composição química seja conservada em seu estado natural. Segundo Puzzi [72], os principais fatores que alteram as características dos grãos, comprometendo o seu

Tabela 1.1: Composição média dos grãos de soja em condições ideais para a estocagem [72]

Componente	% em massa (base úmida)
matérias proteicas	35%
carboidratos	26%
matérias graxas	19%
água	10%
celulose	5%
cinzas	5%

valor comercial e nutritivo, são de ordem física e biológica. Os principais fatores físicos são a temperatura elevada e a umidade da massa de grãos armazenados. Já como fatores biológicos destacam-se a ação de microorganismos, insetos e ácaros. Evidentemente, o desenvolvimento dos fatores biológicos depende em grande parte dos fatores físicos. Daí a necessidade de manutenção de temperaturas não muito elevadas e, principalmente, da secagem dos grãos antes de seu armazenamento.

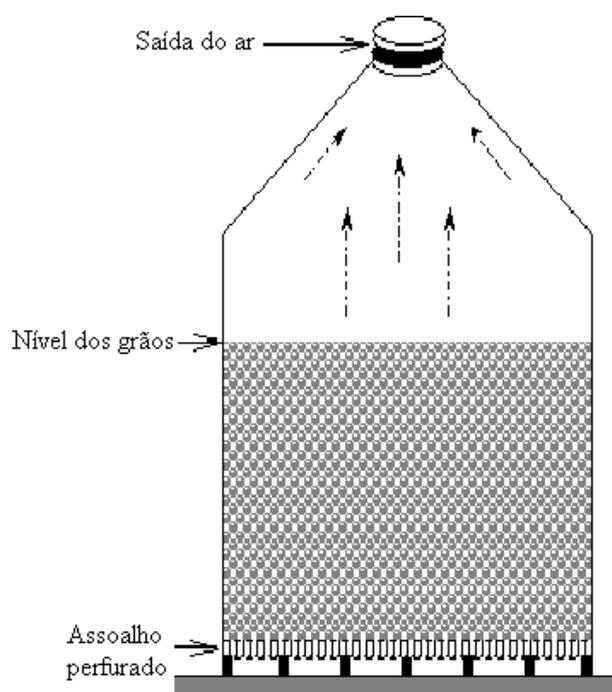


Figura 1.1: Esquema de um secador de leite fixo em forma de silo (corte vertical)

Existem no mercado inúmeros tipos de secadores, dentre os quais os de leito fixo (figura 1.1), no interior do qual uma grande massa de grãos úmidos é depositada para iniciar a secagem. A secagem artificial dos grãos ocorre devido a um fluxo de ar, geralmente quente, que é forçado através de um sistema de ventilação a passar pelo meio granular, absorvendo a umidade contida na superfície do grão e provocando um gradiente de umidade no interior do mesmo, além do gradiente de energia (no caso do fluxo de ar quente); este provoca um fluxo de água do centro para a superfície do grão. Essa massa de água que aparece na superfície é novamente removida pelo ar quente que passa por entre os grãos. Assim, quanto maior a temperatura do ar de secagem, maior será o gradiente de temperatura provocado, o que tende a acelerar o processo de secagem, podendo gerar trincas devido às tensões que provocam a rachadura da casca dos grãos [72].

A água no interior do grão pode estar na forma de moléculas de água ligadas a grupos moleculares de matéria biológica ou, então, na forma de grupos moleculares de água líquida ou na forma de vapor no interior de pequenos poros existentes nos grãos [72]. A água na forma de moléculas ligadas à matéria biológica é muito difícil de ser removida. Já a forma de grupos moleculares de água líquida ou a forma de vapor permite uma remoção mais fácil, e acredita-se que seja essa água que é retirada dos grãos durante os processos de secagem.

Quando a distribuição de água no interior do grão não é uniforme, formam-se gradientes de concentração, fazendo com que a água se desloque dos pontos de maior concentração para os de menor concentração. Nos processos de secagem com ar aquecido, o calor é transferido para o grão e provoca a mudança de fase da água, além do aquecimento de toda a massa do grão. Formam-se, assim, gradientes de pressão de vapor que também são responsáveis pelo deslocamento de água no interior dos grãos. Assim, quando a pressão de vapor parcial na superfície do grão é maior que a pressão parcial do vapor no ar, ocorre a transferência de vapor de água do grão para o ar, o que caracteriza a secagem. Quando as pressões parciais de vapor no ar e na superfície do grão são iguais, ocorre o equilíbrio e o teor de umidade do grão, neste caso, é chamado de teor de umidade de equilíbrio [36].

A secagem de produtos agrícolas pode ser definida como um processo simultâneo

de transferência de calor e massa entre o produto e o ar de secagem. De fato, quando ocorre o fluxo de ar quente por entre a massa de grãos contidos no interior da câmara de secagem, ocorre a transferência de energia do ar para os grãos pelo processo de convecção. Essa energia é rapidamente distribuída para o interior do grão, aquecendo toda a matéria e vaporizando parte da água contida no grão, aumentando a pressão parcial de vapor no interior do mesmo e provocando, conseqüentemente, um gradiente de pressão entre o grão e o ar.

Por outro lado, o ar aquecido possui maior poder de absorção de vapor de água. Devido ao gradiente de pressão parcial de vapor e a diferença de concentração de vapor de água entre a superfície do grão e o ar, ocorre a transferência de vapor de água entre o grão e o ar. Na seqüência, o vapor é levado juntamente com o ar para fora da câmara. Uma vez retirada a umidade da superfície do grão, acentua-se novamente o gradiente de pressão e de concentração de vapor entre o interior e a superfície do grão, provocando nova migração da umidade do centro para a superfície, dando continuidade ao processo.

No início do processo de secagem a quantidade de calor e massa transferida é mais acentuada, diminuindo ao longo do tempo. A transferência de calor diminui à medida que a temperatura dos grãos se aproxima da temperatura do ar de secagem na entrada da câmara, tornando o gradiente de temperatura pequeno. Já a diminuição do teor de umidade dos grãos ao longo do tempo, faz com que o gradiente de umidade e de pressão de vapor entre os grãos e o ar também diminua, de forma que quando o teor de umidade se aproxima da umidade de equilíbrio, a transferência de massa se torna praticamente desprezível.

Nos experimentos realizados e apresentados em Khatchatourian et al. [34] verificou-se que na abertura da câmara de secagem, imediatamente após cessado o processo de secagem, a superfície dos grãos encontrava-se sem água líquida e, após um curto intervalo de tempo, apareceram gotas de água ao redor dos grãos. Isso reforça a idéia de que a água sai do grão na forma de vapor e que ela condensou posteriormente, uma vez que neste momento não havia mais o fluxo de ar quente que a transportasse.

O processo de secagem intermitente consiste em submeter os grãos a um fluxo de ar aquecido por um determinado período de tempo, seguido de outro período de

tempo de secagem com ar não aquecido (temperatura ambiente), que pode ter sua passagem forçada por entre a massa de grãos por um sistema de ventilação, ou então pela convecção natural, uma vez que ao fim do período de secagem com ar quente, os grãos encontram-se a uma temperatura superior à temperatura do ar ambiente que está sobre o secador. A vantagem desse tipo de secagem, está na redução do consumo de energia.

Apesar do modelo apresentado poder ser útil em outras aplicações, o presente trabalho se deterá nos processos de secagem de grãos de soja, uma vez que a literatura (Borges [9], Katchatourian [34] e Weber [92]) fornece mais dados experimentais, o que facilita a comparação e a conseqüente validação do modelo usado.

Compreendido o problema físico, na seção que segue serão enumerados alguns modelos que descrevem o processo de secagem de diversos produtos encontrados na literatura.

1.3 Alguns modelos de transferência de calor e massa para secagem

A secagem artificial de grãos ocorre pela passagem de um fluxo de ar por entre a massa de grãos. De acordo com Parry [61], os modelos matemáticos dos processos de secagem podem ser classificados como modelos logarítmicos e exponenciais, modelos simplificados de balanço de calor e massa e modelos baseados em equações diferenciais parciais.

Os modelos logarítmicos e exponenciais foram os primeiros a serem desenvolvidos devido a simplicidade na obtenção de soluções. Na seqüência foram desenvolvidos diversos modelos empíricos e semi-empíricos baseados em balanços de massa e de calor, porém com grandes simplificações com o objetivo de facilitar a obtenção de soluções com recursos computacionais ainda não muito avançados. Já com a evolução da computação científica, os modelos de secagem baseados em equações diferenciais parciais com menor número de restrições tem ganho força [61].

Existem vários tipos de modelos dos processos de secagem, sendo a maioria deles em regime permanente. Segundo Borges [9], os modelos que não consideram a

alteração das propriedades físicas nas variáveis espaciais são conhecidos por modelos de camada fina, sendo as grandezas envolvidas, como temperatura e umidade, consideradas uniformes em todas as posições do secador a cada instante. Já os que consideram essas variações são chamados de modelos de leito profundo. Além disso, os modelos também podem ser classificados em empíricos, semi-empíricos e teóricos [61]. Os primeiros são resultado do ajuste de curvas a partir de valores experimentais, os teóricos são baseados unicamente nas equações de transporte de calor e de massa e os semi-empíricos são uma mescla dos outros dois.

Diversos modelos empíricos e semi-empíricos têm surgido nos últimos anos tentando explicar os fenômenos de transporte de massa e de calor envolvidos na secagem [63]. Uma das limitações de vários desses modelos é que eles geralmente são aplicáveis somente a pequenas faixas das grandezas envolvidas, como a temperatura do ar de secagem dentro das quais foram obtidos.

Brooker et al. [12] afirmaram que a secagem de produtos agrícolas em camadas finas apresenta duas fases distintas: uma com taxa constante de secagem e outra com taxa decrescente de secagem. A fase de taxa constante pode ser observada na secagem de produtos biológicos com umidade inicial acima de 70% em base úmida. Normalmente, acima dessa faixa de umidade, a resistência interna ao transporte de água é muito menor que a resistência externa à remoção de umidade da superfície. A fase de taxa decrescente, por outro lado, caracteriza-se pela descontinuidade do fluxo de água na superfície de evaporação. A resistência interna ao transporte de umidade torna-se maior que a resistência externa. O segundo caso teria maior interesse prático, visto que praticamente todos os produtos chegam aos secadores com percentuais de umidade bem abaixo dos 70% [12].

Uma classificação das abordagens da modelagem dos fenômenos de transporte em meios porosos é encontrada no trabalho de Laurindo e Prat [38], segundo a qual temos abordagens contínuas e discretas. As primeiras consideram o meio como uma massa contínua. Segundo esses autores, algumas situações ainda são impossíveis de serem simuladas usando essa hipótese, mas admitem a razoável concordância dos resultados desses métodos com os dados experimentais. As abordagens discretas usam a teoria de fractais e métodos da física estatística. Ainda, segundo esses

autores, essas abordagens, apesar de detalharem mais os fenômenos que ocorrem na transferência de calor e massa, ainda estão em desenvolvimento e não são adequadas para o uso em softwares de controle ou em projetos de secadores industriais.

Simmonds et al., em 1953, conforme Borges [9], propuseram um modelo para descrever o teor de umidade do grão onde este teor é dado por uma função exponencial, ou seja, consideram que a variação da umidade do grão é proporcional à diferença entre a umidade no momento atual e o teor de umidade de equilíbrio.

O teor de umidade de equilíbrio é definido como sendo o limite admitido por um material sujeito a um meio ambiente estável [36]. Em outras palavras, é a umidade final que o grão atingiria caso ficasse tempo suficiente em contato com o ar a uma determinada temperatura e umidade. Assim, seu valor é determinado como função dessas duas grandezas.

Boyce, em 1965 [10] [11], considerou o aquecimento dos grãos durante a secagem apresentando um modelo semi-empírico estacionário de leito profundo subdividido em várias camadas finas, no interior das quais as propriedades como temperatura e umidade eram calculadas.

Em 1966 Luikov [44] apresentou um modelo baseado nas equações de transporte de calor e massa e da quantidade de movimento. Devido à complexidade de sua solução, na época foi sugerido por vários autores o desprezo dos gradientes de pressão, gradientes de difusão térmica e a evaporação interna, tornando-o um modelo bem simples com apenas duas equações diferenciais parciais autônomas.

Em 1973 Morey e Cloud [55] apresentaram um modelo matemático para avaliar o desempenho de secadores de fluxo cruzado com múltiplas colunas de secagem. Neste tipo de secador o ar é forçado perpendicularmente em todas as colunas, sendo que os grãos entram úmidos na terceira coluna e são recirculados na segunda e na primeira coluna simultaneamente.

Nellist em 1987 [56] desenvolveu um modelo matemático para secadores de fluxo cruzado com o objetivo de analisar o teor de umidade dos grãos, a temperatura do ar e dos grãos e o consumo de energia no processo de secagem, levando em consideração as condições para a germinação das sementes.

Em 1991 Courtois et al. [19] propuseram um modelo unidimensional em leito

profundo baseado nas equações de balanço de massa e de energia para a secagem de grãos de milho. Para descrever a variação da umidade o grão foi dividido em três partes: a primeira formada pelo núcleo, a segunda a parte intermediária e a terceira a parte periférica do grão, sendo a transferência de massa de uma parte para outra por difusão, com coeficientes obtidos empiricamente. Já para a transferência de calor foi considerada uma camada uniforme. Negligencia-se, nesse modelo, o termo difusivo nas equações de energia e de massa para o ar.

Ahrens e Villela, em 1996 [2], usaram dois modelos de secadores comerciais, um intermitente lento, com a temperatura do ar de secagem a $60^{\circ}C$ e a $65^{\circ}C$ e outro rápido a $50^{\circ}C$, para avaliar a redução do grau de umidade de 20 para 13% e sua influência na qualidade fisiológica das sementes de tremoço azul. Foram realizados testes de germinação e envelhecimento artificial, após a secagem, aos três e seis meses de armazenamento. Segundo os autores desse trabalho, os testes de germinação e envelhecimento artificial não detectaram diferenças significativas entre a qualidade das sementes secadas nos secadores artificiais e daquelas secadas à sombra, sendo que a qualidade fisiológica das sementes de tremoço não é afetada pela secagem nos diferentes secadores.

Em trabalho mais recente, Ahrens et al. [3] avaliaram a qualidade física e fisiológica das sementes de trigo em função da utilização de gás liquefeito de petróleo (GLP) na secagem estacionária e determinaram a curva de secagem em comparação à secagem estacionária em estufa. Sementes de trigo, com teor de água inicial de 15,3%, foram secas até 12,6% em um secador. De acordo com a conclusão dos autores, os resultados dos testes de germinação e vigor mostram a possibilidade de utilização do gás liquefeito de petróleo como combustível na secagem estacionária de sementes de trigo.

Liu et al., em 1997 [41] [42] [43], apresentaram um modelo estocástico para secagem de grãos em fluxo cruzado para avaliar a distribuição da umidade, a temperatura do ar e a taxa do fluxo de ar em uma amostra de milho. Em trabalho posterior, os mesmos autores apresentam um controlador automático do processo de secagem [40].

Oliveira e Haghghi em 1998 [57] [58] usaram um modelo baseado nas equações

propostas por Luikov para descrever a transferência de calor e massa dentro do grão e as equações de Navier-Stokes para o escoamento externo. Resolveram o sistema de equações obtido, usando elementos finitos, considerando o fluxo convectivo externo laminar, escala de comprimento característico da secagem média muito menor que a do fluxo externo, a interface entre os dois domínios sem espessura e com equilíbrio instantâneo em toda a interface para cada espaço de tempo. Nas simulações apresentadas nestes trabalhos, os autores consideraram duas situações, a de um e de dois grãos esféricos sujeitos a um escoamento de ar, analisando a influência da velocidade do ar sobre a variação do teor de umidade do grão.

Marinos-Kouris et al. [48] abordam a secagem de grãos como um sistema complexo, considerando o planejamento e o projeto de sistemas de secagem. Em seu trabalho utilizam modelos matemáticos com a finalidade de obter o controle da temperatura e da umidade do ar, análise do dimensionamento da estrutura, condições de operação, custos de operação e o desempenho dos equipamentos. Um software foi desenvolvido para fornecer informações sobre cada bloco do sistema, isto é, sobre o funcionamento do secador, dimensionamento e custos, avaliação econômica, etc, na tentativa de otimizar cada solicitação do projetista.

Reis e Carroci [75] fizeram uma análise do consumo de energia para diferentes tipos de secadores. Fizeram também comparações de resultados obtidos através de modelos matemáticos com dados experimentais medidos em secadores de laboratório para secagem de amido de mandioca.

Mhimid et al., em 1999 [51] [52], analisaram a secagem em leito profundo em uma dimensão com fluxo vertical de ar quente, estando as paredes do secador sujeitas às condições de Neumann e de Dirichlet. Consideraram, ainda, dois modelos matemáticos para a transferência de calor: o modelo de equilíbrio local, onde o ar e o grão são considerados ter a mesma temperatura para um mesmo volume de controle, e o modelo de não equilíbrio local, onde é considerada a variação entre a temperatura do ar e do grão. As equações são resolvidas com o método de volumes finitos.

Zhihuai e Chongwen [97] fizeram simulações buscando otimizar secadores de grãos com fluxo cruzado. Um sistema de equações diferenciais parciais foi usado

para simular a variação da temperatura e da umidade do grão e a otimização da função de consumo de energia. Em seu trabalho os autores concluíram que nas condições de operação, pequenas mudanças na estrutura e nas dimensões do secador resultam em efeitos significativos na performance do equipamento.

Cavalcanti et al. [15] desenvolveram um programa computacional para a simulação de secagem de vários produtos em secadores de camada estacionária. Segundo os autores, o programa desenvolvido apresentou uma simulação satisfatória do processo de secagem no intervalo de temperatura entre 40 e 80°C, em secador de camada estacionária para arroz, café, feijão, milho, milho branco, soja e trigo.

Rumsey e Rovedo, em 2001 [79], usaram um modelo dinâmico bidimensional para secagem de arroz em secador de fluxo cruzado para avaliar as contribuições de mudanças na umidade inicial do produto, da temperatura do ar de secagem e do fluxo dos grãos. O modelo matemático foi resolvido usando um método preditor-corretor. Analisaram também o efeito que a variação da umidade do produto no início da câmara de secagem provoca nos valores da umidade no final da câmara ao longo do tempo.

Khatchatourian et al. [33] [34] adaptaram o modelo de Courtois et al. [19] para o problema de secagem de grãos de soja em leito profundo, considerando o grão como uma massa homogênea. Esse modelo é constituído de um conjunto de quatro equações diferenciais parciais, onde o termo de transferência de massa é obtido a partir de dados experimentais. Consideraram, neste modelo, que a taxa de variação do teor de umidade ao longo do tempo é proporcional a um termo definido pelo fluxo de massa, calculado com função da temperatura a partir de dados experimentais com aproximações por polinômios de segundo grau. Ainda neste trabalho foram feitas simulações com vários esquemas numéricos em diferenças finitas e os resultados foram comparados com dados experimentais de secagem em secadores de leito profundo, obtendo uma aproximação razoável para a faixa de temperaturas avaliada, ou seja, até 65°C, faixa para a qual foi obtida a expressão de Φ_m .

Weber et al. [92] [93] apresentam uma série de dados experimentais para a secagem intermitente de grãos de soja, comparando-os com simulações feitas pelo

modelo apresentado por Khatchatourian et al. [33] [34].

Borges, em 2002 [9], fez novas simulações usando o mesmo modelo sugerido em [33]. Além disso apresenta dados experimentais, com temperaturas do ar de secagem chegando até 110°C com secagem em camadas finas. O modelo usado apresenta boa concordância com os dados experimentais para temperaturas baixas, porém para temperaturas elevadas surgem diferenças significativas entre os valores calculados e os experimentais.

Srivastava e John, em 2002 [86], adaptaram as equações de um modelo de secagem em camadas finas para obter os valores da umidade do ar e a temperatura do ar e dos grãos em leito profundo considerando variações da altura do secador. Um esquema numérico implícito e o método de Runge-Kutta foram usados na solução das equações envolvidas.

Em 2003, Hao e Tao [29] apresentaram um modelo matemático tridimensional para descrever a transferência de calor devido a um fluxo de ar em um meio granular. Eles consideraram a convecção forçada na direção horizontal. Simulações numéricas também foram apresentadas para a solução das equações governantes. O modelo prevê transferência de calor em duas fases (líquido e sólido) e características de mudança de fase. A solução das equações do modelo foi feita por um esquema em diferenças finitas.

Tirawanichakul et al. [89] usaram um modelo baseado no balanço de energia e massa, com uma equação empírica exponencial para descrever o teor de umidade dos grãos de arroz. O modelo foi aplicado para temperaturas do ar de secagem em torno de 30°C . Neste trabalho também foram realizados testes experimentais para verificar a influência da temperatura de secagem e da umidade na manutenção da qualidade do produto.

Cunha et al. [22] [49] estudaram a viabilidade de secar café cereja descascado pela aplicação de microondas para auxiliar na secagem convencional a ar quente, a fim de reduzir o tempo de processamento, com o aumento do rendimento industrial e da qualidade do produto perante os métodos tradicionais de secagem. Dois ciclos de secagem foram testados: o processo em secador rotativo convencional a ar quente, com umidade do produto reduzida de 45 – 50 a 11 – 13% (base úmida) e o processo

subdividido em uma primeira etapa de pré-secagem convencional a ar quente de 45 – 50 a 30%, seguida de etapa de secagem final por ar quente e microondas, com redução de 30 para 11 – 13% de umidade do produto. Segundo os autores do trabalho, o tempo global do primeiro para o segundo ciclo de secagem foi reduzido significativamente.

Aguerre e Suarez [1], em 2004, afirmaram que a secagem de sólidos úmidos envolve processos simultâneos de transferência de calor e massa bastante complicados e que uma série de simplificações normalmente são usadas para reduzir a complexidade dos modelos que envolvem esses fenômenos. Eles usaram um modelo unidimensional isotérmico baseado na equação de difusão de água em grãos e outros produtos com amido. A variação do teor de umidade foi dada pela Lei de Fick, onde o coeficiente de difusão de massa era calculado como função do teor de umidade.

Resio et al. [76] também usaram um modelo de secagem onde a variação do teor de umidade era dado pela Lei de Fick. Eles apresentaram uma outra expressão para o coeficiente efetivo de difusão. Segundo os autores, este coeficiente é função da temperatura e da energia de ativação para a difusão, que é calculada a partir da equação de Clausius-Clapeyron. Os resultados apresentados por eles referem-se a temperaturas de secagem na faixa de $40^{\circ}C$ até $70^{\circ}C$.

Gastón et al. [27] fizeram simulações com o modelo baseado na equação de difusão de massa como nos trabalhos citados de Aguerre e Suarez [1] e Resio et al. [76] para os casos de secagem de grãos de trigo a temperaturas constantes e variáveis. Avaliaram também a influência da geometria considerada para o grão (esferas e elipsóides) e a influência de variações nas condições de contorno. As equações do modelo foram resolvidas numericamente pelo esquema em diferenças finitas por Crank-Nicolson. Propuseram uma expressão para o cálculo do coeficiente efetivo de difusão como função da temperatura e do teor de umidade inicial dos grãos para temperaturas na faixa de $35^{\circ}C$ até $70^{\circ}C$.

Fregolente et al. [26] apresentaram um estudo com a finalidade de estimar a condutividade térmica efetiva radial e o coeficiente efetivo de transferência de calor entre a parede e o leito de secagem de vários grãos. Para evitar a interferência do transporte de massa, os autores estimaram os parâmetros térmicos efetivos no final

da secagem, quando o teor de umidade dos grãos que compõem o leito alcança valores de equilíbrio, deixando de existir a transferência de massa, persistindo apenas a transferência de calor em regime permanente. Em seu trabalho, os autores afirmam que dentre os grãos estudados - soja, feijão, milho e trigo - a soja apresenta os menores valores de condutividade efetiva radial, enquanto o trigo apresenta o maior valor do coeficiente de transferência de calor parede-leito.

Meng e Hu, em 2005 [50], propuseram um modelo para avaliar o resfriamento natural de uma camada de um meio poroso e úmido depositado num telhado, bem como o processo de vaporização envolvido.

Prachayawarakorn et al. [71], num trabalho em que discutem a manutenção da qualidade na secagem a altas temperaturas, também apresentam uma expressão para o coeficiente efetivo de difusão como função apenas da temperatura.

Sarat e Sakamon [80] investigaram experimentalmente os efeitos de parâmetros envolvidos no processo de secagem de grãos de soja, tais como a velocidade e a temperatura do ar na entrada do leito de secagem, altura do leito, duração do aquecimento, no processo de secagem e na manutenção das características do produto.

Marini et al. [47] avaliaram os efeitos imediatos resultantes da combinação da temperatura do ar na secagem intermitente e da relação de intermitência sobre a estabilidade de grãos de aveia armazenados pelo sistema convencional por doze meses. As avaliações foram realizadas periodicamente a partir da instalação dos experimentos sendo determinados o teor de lipídios, o índice de acidez, a composição em ácidos graxos, a atividade residual das enzimas lipase e peroxidase. Os autores concluíram que a secagem intermitente com temperaturas do ar de até $105^{\circ}C$ não provoca inativação enzimática em grãos de aveia. Ainda de acordo com este trabalho, a diminuição do teor de lipídios e o aumento do índice de acidez durante o armazenamento são maiores em grãos secos em condições mais drásticas.

Ribeiro et al. [77] avaliaram o efeito da secagem nas propriedades físicas dos grãos de soja, tais como a massa específica real e aparente e a contração volumétrica dos grãos durante o processo de secagem. Com base em dados experimentais, os autores afirmaram que a redução do teor de água na faixa entre 0,31 e 0,15 (base seca) provoca diminuição linear da porosidade e aumento das massas específicas

aparente e real.

Petry et al. apresentam, em seus trabalhos [62] a [68], um modelo para descrever os processos de transferência de calor e massa em meios granulares baseado nas equações de Navier-Stokes. Os termos fonte foram obtidos a partir do balanço de massa e de energia para o ar e para os grãos. Para o termo fonte da equação de transporte de massa considerou-se um coeficiente de difusão de massa entre o grão e o ar e obteve-se uma expressão para o cálculo desse coeficiente de difusão a partir de dados experimentais. O coeficiente de difusão de massa entre o grão e o ar proposto é calculado como função da velocidade do ar, da temperatura e da diferença entre o teor de umidade do grão e o teor de umidade de equilíbrio. Estes trabalhos estão relacionados ao estudo apresentado nesta tese.

Uma boa parte dos trabalhos encontrados na literatura sobre transferência de calor e massa usam modelos baseados em um conjunto de equações diferenciais parciais. Muitas simplificações ou modelos semi-empíricos são utilizados no intuito de facilitar a solução dos sistemas.

Para resolver numericamente um conjunto de equações diferenciais parciais, estas podem ser discretizadas por inúmeros métodos, dentre eles: diferenças finitas, volumes finitos e elementos finitos. Nesta tese, a solução numérica do problema será feita em diferenças finitas.

Feita uma breve revisão bibliográfica sobre os processos de transferência de calor e massa, apresentamos, na próxima seção, os objetivos para o desenvolvimento da presente tese.

1.4 Objetivos do trabalho

Nesta seção apresentamos os principais objetivos norteadores do trabalho. Eles foram subdivididos em objetivos gerais e específicos.

1.4.1 Objetivos gerais

Como objetivos gerais para o desenvolvimento desta tese destacamos:

- apresentar um modelo matemático para descrever os processos de transferência

de calor e massa em meios granulares;

- fazer um comparativo entre soluções analíticas e numéricas para um problema físico tão próximo quanto possível do problema real;
- validar o modelo através de comparações com dados experimentais;
- verificar a influência de alguns parâmetros adimensionais nos processos de transferência de calor e massa.

Esses objetivos gerais serão alcançados através da realização de outros objetivos mais específicos, que são apresentados na seqüência.

1.4.2 Objetivos específicos

Como objetivos específicos para a realização do trabalho nos propomos a:

- obter um sistema de equações governantes para o modelo;
- obter uma expressão para calcular o coeficiente convectivo de transferência de massa entre o ar e os grãos;
- desenvolver códigos computacionais em FORTRAN 90 para a obtenção das soluções numéricas;
- encontrar uma solução analítica para o problema de transferência de calor e/ou massa não homogêneo com os termos convectivo e difusivo e condições iniciais e de contorno não homogêneas;
- comparar valores numéricos com dados experimentais para temperaturas do ar de secagem na faixa de $55^{\circ}C$ a $110^{\circ}C$ e velocidade do ar de secagem na faixa de $0,5m.s^{-1}$ a $4,75m.s^{-1}$;
- comparar valores numéricos com dados experimentais para o processo de secagem intermitente;
- fazer simulações numéricas para vários valores dos parâmetros adimensionais envolvidos no problema;

- fazer simulações do problema de secagem para o caso bi-dimensional com a finalidade de verificar a influência da posição horizontal dos grãos nos valores da temperatura e do teor de umidade dos grãos.

1.5 Roteiro do trabalho

Apresentamos nesta seção um roteiro do que será discutido nos próximos capítulos.

No capítulo 2 define-se o problema a ser abordado e as principais hipóteses ou simplificações usadas. Obtém-se as equações governantes do modelo através de um balanço de massa e de energia para o ar e as esferas sólidas. Uma equação é proposta para o cálculo do coeficiente de difusão de massa entre o ar e os grãos. Faz-se também a adimensionalização das equações governantes e as condições iniciais e de contorno do problema são apresentadas.

Formulado o problema, no capítulo 3 apresenta-se o esquema a ser usado para a obtenção da solução numérica. Faz-se um estudo da consistência e da ordem no tempo e no espaço do esquema usado para as equações de balanço de energia e umidade do ar para o caso unidimensional. Usando a transformada discreta de Fourier, as condições de estabilidade e de convergência do esquema são estabelecidas. Ainda, neste capítulo, apresenta-se uma solução analítica para essa equação comparando-a com a solução numérica para uma função teste no termo fonte.

No capítulo 4 são apresentados os resultados numéricos. Comparações com dados experimentais de secagem de grãos de soja para amplas faixas de variação da temperatura, da velocidade do ar de secagem e da umidade inicial dos grãos também são realizadas. Simulações do processo intermitente de secagem de grãos de soja também são realizadas neste capítulo, comparando-se os valores resultantes do modelo com dados experimentais encontrados na literatura. Na seqüência, apresentamos simulações para o processo de secagem, considerando o caso em duas dimensões. Faz-se ainda uma avaliação da influência de parâmetros adimensionais envolvidos nos processos de transferência de calor e massa, como os números adimensionais de Reynolds e de Eckert.

Capítulo 2

Equações Governantes

Neste capítulo é apresentado o conjunto de equações governantes do modelo desenvolvido, juntamente com suas respectivas demonstrações. Na seqüência, são introduzidas as variáveis adimensionais que permitem a adimensionalização das equações governantes. Por fim, são estabelecidas as condições iniciais e de contorno para o problema.

A câmara de leito fixo considerada nesta tese consiste de um prisma reto de base retangular dentro do qual estão depositadas esferas porosas, conforme mostra a figura 2.1. Considera-se que o processo de transferência de calor e massa inicia quando começa a passagem de ar, geralmente quente, no sentido vertical entre as esferas. Nesta situação, ocorre transferência de calor do ar para os grãos (no caso dos processos de secagem de grãos) e transferência de massa (de água na forma de vapor) das esferas para o ar.

O modelo matemático aqui apresentado consiste de num conjunto de equações diferenciais parciais que descrevem a distribuição de temperatura e da umidade do ar e das esferas no interior da câmara. Para a formulação matemática algumas hipóteses são adotadas, conforme segue:

- a porosidade no interior da câmara é uniforme;
- não há equilíbrio térmico entre as esferas e o ar no interior da câmara;
- a temperatura no interior de cada esfera é uniforme;
- a transferência de calor do ar para as esferas ocorre por convecção;

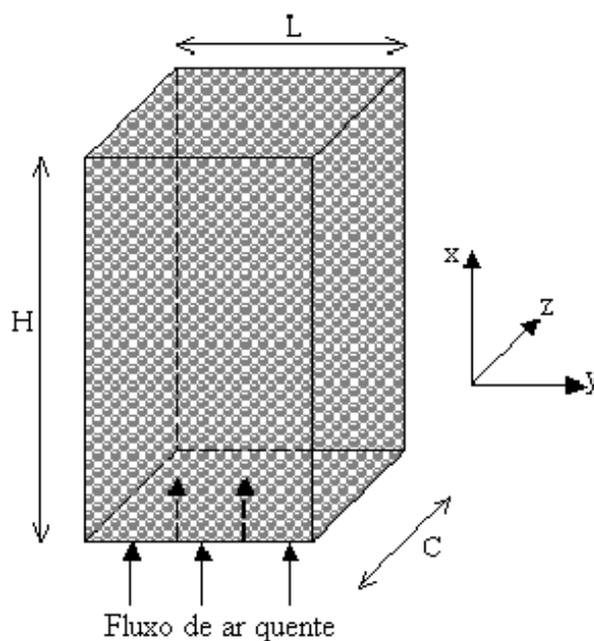


Figura 2.1: Esquema da câmara de Secagem

- a transferência de massa das esferas para o ar acontece por convecção na forma de vapor;
- a transferência de calor no ar ocorre pelos processos de condução e de advecção;
- a transferência de massa de vapor no ar ocorre por difusão e por advecção;
- as paredes da câmara estão termicamente isoladas;
- a velocidade e a temperatura do ar são constantes na entrada da câmara.

Com base nas hipóteses acima expostas, as equações governantes do problema proposto são apresentadas na seção que segue.

2.1 Dedução das equações governantes

Para descrever os processos de transferência de calor e massa num meio granular é importante lembrar alguns conceitos referentes às variáveis envolvidas no problema. Esses conceitos são apresentados nas definições que seguem.

Definição 2.1 Define-se por teor de umidade da esfera em base seca (X) a razão entre a massa de água presente na esfera e a massa de matéria seca da esfera, isto é:

$$X = \frac{m_l}{m_s} \quad (2.1)$$

Definição 2.2 Define-se por teor de umidade do ar em base seca (Y) a razão entre a massa de água presente no ar e a massa de gás (ar) seco, isto é:

$$Y = \frac{m_l}{m_g} \quad (2.2)$$

Por motivo de simplificação das notações, faremos a demonstração das equações para o caso bidimensional; elas podem ser estendidas para o caso tridimensional. Para a dedução do modelo matemático considera-se um volume de controle conforme mostra a figura 2.2.

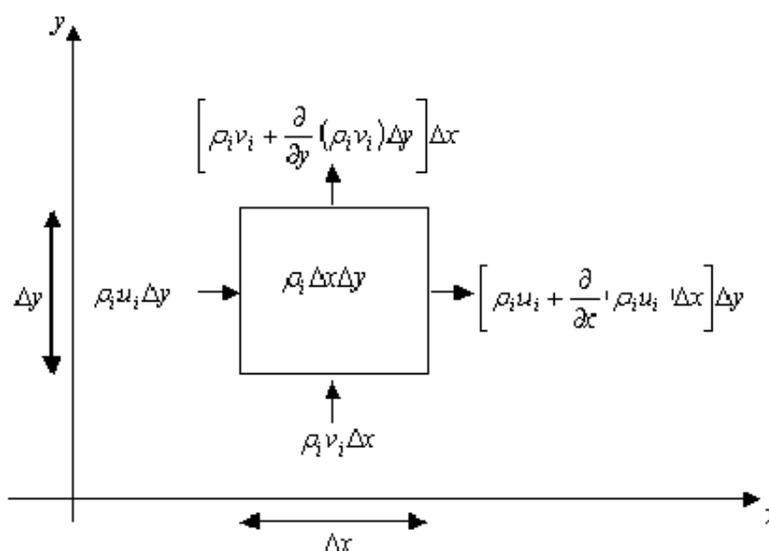


Figura 2.2: Volume de controle

O conjunto de equações governantes do presente modelo inclui a conservação de massa, para o ar e o sólido, e a conservação de energia para o ar e esferas contidas no interior da câmara. Além disso, o fluxo do ar é descrito pela equação da continuidade, pelas equações da quantidade de movimento e pela equação de Poisson.

2.1.1 Equação de conservação de massa para o ar

A equação de conservação de massa segue do balanço de massa no interior do volume de controle (Figura 2.2). Consideremos $\vec{u} = u\vec{i} + v\vec{j}$. Assim resulta para a espécie i :

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\frac{\partial(u_i \rho_i)}{\partial x} - \frac{\partial(v_i \rho_i)}{\partial y} + \dot{m}_i \quad (2.3)$$

o que equivale a:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\frac{\partial(j_{x,i} + \rho_i u)}{\partial x} - \frac{\partial(j_{y,i} + \rho_i v)}{\partial y} + \dot{m}_i \quad (2.4)$$

onde \dot{m}_i representa a taxa de geração de massa da espécie i e $(u_i - u)$ é a velocidade de difusão de espécie i na direção x . O produto $\rho_i(u_i - u)$ é o fluxo mássico por unidade de volume da espécie i na direção x relativo ao movimento da mistura. Denominando essa quantidade por fluxo de difusão [7] podemos escrever:

$$j_{x,i} = \rho_i(u_i - u) \quad e \quad j_{y,i} = \rho_i(v_i - v) \quad (2.5)$$

Fazendo $\vec{j}_i = j_{x,i}\vec{i} + j_{y,i}\vec{j}$ temos:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\rho_i \vec{\nabla} \cdot \vec{u} - \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \rho_i - \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_i + \dot{m}_i \quad (2.6)$$

Substituindo a equação (2.2) em (2.6) podemos escrever:

$$\frac{\partial(\rho_g Y)}{\partial t} = -\rho_g Y \vec{\nabla} \cdot \vec{u} - \vec{u} \cdot \vec{\nabla}(\rho_g Y) - \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_i + \dot{m}_i \quad (2.7)$$

ou

$$\rho_g \frac{\partial Y}{\partial t} + Y \frac{\partial \rho_g}{\partial t} = -\rho_g Y \vec{\nabla} \cdot \vec{u} - \rho_g \vec{u} \cdot \vec{\nabla}(Y) - Y \vec{u} \cdot \vec{\nabla}(\rho_g) - \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_i + \dot{m}_i \quad (2.8)$$

o que pode ser escrito na forma:

$$\rho_g \frac{\partial Y}{\partial t} + Y \left[\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \rho_g \vec{\nabla} \cdot \vec{u} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla}(\rho_g) \right] = -\rho_g \vec{u} \cdot \vec{\nabla}(Y) - \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_i + \dot{m}_i \quad (2.9)$$

Considerando a equação de conservação de massa a equação (2.9) resulta em:

$$\rho_g \frac{\partial Y}{\partial t} = -\rho_g \vec{u} \cdot \vec{\nabla} Y - \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_i + \dot{m}_i \quad (2.10)$$

Da Lei de Fick segue que $\vec{j}_i = -D \vec{\nabla} \rho_i$ [7], onde D é a difusividade mássica e ρ_i a concentração mássica da espécie i . Segue, portanto, que $\vec{j}_i = D \vec{\nabla}(\rho_g Y)$ e assim a equação (2.10) toma a forma:

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = -\vec{u} \cdot \vec{\nabla} Y + D \nabla^2 Y + \frac{\dot{m}}{\rho_g} \quad (2.11)$$

para D e ρ_g considerados constantes.

Do princípio da conservação de massa, temos que a massa de água transferida ao ar é igual à massa que sai das esferas. Portanto, a taxa de geração de massa por unidade de volume é dada por:

$$\dot{m} = -\frac{1}{\phi V_c} \frac{\partial m_l}{\partial t} \quad (2.12)$$

o que equivale a:

$$\dot{m} = ah_m \frac{(1 - \phi)}{\phi} \Delta C \quad (2.13)$$

onde a é a razão entre a área e o volume de uma esfera, h_m o coeficiente convectivo de transferência de massa entre o grão e o ar, ϕ a porosidade do meio granular, V_c o volume e $\Delta C = (\rho_s X - \rho_g Y)$ a variação de concentração mássica entre as esferas e o ar.

Finalmente, a equação de balanço da umidade do ar, para D , h_m e ρ_g constantes, toma a forma:

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = -\vec{u} \cdot \vec{\nabla} Y + D \nabla^2 Y + \frac{a(1 - \phi)}{\rho_g \phi} h_m (\rho_s X - \rho_g Y) \quad (2.14)$$

2.1.2 Equação de conservação de massa para as esferas

Das equações (2.12) e (2.13) segue que:

$$\frac{\partial m_l}{\partial t} = -V_c ah_m (1 - \phi) \Delta C \quad (2.15)$$

Substituindo (2.1) na equação (2.15) resulta a equação de balanço de massa para as esferas:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = -\frac{a}{\rho_s} h_m (\rho_s X - \rho_g Y) \quad (2.16)$$

onde os subscritos s , l e g representam o sólido, o líquido e o gás (ar), respectivamente.

2.1.3 Equação de conservação de energia para o ar

De forma semelhante ao que foi feito para a obtenção da equação de conservação de massa para o ar, o balanço de energia para o volume de controle da figura 2.2

resulta em:

$$\frac{\partial T_g}{\partial t} = -\vec{u} \cdot \vec{\nabla} T_g + \alpha \nabla^2 T_g + \frac{\dot{q}}{\rho_g C_{p_g}} \quad (2.17)$$

onde T_g é a temperatura do ar, α a difusividade térmica e C_{p_g} o calor específico do ar à pressão constante. A taxa de geração de energia por unidade de volume, no interior do volume de controle, \dot{q} , é dada por:

$$\dot{q} = \frac{1}{\phi V_c} \frac{dq}{dt} \quad (2.18)$$

Supondo que toda energia na forma de calor que deixa o ar contido no interior do volume de controle seja transferida para as esferas através do processo de condução térmica, segue da lei de resfriamento de Newton que:

$$\frac{dq}{dt} = h A_s (T_s - T_g) \frac{V_c}{V_s} (1 - \phi) \quad (2.19)$$

onde h é o coeficiente convectivo de transferência de calor entre o ar e as esferas, A_s a área da superfície de uma esfera, T_s a temperatura das esferas e $\frac{V_c}{V_s} (1 - \phi)$ o número de esferas contidas no interior do volume de controle. Assim, temos:

$$\dot{q} = a \frac{1 - \phi}{\phi} h (T_s - T_g) \quad (2.20)$$

Substituindo (2.20) na equação (2.17) resulta a equação de balanço de energia para o ar, na forma:

$$\frac{\partial T_g}{\partial t} = -\vec{u} \cdot \vec{\nabla} T_g + \alpha \nabla^2 T_g + \frac{a}{\rho_g C_{p_g}} \frac{1 - \phi}{\phi} h (T_s - T_g) \quad (2.21)$$

2.1.4 Equação de conservação de energia para as esferas

Uma vez que o calor que entra na esfera é usado para vaporizar a água que deixa o grão na forma de vapor e para o aquecimento da esfera (massa seca + água), podemos escrever: [34]:

$$-h A_s (T_s - T_g) = m_l C_{p_l} \frac{dT_s}{dt} + m_s C_{p_s} \frac{dT_s}{dt} + h_m \Delta C A_s L_v \quad (2.22)$$

onde o termo $h_m \Delta C A_s$ representa a massa de água que está saindo pela superfície do grão e L_v o calor latente de vaporização.

Note que $m_l = m_s X$ e $m_s = \rho_s V_s$, o que implica em:

$$\frac{dT_s}{dt} = \frac{-A_s h (T_s - T_g) - A_s L_v h_m \Delta C}{\rho_s V_s (X C_{p_l} + C_{p_s})} \quad (2.23)$$

Considerando que as esferas encontram-se estáticas no interior da câmara, temos $\frac{dT_s}{dt} = \frac{\partial T_s}{\partial t}$ e, como conseqüência, a equação (2.23) toma a forma:

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{-ah(T_s - T_g) - aL_v h_m (\rho_s X - \rho_g Y)}{\rho_s (X C_{p_i} + C_{p_s})} \quad (2.24)$$

Os valores da difusividade mássica D , do coeficiente convectivo de transferência de massa entre o grão e o ar h_m e do coeficiente convectivo de transferência de calor entre o ar e o grão h foram considerados constantes na dedução das equações; porém, eles são recalculados a cada iteração quando da aplicação do esquema numérico, considerando $D \propto T_g^{1.5}$ [31].

Para o coeficiente convectivo de transferência de massa entre as esferas e o ar desenvolvemos a expressão:

$$h_m = \frac{A \sqrt{|\vec{u}|} T_s^{1.5} X (X - X_e)^n}{H} \quad (2.25)$$

onde A e n foram calculados a partir de dados experimentais. Para obter esses termos foram feitas simulações e seus valores ajustados até conseguir a aproximação desejada. X_e é o teor de umidade de equilíbrio dos grãos, sendo calculado como função da temperatura e da umidade relativa do ar e H é a altura do leito.

Para desenvolver a equação (2.25) considerou-se, inicialmente, a proporcionalidade do coeficiente de difusão com o termo $T^{1.5}$, conforme sugerido em [31]. O fato da transferência de massa ser maior no início do processo, quando o teor de umidade dos grãos é mais elevado, associado com a definição do teor de umidade de equilíbrio, segundo a qual o processo de transferência de massa cessa quando o grão atinge a umidade de equilíbrio, sugere uma proporcionalidade do coeficiente de difusão com o termo $(X - X_e)^n$, ficando o expoente n ($n \sim 1$) para ser obtido a partir de dados experimentais.

Para o termo de dependência da velocidade usa-se a analogia de Chilton-Colburn [18] [17], uma generalização da analogia de Reynolds, segundo a qual em processos convectivos de transferência simultânea de calor e de massa temos:

$$\frac{h}{C_{p_0} \rho_0 U_0} Pr^{2/3} = j_H = j_M = \frac{h_m}{U_0} Sc^{2/3}$$

sendo esta expressão válida para $0,6 < Sc < 2500$ e $0,6 < Pr < 100$, faixas nas quais nosso problema se encaixa. Na expressão anterior j_H e j_M são os fatores de Colburn para a transferência de calor e massa, respectivamente.

Além disso, segundo Sissom e Pitts [83], o fator de Colburn em um meio granular é proporcional a $Re^{-\kappa}$, com $0,41 \leq \kappa \leq 0,51$. Assim, como Pr e Sc independem da velocidade e Re é proporcional à velocidade do ar, segue que o coeficiente de transferência de massa é proporcional a $|\vec{u}|^{(1-\kappa)}$. As comparações dos valores obtidos numericamente com dados experimentais mostraram que $\kappa = 0,5$ aproxima bem essa expressão. Já a constante de proporcionalidade A também é definida experimentalmente.

Analogamente ao coeficiente convectivo de transferência de massa, o coeficiente convectivo de transferência de calor entre o ar e os grãos também é considerado proporcional a $\sqrt{|\vec{u}|}$.

2.1.5 Equações para o fluxo do ar no meio granular

Para descrever o fluxo do ar entre as esferas consideramos o conjunto de equações de movimento conforme segue:

Equação de continuidade:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \quad (2.26)$$

Equação da quantidade de movimento na direção x :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\vec{u} \cdot \vec{\nabla} u - \frac{1}{\rho_g} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \nabla^2 u \quad (2.27)$$

Equação da quantidade de movimento na direção y :

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\vec{u} \cdot \vec{\nabla} v - \frac{1}{\rho_g} \frac{\partial P}{\partial y} + \nu \nabla^2 v \quad (2.28)$$

Equação da quantidade de movimento na direção z :

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\vec{u} \cdot \vec{\nabla} w - \frac{1}{\rho_g} \frac{\partial P}{\partial z} + \nu \nabla^2 w \quad (2.29)$$

Uma vez obtido o conjunto de equações que compõe o modelo será feita, na próxima seção, a adimensionalização dessas equações. As forças de campo nas equações acima são desconsideradas, devido a pouca influência das mesmas nos processos estudados.

2.2 Adimensionalização das equações governantes

Com o objetivo de obter os parâmetros adimensionais envolvidos nos problemas de transferência de calor e de massa, bem como de reduzir o domínio do problema para o intervalo $[0, 1]$ será feito, na seqüência, a adimensionalização das equações governantes do modelo. Para tal procedimento usa-se as seguintes variáveis adimensionais:

$$u^* = \frac{u}{U_0}, v^* = \frac{v}{U_0}, w^* = \frac{w}{U_0}, x^* = \frac{x}{L_c}, y^* = \frac{y}{L_c}, z^* = \frac{z}{L_c}, T^* = \frac{T - T_{amb}}{T_{ar} - T_{amb}}, t^* = \frac{tU_0}{L_c},$$

$$X^* = \frac{X}{X_0}, Y^* = \frac{Y}{Y_0}, \rho_g^* = \frac{\rho_g}{\rho_0}, \rho_s^* = \frac{\rho_s}{\rho_0}, D^* = \frac{D}{D_0}, h_m^* = \frac{h_m L_c}{D_0}, \alpha^* = \frac{\alpha}{\alpha_0}, C_{pw}^* = \frac{C_{pw}}{C_{p0}},$$

$$C_{ps}^* = \frac{C_{ps}}{C_{p0}}, h^* = \frac{h L_c}{K_0}, L_v^* = \frac{L_v}{U_0^2}, a^* = a L_c \text{ e } P^* = \frac{P - P_{atm}}{\rho_0}$$

onde L_c é o comprimento característico, T_{amb} a temperatura do ar ambiente, T_{ar} a temperatura do ar na entrada da câmara, X_0 o teor de umidade inicial das esferas, Y_0 o teor de umidade inicial do ar, ρ_0 a massa específica do ar seco e U_0 a velocidade do ar na entrada da câmara.

Dessa forma, as equações (2.14), (2.16), (2.21), (2.24), (2.26), (2.27), (2.28) e (2.29) podem ser escritas, respectivamente, conforme segue:

$$\frac{\partial Y^*}{\partial t^*} = -\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla} Y^* + \frac{D^*}{ReSc} \nabla^2 Y^* + \frac{a^*(1-\phi)}{\phi \rho_g^* Y_0 ReSc} h_m^* (\rho_s^* X_0 X^* - \rho_g^* Y_0 Y^*) \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial X^*}{\partial t^*} = -\frac{a^*}{\rho_s^* X_0 ReSc} h_m^* (\rho_s^* X_0 X^* - \rho_g^* Y_0 Y^*) \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial T_g^*}{\partial t^*} = -\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla} T_g^* + \frac{\alpha^*}{RePr} \nabla^2 T_g^* + \frac{a^*(1-\phi)}{\phi \rho_g^* C_{pg}^* RePr} h^* (T_s^* - T_g^*) \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial T_s^*}{\partial t^*} = -\frac{Ec}{ReSc} \frac{a^* L_v^*}{\rho_s^* (X_0 X^* C_{pw}^* + C_{ps}^*)} h_m^* (\rho_s^* X_0 X^* - \rho_g^* Y_0 Y^*)$$

$$- \frac{1}{RePr} \frac{a^*}{\rho_s^* (X_0 X^* C_{pw}^* + C_{ps}^*)} h^* (T_s^* - T_g^*) \quad (2.33)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u}^* = 0 \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial u^*}{\partial t^*} = -\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla} u^* - \frac{\partial P^*}{\partial x^*} + \frac{1}{Re} \nabla^2 u^* \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial v^*}{\partial t^*} = -\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla} v^* - \frac{\partial P^*}{\partial y^*} + \frac{1}{Re} \nabla^2 v^* \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial w^*}{\partial t^*} = -\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla} w^* - \frac{\partial P^*}{\partial z^*} + \frac{1}{Re} \nabla^2 w^* \quad (2.37)$$

Para avaliar a pressão no interior da câmara usa-se a equação de Poisson:

$$\begin{aligned} \nabla^2 P^* = & -\frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v^*}{\partial y^*} + \frac{\partial w^*}{\partial z^*} \right) \\ & - \frac{\partial}{\partial x^*} (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla} u^*) - \frac{\partial}{\partial y^*} (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla} v^*) - \frac{\partial}{\partial z^*} (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla} w^*) \\ & + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial}{\partial x^*} (\nabla^2 u^*) + \frac{\partial}{\partial y^*} (\nabla^2 v^*) + \frac{\partial}{\partial z^*} (\nabla^2 w^*) \right] \end{aligned} \quad (2.38)$$

onde temos os seguintes parâmetros adimensionais ou números de:

Reynolds:

$$Re = \frac{U_0 L_c}{\nu}$$

Schmidt:

$$Sc = \frac{\nu}{D_0}$$

Prandtl:

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha_0}$$

Eckert:

$$Ec = \frac{U_0^2}{C_{p0}(T_{ar} - T_{amb})}$$

As faixas para as quais esses parâmetros são considerados nesta tese são: $Re = 200$ a 2000 , $Sc = 0.7$ a 2 , $Pr = 0.7$ a 2 e $Ec = 10^{-5}$ a 5×10^{-5} . Essas faixas correspondem aos valores referentes às variações da temperatura do ambiente e do ar de secagem, da velocidade do ar na entrada da câmara, do comprimento característico adotado (diâmetro médio de um grão) e das propriedades físicas do ar obtidas na literatura [31].

Note que nas equações (2.30-2.38) foram usadas as notações que seguem:

$$\begin{aligned} \vec{u}^* &= u^* \vec{i} + v^* \vec{j} + w^* \vec{k} \\ \vec{\nabla} \cdot \Psi^* &= \frac{\partial \Psi^*}{\partial x^*} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial y^*} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial z^*} \end{aligned}$$

$$\nabla^2 \Psi^* = \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial z^{*2}}$$

Para a solução das equações diferenciais anteriormente obtidas é necessário estabelecer as condições iniciais e de contorno para as variáveis envolvidas, o que é feito na próxima seção.

2.3 Condições iniciais e de contorno

A implementação apropriada de condições iniciais e de contorno é de suma importância para resolver um conjunto de equações diferenciais. Neste trabalho algumas hipóteses são adotadas para a obtenção dessas condições.

No início das simulações a temperatura do ar e das esferas, o teor de umidade do ar e das esferas, as componentes do vetor velocidade e a pressão são consideradas conforme segue:

$$T_s^*(x, y, z, 0) = 0 \text{ para } (x, y, z) \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$$

$$T_g^*(x, y, z, 0) = 0 \text{ para } (x, y, z) \in (0, 1) \times [0, 1] \times [0, 1]$$

$$X^*(x, y, z, 0) = 1 \text{ para } (x, y, z) \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$$

$$Y^*(x, y, z, 0) = 1 \text{ para } (x, y, z) \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$$

$$u^*(x, y, z, 0) = 0 \text{ para } (x, y, z) \in (0, 1) \times [0, 1] \times [0, 1]$$

$$v^*(x, y, z, 0) = 0 \text{ para } (x, y, z) \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$$

$$w^*(x, y, z, 0) = 0 \text{ para } (x, y, z) \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$$

$$P^*(x, y, z, 0) = 0 \text{ para } (x, y, z) \in (0, 1) \times [0, 1] \times [0, 1]$$

Para as condições de contorno na direção x considera-se:

$$T_g^*(0, y, z, t) = 1 \text{ para } (y, z) \in (0, 1) \times (0, 1) \text{ e } t > 0$$

$$\frac{\partial T_g^*}{\partial x^*}(1, y, z, t) = 0 \text{ para } (y, z) \in (0, 1) \times (0, 1) \text{ e } t > 0$$

$$Y^*(0, y, z, t) = 1 \text{ para } (y, z) \in (0, 1) \times (0, 1) \text{ e } t > 0$$

$$\frac{\partial Y^*}{\partial x^*}(1, y, z, t) = 0 \text{ para } (y, z) \in (0, 1) \times (0, 1) \text{ e } t > 0$$

$$u^*(0, y, z, t) = 1 \text{ para } (y, z) \in (0, 1) \times (0, 1) \text{ e } t > 0$$

$$v^*(0, y, z, t) = 0 \text{ para } (y, z) \in (0, 1) \times (0, 1) \text{ e } t > 0$$

$$w^*(0, y, z, t) = 0 \text{ para } (y, z) \in (0, 1) \times (0, 1) \text{ e } t > 0$$

$$P^*(1, y, z, t) = 0 \text{ para } (y, z) \in (0, 1) \times (0, 1) \text{ e } t > 0$$

Nas paredes da câmara, isto é, para $y^* = 0$, $y^* = 1$, $z^* = 0$ e $z^* = 1$, as variáveis T_g^* , Y^* e P^* satisfazem as condições de contorno do tipo Neumann, ou seja:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \vec{n}} = 0$$

onde \vec{n} é o vetor normal à superfície em questão; ainda nas paredes as componentes do vetor velocidade são:

$$u^* = v^* = w^* = 0$$

A pressão P^* em $x^* = 0$ é obtida por extrapolação usando a aproximação que segue:

$$P_{0,j,k}^{n+1} = 0.75P_{1,j,k}^{n+1} + 0.25P_{2,j,k}^{n+1}$$

conforme mostra a figura 2.3.

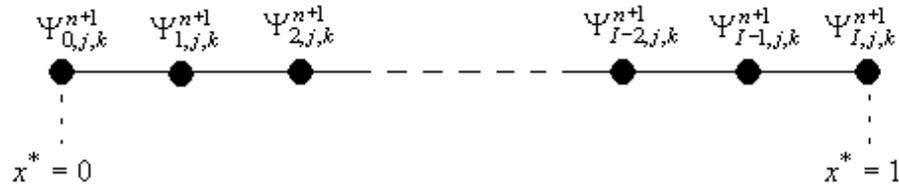


Figura 2.3: Esquema da extrapolação em $x^* = 0$ e $x^* = 1$

Já as componentes do vetor velocidade u^* , v^* e w^* em $x^* = 1$ são obtidas por extrapolação usando a expressão:

$$\Psi_{I,j,k}^{n+1} = 0.75\Psi_{I-1,j,k}^{n+1} + 0.25\Psi_{I-2,j,k}^{n+1}$$

Esta extrapolação é feita de forma que as distribuições da pressão e da velocidade vão se ajustando por toda a câmara, uma vez que seus valores não eram conhecidos nestes pontos.

Uma vez obtido o modelo, a adimensionalização das equações governantes e o estabelecimento das condições iniciais e de contorno, passa-se para o procedimento de solução, o que é feito no próximo capítulo.

Capítulo 3

Procedimento de solução

Neste capítulo será apresentado um esquema numérico para a solução das equações que compõem o modelo apresentado no capítulo anterior, acompanhado da verificação da ordem de convergência do mesmo na discretização do tempo e do espaço. Discute-se ainda a consistência, a estabilidade e a convergência do esquema apresentado para o caso unidimensional. Por fim, obtém-se uma solução analítica para as equações de balanço de energia e de massa no ar. Usando funções teste para o termo fonte, faz-se comparações entre a solução exata e a solução numérica dessas equações com o objetivo de aumentar a confiabilidade ao esquema numérico utilizado.

3.1 Esquema numérico

Para resolver numericamente as equações do modelo matemático apresentado, optou-se pelo método de diferenças finitas, que é um dos métodos mais antigos aplicados à solução numérica de equações diferenciais, tendo assim literatura bastante ampla, onde destacamos as obras de Batchelor [6], Hirsch [30], Ozisik [59], Richtmyer [78], Sod [84] [85], Strikwerda [87], Thomas [88], Zeidler [96] e De Bortoli [24]. Para avaliar melhor o esquema numérico usado apresentaremos, inicialmente, algumas definições clássicas da literatura.

3.1.1 Algumas definições e teoremas

Seja H um espaço de Hilbert e seja o problema de evolução da forma:
encontrar $u \in C^0([0, T]; H)$ satisfazendo no sentido fraco (ou forte, se $u \in D(A)$):

$$\frac{du(t)}{dt} + Au(t) = f(t) \quad (3.1)$$

com condição inicial $u(0) = u_0$, onde $u_0 \in H$, $f \in L^2([0; T] H)$, por exemplo, e A é um operador diferencial com $D(A) \in H$ [39].

A obtenção de um esquema numérico para o problema (3.1) consiste em aproximá-lo no espaço e no tempo. De um lado, quando H é um espaço de dimensão infinita devemos substituir A por operadores A_h em um espaço de dimensão finita $V_h \subset H$, onde $h > 0$ representa o passo de discretização no espaço, tal que $\dim(V_h) \rightarrow \infty$ quando $h \rightarrow 0$.

Por outro lado, devemos discretizar o tempo, isto é, escolher uma seqüência de instantes t_n com $t_n = n\Delta t$, onde calcularemos a aproximação da solução. O problema (3.1) semi-discretizado (no espaço) fica então da forma:

encontrar $U_h \in C^0([0, T]; V_h)$ tal que:

$$\frac{dU_h(t)}{dt} + A_h U_h(t) = f_h(t) \quad (3.2)$$

com condição inicial $U_h(0) = u_{0,h}$.

Neste trabalho, opta-se pelo operador A_h do método de diferenças finitas, como já mencionado. Um esquema capaz de calcular $U_h \in V_h$ como aproximação de $U_h(t_n)$ de nível dois pode ser escrito como:

$$U_h^{n+1} = C_h(\Delta t)U_h^n + \Delta t f_h^n \quad (3.3)$$

com condição inicial $U_h^0 = U_{0,h}$, onde o operador $C_h(\Delta t)$ pertence ao espaço dos operadores lineares contínuos em V_h e f_h^n aproxima $f_h(t_n)$.

Definição 3.1 O problema (3.1) é dito bem posto se sua solução satisfaz:

$$\sup_t \|u(t)\|_H \leq C \left[\|u(0)\|_H^2 + \int_0^t \|f(s)\|_H^2 ds \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.4)$$

e se existe uma projeção R_h de H sobre V_h tal que

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|R_h u - u\|_H = 0, \quad \text{para todo } u \in H \quad (3.5)$$

Na aplicação de um esquema numérico também é muito importante a verificação de sua convergência quando h e Δt tendem a zero, isto é, se a seqüência $\{U_h^m\}$ de soluções de (3.3) tende à solução $u(t)$ de (3.1). As definições e resultados a respeito desse tema, encontrados na literatura [39] e [96], referem-se praticamente aos casos homogêneos, isto é, para $f(t) \equiv 0$ o que implica em $f_h^n \equiv 0$. As definições apresentadas a seguir consideram essa situação.

Definição 3.2 *O esquema (3.1) é dito convergente se a condição $U_{0,h} \rightarrow u_0$ quando $h \rightarrow 0$; implica em $U_h^n \rightarrow u(t)$ quando $\Delta t \rightarrow 0$ e $n \rightarrow \infty$ com $n\Delta t \rightarrow t$ para todo $t \in (0, T)$ onde U_h^n é definido em (3.3) e $u(t)$ é a solução de (3.1) para u_0 arbitrário.*

O estudo da convergência de um esquema numérico envolve também o estudo da estabilidade e da consistência, que são definidos no que segue.

Definição 3.3 *O esquema definido em (3.3) é dito estável se existe uma constante $K \geq 1$ independente de h e de Δt tal que :*

$$\|(C_h(\Delta t))^n R_h\|_{\mathcal{L}(H)} \leq K \quad (3.6)$$

para todo n e Δt satisfazendo $n\Delta t \leq T$.

Sendo R_h uma projeção do espaço de Hilbert H sobre V_h segue que:

$$(C_h(\Delta t))^n R_h = [C_h(\Delta t)R_h]^n$$

Quando um esquema satisfaz as condições de estabilidade independentemente de h e Δt dizemos que ele é incondicionalmente estável. Quando a condição de estabilidade é satisfeita apenas mediante algumas condições para h e Δt , o esquema é dito condicionalmente estável. Caso contrário, o esquema é considerado incondicionalmente instável.

Definição 3.4 *O esquema (3.3) é dito consistente com o problema se existe um subespaço $Y \subset H$, com Y denso em H tal que para toda $u(t)$, que é solução de (3.1), com $u_0 \in Y$ temos:*

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ \Delta t \rightarrow 0}} \sup_t \left\| \frac{1}{\Delta t} [u(t + \Delta t) - C_h(\Delta t)R_h u(t)] \right\|_H = 0 \quad (3.7)$$

A expressão (3.7) é conhecida como sendo o erro de truncamento. Quando o operador $C_h(\Delta t)$ é dado em termos de diferenças finitas, como será o nosso caso, podemos verificar o erro de truncamento a partir da expansão em séries de Taylor.

Observação 3.1 *Se a solução $u(t)$ de (3.1) é regular ela satisfaz:*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left\| \frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t} + Au(t) \right\|_H = 0 \quad (3.8)$$

Assim, a condição de consistência pode ser definida por:

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ \Delta t \rightarrow 0}} \left\| \frac{C_h(\Delta t)R_h u(t) - u(t)}{\Delta t} + Au(t) \right\|_H = 0 \quad (3.9)$$

Definição 3.5 *O esquema definido por (3.3) é de ordem q_1 em relação a h e de ordem q_2 em relação a Δt , se q_1 e q_2 são os maiores inteiros tais que podemos encontrar um subespaço $Y \subset H$ com Y denso em H com:*

$$\sup_t \left\| \frac{u(t + \Delta t) - C_h(\Delta t)R_h u(t)}{\Delta t} \right\|_H = O(h^{q_1} + \Delta t^{q_2}) \quad (3.10)$$

para toda $u(t)$ solução de (3.1) com $u_0 \in Y$.

Teorema 3.1 (Teorema de Equivalência de Lax) *Suponha que o problema (3.1) é bem posto e é aproximado pelo esquema (3.3) que assumimos ser consistente. Então o esquema é convergente se e somente se ele é estável.*

A demonstração do Teorema de Equivalência de Lax encontra-se nas referências Lions [39] e Zeidler [96]. Para analisar a estabilidade do esquema usado para a solução numérica do modelo matemático usamos o método de análise de Fourier. Para tanto usaremos a transformada discreta de Fourier, definida conforme segue [88]:

Definição 3.6 *A transformada discreta de Fourier de uma seqüência $\{u_k\} \in l^2$ é a função $\hat{u} \in L^2([-\pi, \pi])$ definida por:*

$$\hat{u}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-ik\xi} u_k \quad (3.11)$$

onde l^2 e $L^2([-\pi, \pi])$ são os espaços de Hilbert definidos por:

$$l^2 = \left\{ \{u_k\} : \left(\sum_k |u_k|^2 \right)^{\frac{1}{2}} < \infty \right\}$$

e

$$L^2([-\pi, \pi]) = \left\{ u : \left(\int_{-\pi}^{\pi} \|u\|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} < \infty \right\}$$

Lema 3.1 A sequência $\{u_k^n\}$ é estável em l^2 se e somente se a sequência $\{\hat{u}^n\}$ é estável em $L^2([-\pi, \pi])$.

A demonstração desse lema é encontrada em Thomas [88].

Os esquemas que serão usados na solução numérica do problema são baseados em discretizações em diferenças finitas. As aproximações usadas para essas discretizações são apresentadas na seção que segue.

3.1.2 Aproximações em diferenças finitas

Para fazer a discretização temporal usaremos diferenças *upwind*, isto é, a derivada parcial de Ψ em relação ao tempo é aproximada usando o valor de Ψ nos instantes t_n e t_{n+1} , conforme mostra a figura 3.1:

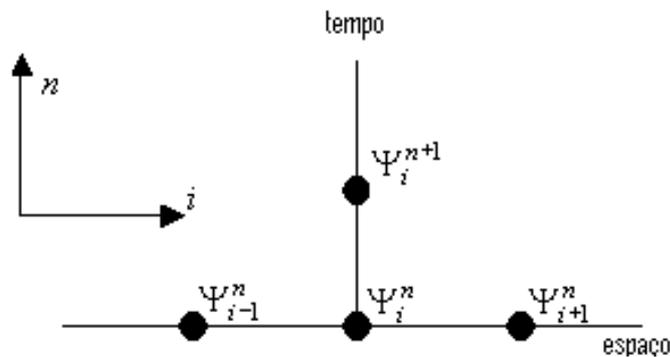


Figura 3.1: Esquema de aproximações em diferenças finitas para o tempo e o espaço no caso 1-D

Assim, a aproximação da derivada em relação ao tempo fica, de acordo com Anderson et al. [4] e Mitchell [54]:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} \approx \frac{\Psi_{i,j,k}^{n+1} - \Psi_{i,j,k}^n}{\Delta t}$$

Já para a discretização espacial usamos diferenças centradas, isto é, a derivada parcial de Ψ em relação x , por exemplo, é aproximada usando o valor de Ψ nas

posições x_{i-1} e x_{i+1} . Assim temos para as derivadas de primeira ordem:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Psi}{\partial x} &\approx \frac{\Psi_{i+1,j,k}^n - \Psi_{i-1,j,k}^n}{2\Delta x} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial y} &\approx \frac{\Psi_{i,j+1,k}^n - \Psi_{i,j-1,k}^n}{2\Delta y} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial z} &\approx \frac{\Psi_{i,j,k+1}^n - \Psi_{i,j,k-1}^n}{2\Delta z}\end{aligned}$$

e para as derivadas de segunda ordem:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &\approx \frac{\Psi_{i+1,j,k}^n - 2\Psi_{i,j,k}^n + \Psi_{i-1,j,k}^n}{(\Delta x)^2} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} &\approx \frac{\Psi_{i,j+1,k}^n - 2\Psi_{i,j,k}^n + \Psi_{i,j-1,k}^n}{(\Delta y)^2} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} &\approx \frac{\Psi_{i,j,k+1}^n - 2\Psi_{i,j,k}^n + \Psi_{i,j,k-1}^n}{(\Delta z)^2}\end{aligned}$$

Dessa forma, a equação (2.30) para o caso unidimensional, por exemplo, pode ser aproximada conforme:

$$\begin{aligned}Y_i^{*n+1} &= Y_i^{*n} - \frac{u^* \Delta t}{2\Delta x} (Y_{i+1}^{*n} - Y_{i-1}^{*n}) \\ &+ \frac{D^* \Delta t}{(\Delta x)^2 ReSc} (Y_{i+1}^{*n} - 2Y_i^{*n} + Y_{i-1}^{*n}) \\ &+ \frac{a^* \Delta t (1 - \phi)}{\phi \rho_g^* Y_0 ReSc} D_s^* (\rho_s^* X_0 X_i^{*n} - \rho_g^* Y_0 Y_i^{*n})\end{aligned}\quad (3.12)$$

Embora alguns autores afirmem que para problemas hiperbólicos não se deva usar diferenças centradas, neste trabalho estas foram usadas obtendo sucesso na convergência, conforme será mostrado na próxima seção.

3.1.3 Análise da consistência, estabilidade e convergência

Nesta seção apresenta-se um estudo do comportamento do esquema obtido ao substituir as diferenças finitas definidas na seção anterior. Com o objetivo de simplificar as notações considera-se o caso unidimensional no momento dessa análise. Note que, assim, as equações (2.30) e (2.32) podem ser escritas na forma:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = a \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + b \frac{\partial \Psi}{\partial x} + c \Psi + f(x, t) \quad (3.13)$$

com $\Psi = \Psi(x, t)$, onde temos que $a > 0$, $b < 0$ e $c < 0$.

Já as equações (2.31) e (2.33) tomam a forma:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = c_1 \Psi + f_1(x, t) \quad (3.14)$$

com $c_1 < 0$.

Substituindo as aproximações da secção anterior na equação (3.13) temos o esquema que segue:

$$\begin{aligned} \frac{\Psi_i^{n+1} - \Psi_i^n}{\Delta t} &= \frac{a}{(\Delta x)^2} [\Psi_{i+1}^n - 2\Psi_i^n + \Psi_{i-1}^n] \\ &+ \frac{b}{2\Delta x} [\Psi_{i+1}^n - \Psi_{i-1}^n] + c\Psi_i^n + f(x_i, t_n) \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde Ψ_i^n representa a aproximação de $\Psi(x_i, t_n)$ para $x_i = ix$ e $t_n = n\Delta t$. Expandindo Ψ_i^{n+1} em uma série de Taylor em torno do ponto (x_i, t_n) temos:

$$\Psi_i^{n+1} = \Psi_i^n + \Delta t \frac{\partial \Psi_i^n}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{\partial^2 \Psi_i^n}{\partial t^2} + \dots$$

Isso implica em:

$$\frac{\Psi_i^{n+1} - \Psi_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \left[\Delta t \frac{\partial \Psi_i^n}{\partial t} + O(\Delta t^2) \right] = \frac{\partial \Psi_i^n}{\partial t} + O(\Delta t) \quad (3.16)$$

A expansão de Ψ_{i+1}^n em torno do ponto (x_i, t_n) toma a forma:

$$\Psi_{i+1}^n = \Psi_i^n + \Delta x \frac{\partial \Psi_i^n}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 \Psi_i^n}{\partial x^2} + \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 \Psi_i^n}{\partial x^3} + \frac{\Delta x^4}{4!} \frac{\partial^4 \Psi_i^n}{\partial x^4} + \dots$$

enquanto que Ψ_{i-1}^n em torno do ponto (x_i, t_n) fica:

$$\Psi_{i-1}^n = \Psi_i^n - \Delta x \frac{\partial \Psi_i^n}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 \Psi_i^n}{\partial x^2} - \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 \Psi_i^n}{\partial x^3} + \frac{\Delta x^4}{4!} \frac{\partial^4 \Psi_i^n}{\partial x^4} - \dots$$

Das duas últimas expansões segue que:

$$\begin{aligned} \frac{\Psi_{i+1}^n - \Psi_{i-1}^n}{2\Delta x} &= \frac{1}{2\Delta x} \left[2\Delta x \frac{\partial \Psi_i^n}{\partial x} + \frac{2\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 \Psi_i^n}{\partial x^3} + O(\Delta x^5) \right] \\ &= \frac{\partial \Psi_i^n}{\partial x} + O(\Delta x^2) \end{aligned} \quad (3.17)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\Psi_{i+1}^n - 2\Psi_i^n + \Psi_{i-1}^n}{\Delta x^2} &= \frac{1}{\Delta x^2} \left[\Delta x^2 \frac{\partial^2 \Psi_i^n}{\partial x^2} + O(\Delta x^4) \right] \\ &= \frac{\partial^2 \Psi_i^n}{\partial x^2} + O(\Delta x^2) \end{aligned} \quad (3.18)$$

Substituindo as equações (3.16), (3.17) e (3.18) em (3.15), temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_i^n}{\partial t} + O(\Delta t) - a \left[\frac{\partial^2 \Psi_i^n}{\partial x^2} + O(\Delta x^2) \right] - b \left[\frac{\partial \Psi_i^n}{\partial x} + O(\Delta x^2) \right] \\ - c \Psi_i^n - f(x_i, t_n) = O(\Delta x^2, \Delta t) \end{aligned}$$

uma vez que Ψ_i^n é solução de (3.15), de onde segue pela definição (3.4) e pela observação (3.1) que o esquema é consistente. Pela definição (3.5) segue que o esquema é de primeira ordem no tempo e de segunda ordem no espaço.

Para fazer a análise de estabilidade do esquema numérico sugerido usaremos o método de Fourier. Esse método consiste na aplicação da transformada discreta de Fourier em ambos os lados da equação (3.15), que define o esquema, com o objetivo de encontrar o Símbolo de Fourier $S(\xi)$ do problema e, em seguida, requerer a condição $|S(\xi)| \leq 1$. Consideramos aqui o caso homogêneo ($f(x, t) \equiv 0$); assim o esquema (3.15) pode ser escrito da forma:

$$\begin{aligned} \Psi_i^{n+1} = \left[\frac{t}{(\Delta x)^2} + \frac{b\Delta t}{2\Delta x} \right] \Psi_{i+1}^n + \left[1 + c\Delta t - 2\frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2} \right] \Psi_i^n \\ + \left[\frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2} - \frac{b\Delta t}{2\Delta x} \right] \Psi_{i-1}^n \end{aligned} \quad (3.19)$$

Para evitar possíveis confusões entre a unidade imaginária, quando da aplicação da transformada discreta de Fourier, com o índice de discretização da variável x , trocamos momentaneamente esse índice pela letra l . Aplicando a transformada discreta de Fourier (3.11) em ambos os lados da equação (3.19), segue que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-ik\xi} \Psi_l^{n+1} = \left[\frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{b\Delta t}{2\Delta x} \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-ik\xi} \Psi_{l+1}^n \\ + \left[1 + c\Delta t - 2\frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2} \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-ik\xi} \Psi_l^n \\ + \left[\frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2} - \frac{b\Delta t}{2\Delta x} \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-ik\xi} \Psi_{l-1}^n \end{aligned}$$

Fazendo um ajuste dos índices nos somatórios e rearranjando os termos podemos escrever:

$$\hat{\Psi}^{n+1} = \left[\left(\frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{b\Delta t}{2\Delta x} \right) e^{i\xi} + \left(1 + c\Delta t - 2\frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2} \right) \right] \hat{\Psi}^n$$

$$+ \left[\left(\frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2} - \frac{b\Delta t}{2\Delta x} \right) e^{-i\xi} \right] \hat{\Psi}^n \quad (3.20)$$

Assim, o símbolo de Fourier é dado pela equação:

$$\begin{aligned} S(\xi) &= \left(\frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{b\Delta t}{2\Delta x} \right) e^{i\xi} + \left(1 + c\Delta t - 2\frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2} \right) \\ &+ \left(\frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2} - \frac{b\Delta t}{2\Delta x} \right) e^{-i\xi} \\ &= (1 + c\Delta t) - \frac{2a\Delta t}{(\Delta x)^2} [1 - \cos(\xi)] + i \frac{b\Delta t}{\Delta x} \operatorname{sen}(\xi) \end{aligned} \quad (3.21)$$

Usando a condição de estabilidade do esquema numérico, $|S(\xi)| \leq 1$, para todo $\xi \in [-\pi, \pi]$ e o lema 3.1 segue que o esquema usado é estável se e somente se Δt e Δx satisfazem a condição (3.22) para todo $\xi \in [-\pi, \pi]$, ou seja:

$$\begin{aligned} &2c\Delta t + (c\Delta t)^2 - 4(1 + c\Delta t) \frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2} [1 - \cos(\xi)] \\ &+ 4 \left(\frac{a\Delta t}{(\Delta x)^2} \right)^2 [1 - \cos(\xi)]^2 + \left(b \frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 \operatorname{sen}^2(\xi) \leq 0 \end{aligned} \quad (3.22)$$

Para ilustrar a região de estabilidade, denotamos inicialmente $\xi = x$, $\Delta t = y$ e assumimos a , b , c e Δx fixos. Assim, seja a função:

$$\begin{aligned} F(x, y) &= 2cy + (cy)^2 - 4(1 + cy) \frac{ay}{(\Delta x)^2} [1 - \cos(x)] \\ &+ 4 \left(\frac{ay}{(\Delta x)^2} \right)^2 [1 - \cos(x)]^2 + \left(b \frac{y}{\Delta x} \right)^2 \operatorname{sen}^2(x) \end{aligned}$$

A região de estabilidade corresponde aos valores de y para os quais temos

$$F(x, y) \leq 0, \quad \forall x \in [-\pi, \pi]$$

Para o caso particular em que $a = 1/4$, $b = -1$, $c = -1/2$ e $\Delta x = 1/20$ temos garantia de estabilidade para $\Delta t \leq 0,005$, como mostra a figura 3.2. Já para o caso em que $a = 1/10000$, $b = -1$, $c = -1$ e $\Delta x = 1/40$, o valor do passo de integração temporal a fim de termos garantia de estabilidade diminui para $\Delta t \leq 0,0015$. Isto é ilustrado na figura 3.3.

Mais uma simulação é mostrada na figura 3.4 que indica a região de estabilidade para $a = 1/10000$, $b = -1$, $c = -1$ e $\Delta x = 1/100$. Neste caso, o esquema passa a ser estável para $\Delta t \leq 0,0005$.

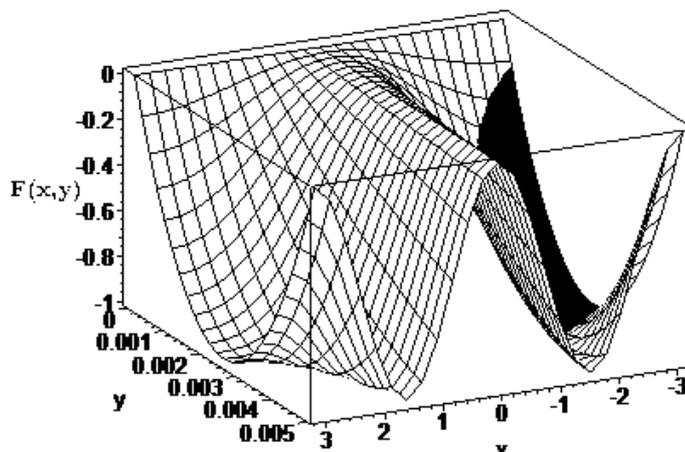


Figura 3.2: Região de estabilidade para $a = 1/4$, $b = -1$, $c = -1/2$ e $\Delta x = 1/20$

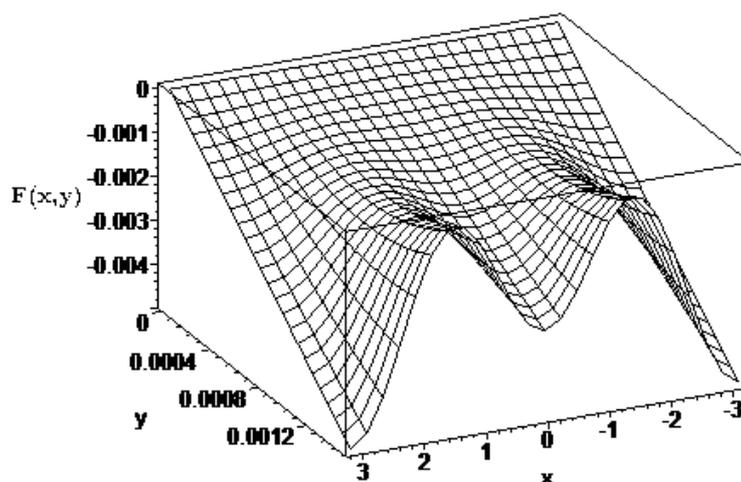


Figura 3.3: Região de estabilidade para $a = 1/10000$, $b = -1$, $c = -1$ e $\Delta x = 1/40$

Note que essas simulações foram realizadas com a intenção de ilustrar a variação da região de estabilidade como consequência dos parâmetros envolvidos. Assim, antes de realizar as simulações numéricas do problema proposto neste trabalho, foram avaliadas as possíveis variações dos parâmetros a , b , c e fixado o valor de Δx , permitindo, dessa forma, a escolha adequada do passo de integração temporal. Evitamos, assim, desperdício de tempo computacional (no caso de Δt muito pequeno), mantendo a garantia da estabilidade do esquema.

Sendo o problema (3.13) bem posto e o esquema estável, segue do Teorema de

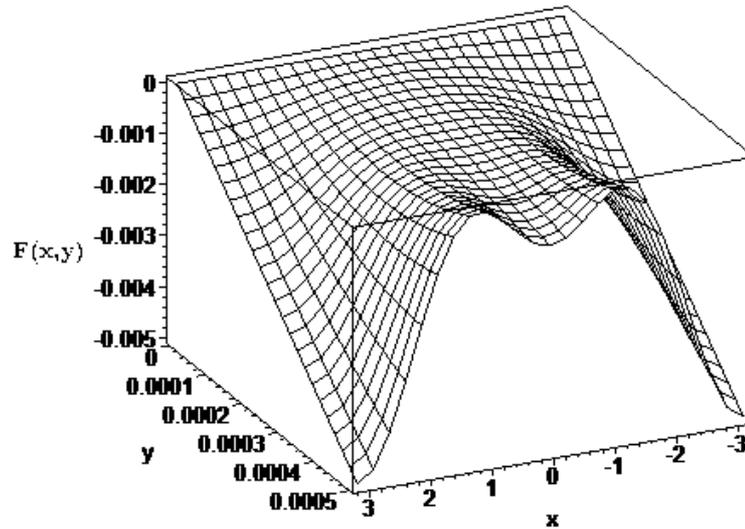


Figura 3.4: Região de estabilidade para $a = 1/10000$, $b = -1$, $c = -1$ e $\Delta x = 1/100$

Equivalência de Lax que o esquema é convergente quando Δt e Δx satisfazem (3.22) para todo $\xi \in [-\pi, \pi]$.

Uma solução analítica para as equações de transporte de massa e de calor no ar é apresentada na próxima seção.

3.2 Solução analítica

Com o objetivo de obter maior confiabilidade no esquema numérico, quando se trabalha com sistemas de equações complexos como os problemas de transferência de calor e de massa, é comum procurar uma solução analítica de uma situação que se aproxima o suficiente do problema físico em questão. Isso torna possível uma comparação entre os dados calculados pelo esquema numérico usado e uma solução analítica de um problema fisicamente tão próximo quanto possível ao que se pretende resolver. Se para uma situação fisicamente próxima à original o esquema numérico funcionar bem, é provável que ele funcione também para a situação real. Neste intuito, buscamos uma solução analítica para a equação diferencial parcial

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = a \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + b \frac{\partial \Psi}{\partial x} + c \Psi + f(x, t), \quad x \in (0, 1) \quad e \quad t > 0 \quad (3.23)$$

com $a > 0$, sujeita à condição inicial

$$\Psi(x, 0) = \Psi_0 \quad \text{para } x \in [0, 1] \quad (3.24)$$

e as condições de contorno

$$\Psi(0, t) = \Psi_1 \quad e \quad \frac{\partial \Psi}{\partial x}(1, t) = 0 \quad \text{para } t \geq 0 \quad (3.25)$$

Buscamos soluções analíticas para problemas de transferências de calor e/ou de massa na literatura. Várias soluções para problemas de calor foram encontradas, porém nenhuma com as condições do problema aqui exposto. Na seção que segue, apresentamos algumas dessas soluções que mais se assemelham ao nosso problema ou que trazem alguma idéia que possa ser aproveitada neste trabalho.

3.2.1 Algumas soluções analíticas para problemas de transporte na literatura

Soluções analíticas para muitas formas de equações diferenciais são encontradas na literatura, algumas das quais para equações de transferência de energia, que serão enumeradas na seqüência. Em todas as soluções encontradas para essa equação temos algumas simplificações na equação propriamente dita e/ou nos domínios para os quais as soluções são obtidas, de forma que estas não representam fielmente o problema real. Apesar disso, algumas idéias e conceitos utilizados foram úteis para a obtenção de uma solução analítica para o nosso problema.

As equações apresentadas, na seqüência, referem-se ao problema de transferência de calor, porém no modelo apresentado nesta tese, as equações diferenciais parciais que descrevem os fenômenos de transferência de calor e de massa possuem a mesma forma (veja as equações (3.13) e (3.23)). Assim, encontrando uma solução analítica para a equação do calor também a teremos para a equação de transferência de massa.

Cherniha [16] apresenta algumas soluções analíticas para a equação

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(A(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + B(u) \frac{\partial u}{\partial x} + C(u) \quad (3.26)$$

em casos particulares onde $A(u)$, $B(u)$ e $C(u)$ são funções especialmente escolhidas de forma a permitir a obtenção das soluções, usando o método de redução de ordem

e transformando a equação diferencial parcial (3.26) em um sistema de equações diferenciais ordinárias.

Bogaerts et al. [8] desenvolvem um modelo para descrever o balanço de energia do fluido de resfriamento de um reator e resolvem analiticamente a equação

$$\alpha \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} + \beta \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} + T(x, t) = T_m(t) \quad (3.27)$$

onde $T_m(t)$ é a temperatura média da mistura reagente no instante t , $\alpha = \frac{\rho C_p q}{\pi D U}$ e $\beta = \frac{D \rho C_p}{4U}$. A solução analítica é obtida usando duplamente a transformada de Laplace, isto é, na variável x e na variável t .

Yefimova e Kudryashov [94] buscaram uma solução para a equação de Burgers-Huxley que descreve fenômenos vibratórios não lineares:

$$u_t + \alpha u u_x = D u_{xx} + \beta u + \gamma u^2 - \delta u^3, \quad D > 0 \quad (3.28)$$

onde α representa a transferência não linear, e os parâmetros β , γ e δ descrevem os termos fontes. A solução analítica para as condições de contorno apropriadas foi obtida usando a transformada de Cole-Hopf. Note que para $\beta = \gamma = \delta = 0$, a equação (3.28) reduz-se à equação de advecção-difusão na forma:

$$u_t + \alpha u u_x = D u_{xx}$$

Uma transformação de coordenadas seguida da aplicação da transformada de Fourier e técnicas de expansão em séries é sugerida por Ma e Chang [45] para a solução da equação homogênea da condução de calor em materiais não isotrópicos.

Reda [73] afirma que os métodos de redução simétrica de uma equação para equações com menos variáveis, em particular para equações diferenciais ordinárias, está entre os mais eficientes métodos de obtenção de soluções de equações para problemas da física-matemática. Usando esse método, este autor apresenta a solução de vários casos particulares da equação:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = r^{1-s} \frac{\partial}{\partial r} \left[k(r) r^{s-1} \frac{\partial T}{\partial r} \right]; \quad 0 \leq r \leq R(t) \quad e \quad 0 \leq t \leq T_0$$

Milosevic e Raynaud [53] apresentam uma solução analítica para o problema bi-dimensional transiente de difusão de calor em uma placa cilíndrica em duas camadas com condições de contorno de Neumann homogêneas nas faces externas e com pulsos

não periódicos de calor. Na solução desse problema os autores usam o método de separação de variáveis.

Polyanin apresentou, em seus trabalhos [69] [70], soluções analíticas para vários problemas envolvendo transferência de calor, sugerindo algumas substituições. Em [69] Polyanin apresenta uma solução analítica para a equação da difusão de calor não homogênea:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = a \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \Phi(x, t) \quad (3.29)$$

com condição inicial

$$\omega(x, 0) = f(x)$$

e para os domínios e condições de contorno conforme mostra a tabela 3.1:

Tabela 3.1: Domínios e condições de contorno em que foram obtidas soluções para a equação (3.29) em [69]

Domínio	Condição de contorno
$-\infty < x < \infty$	ω é uma função limitada
$0 < x < \infty$	ω é uma função limitada e $\omega(0, t) = 0$
$0 < x < \infty$	ω é uma função limitada e $\frac{\partial \omega}{\partial x}(0, t) = 0$
$0 < x < \infty$	ω é uma função limitada e $\frac{\partial \omega}{\partial x}(0, t) - k\omega(0, t) = 0$
$0 < x < l$	$\omega(0, t) = 0$ e $\omega(l, t) = 0$
$0 < x < l$	$\frac{\partial \omega}{\partial x}(0, t) = 0$ e $\frac{\partial \omega}{\partial x}(l, t) = 0$

Gorguis [28] apresenta uma solução analítica para a equação

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3.30)$$

usando o método da transformada de Cole-Hopf, reduzindo-a à equação do calor, da qual obtém a solução exata.

Asaithambi [5] resolve analiticamente o problema estacionário de distribuição da temperatura no interior de um cilindro usando o método denominado pelo autor por método de diferenciação automática, que consiste na obtenção das derivadas a partir de uma expansão em séries de Taylor em torno de $r = 0$.

Cai et al. [13] apresentam soluções analíticas para a equação de condução de calor hiperbólica não linear em um domínio cartesiano tridimensional

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.31)$$

para algumas expressões específicas dos coeficientes ρC_p e K como funções de T , usando o método de separação de variáveis, e escrevendo T como uma soma de quatro soluções da forma

$$T(t, x, y, z) = \theta(t) + X(x) + Y(y) + Z(z)$$

para condições iniciais e de contorno indefinidas, isto é, as soluções foram obtidas para um caso geral.

Pamuk [60] apresenta uma solução analítica para a equação de calor com termo fonte da forma

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \epsilon u^m \quad (3.32)$$

para $m = 1, 2, 3, \dots$ e ϵ constante. A solução é obtida usando o método ADM (Adomians Decomposition Method).

Livros clássicos que abordam a teoria de equações diferenciais como Carslaw e Jaeger [14], Coddington [20], Crank [21], Debnath [23], Evans [25] e Keener [32], discutem o problema de difusão térmica, apresentando métodos de solução como o uso de transformadas de Fourier, transformadas de Laplace, separação de variáveis, expansão em séries de autofunções, além de outros.

Antes de apresentarmos a solução analítica do nosso problema, apresentaremos algumas definições e teoremas que serão utilizados no desenvolvimento dessa solução.

3.2.2 Definições e teoremas úteis na resolução

Apesar de termos encontrado inúmeros problemas resolvidos na literatura, a solução para a equação (3.23) com as condições (3.24) e (3.25) não foi encontrada pronta. Contudo, algumas idéias e métodos sugeridos contribuíram para que tivéssemos êxito na busca dessa solução. No decorrer da solução faremos uso de algumas definições e teoremas que são encontrados em livros de análise funcional, tais como dos autores Kreyszig [35], Reed e Simon [74] e Yosida [95].

Definição 3.7 *Seja H um espaço de Hilbert e $L : H \rightarrow H$ um operador linear. O operador adjunto de L é definido como o operador $L^* : H \rightarrow H$ tal que*

$$\langle Lu, v \rangle = \langle u, L^*v \rangle$$

para todo $u \in D(L)$ e todo $v \in D(L^)$ onde $D(L)$ e $D(L^*) \subseteq H$ representam o domínio dos operadores L e L^* , respectivamente.*

Observação 3.2 *Para o caso em que $H = L^2([0, 1])$ podemos definir o produto interno como:*

$$\langle u, v \rangle = \int_0^1 u(x)v(x)dx$$

e a norma em H pode ser definida por:

$$\|u\|_H^2 = \langle u, u \rangle = \int_0^1 [u(x)]^2 dx$$

Definição 3.8 *O operador L definido anteriormente é dito formalmente auto adjunto, se L e L^* têm as mesmas definições operacionais. Se além disso, $D(L) = D(L^*)$, o operador L é dito auto adjunto.*

Definição 3.9 *Seja L o operador definido anteriormente. Define-se por espectro pontual (ou conjunto dos autovalores) ao conjunto $\sigma_p(L)$ dado pelos valores λ tais que $[\lambda I - L]^{-1}$ não existe. O espectro contínuo é o conjunto $\sigma_c(L)$ dado pelos valores λ tais que $[\lambda I - L]^{-1}$ existe e $[\lambda I - L]^{-1}$ é definido em um conjunto denso em H , mas não é um operador limitado. O espectro residual é definido como o conjunto $\sigma_r(L)$ dado pelos valores λ tais que $[\lambda I - L]^{-1}$ existe com domínio não denso em H .*

O espectro de L é definido por

$$\sigma(L) = \sigma_p(L) \cup \sigma_c(L) \cup \sigma_r(L)$$

Teorema 3.2 *Seja L um operador linear contínuo e auto adjunto em um espaço de Hilbert H , então:*

i—) $\sigma_p(L) \subset \mathbb{R}$

ii—) autovetores correspondentes a dois autovalores distintos são ortogonais.

Demonstração:

Se $\lambda \in \sigma_p(L)$ então λ é autovalor de L . Assim, existe $x \in H$ com $x \neq 0$ tal que $Lx = \lambda x$. Dessa forma, usando as propriedades do produto interno, temos:

$$\lambda \langle x, x \rangle = \langle x, \lambda x \rangle = \langle x, Lx \rangle = \langle Lx, x \rangle = \langle \lambda x, x \rangle = \bar{\lambda} \langle x, x \rangle$$

o que implica em $\lambda = \bar{\lambda}$ e assim λ é real o que prova *i*–).

Por outro lado, sejam λ_1 e λ_2 dois autovalores distintos de L e x_1, x_2 seus respectivos autovetores. Então:

$$Lx_1 = \lambda_1 x_1$$

e

$$Lx_2 = \lambda_2 x_2$$

o que nos permite escrever:

$$\langle \lambda_1 x_1, x_2 \rangle = \langle Lx_1, x_2 \rangle = \langle x_1, Lx_2 \rangle = \langle x_1, \lambda_2 x_2 \rangle$$

\Rightarrow

$$\bar{\lambda}_1 \langle x_1, x_2 \rangle = \lambda_2 \langle x_1, x_2 \rangle$$

e como λ_1 e λ_2 são reais e distintos temos que:

$$\langle x_1, x_2 \rangle = 0$$

o que prova *ii*–).

3.2.3 Obtenção da solução analítica

Estamos interessados em encontrar uma solução em $L^2([0, 1])$ para o problema (3.23) sujeita à condição inicial (3.24) e condições de contorno (3.25). Com o intuito de diminuir a complexidade do problema faremos a substituição:

$$\Psi(x, t) = e^{[\beta t + \mu x]} \omega(x, t) \tag{3.33}$$

De (3.33) obtemos as derivadas que seguem:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \beta e^{[\beta t + \mu x]} \omega(x, t) + e^{[\beta t + \mu x]} \frac{\partial \omega}{\partial t}(x, t)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \mu e^{[\beta t + \mu x]} \omega(x, t) + e^{[\beta t + \mu x]} \frac{\partial \omega}{\partial x}(x, t)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= \mu^2 e^{[\beta t + \mu x]} \omega(x, t) + 2\mu e^{[\beta t + \mu x]} \frac{\partial \omega}{\partial x}(x, t) \\ &\quad + e^{[\beta t + \mu x]} \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2}(x, t) \end{aligned}$$

Substituindo (3.33) e suas respectivas derivadas na equação (3.23) temos um problema um pouco menos complexo para resolver, conforme segue:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = a \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + h(x, t), \quad x \in (0, 1) \quad e \quad t > 0 \quad (3.34)$$

com $a > 0$, sujeita à condição inicial

$$\omega(x, 0) = \Psi_0 e^{-\mu x} \quad \text{para} \quad x \in [0, 1] \quad (3.35)$$

e as condições de contorno

$$\omega(0, t) = \Psi_1 e^{-\beta t} \quad e \quad \frac{\partial \omega}{\partial x}(1, t) + \mu \omega(1, t) = 0 \quad \text{para} \quad t \geq 0 \quad (3.36)$$

onde:

$$\begin{aligned} \beta &= c - \frac{b^2}{4a} \\ \mu &= -\frac{b}{2a} \end{aligned}$$

e

$$h(x, t) = e^{[-\beta t - \mu x]} f(x, t) \quad (3.37)$$

Com a finalidade de obter condições de contorno homogêneas no problema principal faremos nova substituição escrevendo $\omega(x, t)$ da forma:

$$\omega(x, t) = u(x, t) + v(x, t) \quad (3.38)$$

onde

$$v(x, t) = \Psi_1 e^{[-\beta t - \mu x]} \quad (3.39)$$

Temos assim que

$$v(x, 0) = \Psi_1 e^{-\mu x}$$

$$v(0, t) = \Psi_1 e^{-\beta t}$$

e

$$\frac{\partial v}{\partial x}(x, t) + \mu v(x, t) = 0$$

Note ainda que:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\beta \Psi_1 e^{[-\beta t - \mu x]}$$

e

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \mu^2 \Psi_1 e^{[-\beta t - \mu x]}$$

Isso nos permite escrever:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial t} - \beta \Psi_1 e^{[-\beta t - \mu x]} \quad (3.40)$$

e

$$\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mu^2 \Psi_1 e^{[-\beta t - \mu x]} \quad (3.41)$$

Substituindo (3.40) e (3.41) na equação (3.34) resulta no problema que segue:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + g(x, t), \quad x \in (0, 1) \quad e \quad t > 0 \quad (3.42)$$

sujeito à condição inicial

$$u(x, 0) = \varphi(x); \quad \text{para } x \in [0, 1] \quad (3.43)$$

com $\varphi(x) = (\Psi_0 - \Psi_1)e^{-\mu x}$ e as condições de contorno

$$u(0, t) = 0 \quad e \quad \frac{\partial u}{\partial x}(1, t) + \mu u(1, t) = 0 \quad \text{para } t \geq 0 \quad (3.44)$$

onde:

$$g(x, t) = (a\mu^2 + \beta) \Psi_1 e^{[-\beta t - \mu x]} + h(x, t) \quad (3.45)$$

Note que $L^2([0, 1])$ é um espaço de Hilbert e, portanto, um espaço completo. Assim podemos encontrar uma base de autofunções que geram $L^2([0, 1])$, e segue do teorema de Riesz [74] que qualquer elemento de $L^2([0, 1])$ pode ser expresso como uma série das autofunções que formam essa base. Dessa forma, para resolver o problema (3.42) com condição inicial (3.43) e condições de contorno (3.44) vamos expressar sua solução como uma série de autofunções ortonormais, conforme segue:

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n(t) \Phi_n(x) \quad (3.46)$$

Precisamos, então, encontrar a seqüência $\{\Phi_n(x)\}$ de autofunções normalizadas e, em seguida, seus respectivos coeficientes de Fourier $b_n(t)$. Para obter as autofunções consideramos o problema homogêneo associado que será resolvido pelo método de separação de variáveis. Escrevendo a solução do problema homogêneo na forma:

$$u_h(x, t) = \theta(t)\vartheta(x)$$

teremos um problema de duas equações diferenciais ordinárias. Temos, então, para a variável x a equação diferencial ordinária:

$$a\vartheta''(x) = -\lambda\vartheta(x) \quad (3.47)$$

com condições de contorno:

$$\vartheta(0) = 0 \quad e \quad \vartheta'(1) + \mu\vartheta(1) = 0 \quad (3.48)$$

Observação 3.3 *Note que os autovalores λ do problema aqui exposto são todos reais.*

De fato, consideramos o operador linear L definido por

$$L(u) = -a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

com domínio:

$$D(L) = \left\{ u(x) \in L^2([0, 1]) : u(0) = 0 \quad e \quad \frac{\partial u}{\partial x}(1) + \mu u(1) = 0 \right\}$$

Desejamos encontrar o operador L^* adjunto de L . Assim para todo $u \in D(L)$ e $v \in D(L^*)$ temos:

$$\begin{aligned} \langle Lu, v \rangle &= -a \int_0^1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x) v(x) dx \\ &= -a \left[v(x) \frac{\partial u}{\partial x}(x) \right]_0^1 + a \int_0^1 \frac{\partial u}{\partial x}(x) \frac{\partial v}{\partial x}(x) dx \\ &= -a \left[v(x) \frac{\partial u}{\partial x}(x) - u(x) \frac{\partial v}{\partial x}(x) \right]_0^1 - a \int_0^1 u(x) \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(x) dx \\ &= -a \left[v(1) \frac{\partial u}{\partial x}(1) - u(1) \frac{\partial v}{\partial x}(1) - v(0) \frac{\partial u}{\partial x}(0) + u(0) \frac{\partial v}{\partial x}(0) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -a \int_0^1 u(x) \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(x) dx \\
& = a \left[u(1) \left(\frac{\partial v}{\partial x}(1) + \mu v(1) \right) + v(0) \frac{\partial u}{\partial x}(0) \right] - a \int_0^1 u(x) \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(x) dx
\end{aligned}$$

onde foram substituídas as condições de $D(L)$.

Para termos $\langle Lu, v \rangle = \langle u, L^*v \rangle$ devemos requerer que:

$$L^*(v) = -a \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}$$

com domínio:

$$D(L^*) = \left\{ v(x) \in L^2([0, 1]) : v(0) = 0 \text{ e } \frac{\partial v}{\partial x}(1) + \mu v(1) = 0 \right\}$$

o que prova que L é um operador auto adjunto pela definição (3.8). Assim, segue pela definição (3.9) e pelo teorema (3.2) que λ pode assumir apenas valores reais e que valores distintos de λ correspondem a autofunções ortogonais.

Além disso, da resolução acima, segue que:

$$\begin{aligned}
\langle Lu, u \rangle & = -a \left[u(x) \frac{\partial u}{\partial x}(x) \right]_0^1 + a \int_0^1 \frac{\partial u}{\partial x}(x) \frac{\partial u}{\partial x}(x) dx \\
& = -a \left[u(1) \frac{\partial u}{\partial x}(1) - u(0) \frac{\partial u}{\partial x}(0) \right]_0^1 + a \int_0^1 \left[\frac{\partial u}{\partial x}(x) \right]^2 dx \\
& = a\mu [u(1)]^2 + a \int_0^1 \left[\frac{\partial u}{\partial x}(x) \right]^2 dx
\end{aligned}$$

Sendo $\mu = -\frac{b}{a}$, com $a > 0$ e $b < 0$ (veja equação (3.13)) segue que para todo $u \in D(L)$ temos:

$$\langle Lu, u \rangle \geq 0$$

isto é, L é um operador positivo e assim, todos os seus autovalores são positivos.

Consideremos então que $\lambda > 0$. A solução da equação (3.47) fica:

$$\vartheta(x) = A \operatorname{sen} \left(\sqrt{\frac{\lambda}{a}} x \right) + B \operatorname{cos} \left(\sqrt{\frac{\lambda}{a}} x \right)$$

Da condição $\vartheta(0) = 0$ segue que $B = 0$, o que implica em:

$$\vartheta(x) = A \operatorname{sen} \left(\sqrt{\frac{\lambda}{a}} x \right) \tag{3.49}$$

e

$$\vartheta'(x) = \sqrt{\frac{\lambda}{a}} A \cos \left(\sqrt{\frac{\lambda}{a}} x \right)$$

Neste caso, a condição $\vartheta'(1) + \mu\vartheta(1) = 0$ implica em:

$$A \left[\sqrt{\frac{\lambda}{a}} \cos \left(\sqrt{\frac{\lambda}{a}} \right) + \mu \operatorname{sen} \left(\sqrt{\frac{\lambda}{a}} \right) \right] = 0$$

e como queremos uma solução não trivial, devemos requerer $A \neq 0$. Assim temos:

$$\sqrt{\frac{\lambda}{a}} \cos \left(\sqrt{\frac{\lambda}{a}} \right) + \mu \operatorname{sen} \left(\sqrt{\frac{\lambda}{a}} \right) = 0 \quad (3.50)$$

Note que se $\cos \left(\sqrt{\frac{\lambda}{a}} \right) = 0$, então $\operatorname{sen} \left(\sqrt{\frac{\lambda}{a}} \right) \neq 0$, não satisfazendo a condição requerida. Dessa forma, podemos considerar $\cos \left(\sqrt{\frac{\lambda}{a}} \right) \neq 0$, o que nos permite dividir a equação (3.50) por $\cos \left(\sqrt{\frac{\lambda}{a}} \right)$ e os autovalores satisfazem a equação:

$$\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} - \frac{b}{2a} \tan \left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} \right) = 0; \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.51)$$

Podemos visualizar os autovalores como sendo os pontos de interseção entre as curvas $h_1 \left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} \right) = \left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} \right)$ e $h_2 \left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} \right) = \frac{b}{2a} \tan \left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} \right)$ para $\lambda_n > 0$. A figura 3.5 mostra esses pontos para o caso particular em que $a = 1/4$, $b = -1$ e $c = -1/2$.

Os autovalores foram obtidos calculando numericamente as raízes da função $h(\sqrt{\lambda}) = \sqrt{\lambda} + \frac{1}{2\sqrt{a}} \tan \sqrt{\frac{\lambda}{a}}$ com precisão $|h(\sqrt{\lambda})| < 10^{-6}$. Para $n = 1$ até $n = 10$ os autovalores são mostrados na tabela 3.2. Na figura 3.5 observa-se que à medida que o valor de n aumenta, a intersecção entre as curvas $h_1 \left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} \right)$ e $h_2 \left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} \right)$ vai se aproximando de $(2n - 1)\frac{\pi}{2}$.

Segue de (3.49) que a autofunção correspondente ao autovalor λ_n é:

$$\Phi_n(x) = A_n \operatorname{sen} \left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} x \right); \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.52)$$

onde A_n é obtido ao normalizar a autofunção (3.52), isto é:

$$\begin{aligned} 1 &= \|\Phi(x)\|_{L^2([0,1])}^2 = \langle \Phi(x), \Phi(x) \rangle \\ &= \int_0^1 \Phi_n^2(x) dx = A_n^2 \int_0^1 \operatorname{sen}^2 \left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} x \right) dx \end{aligned}$$

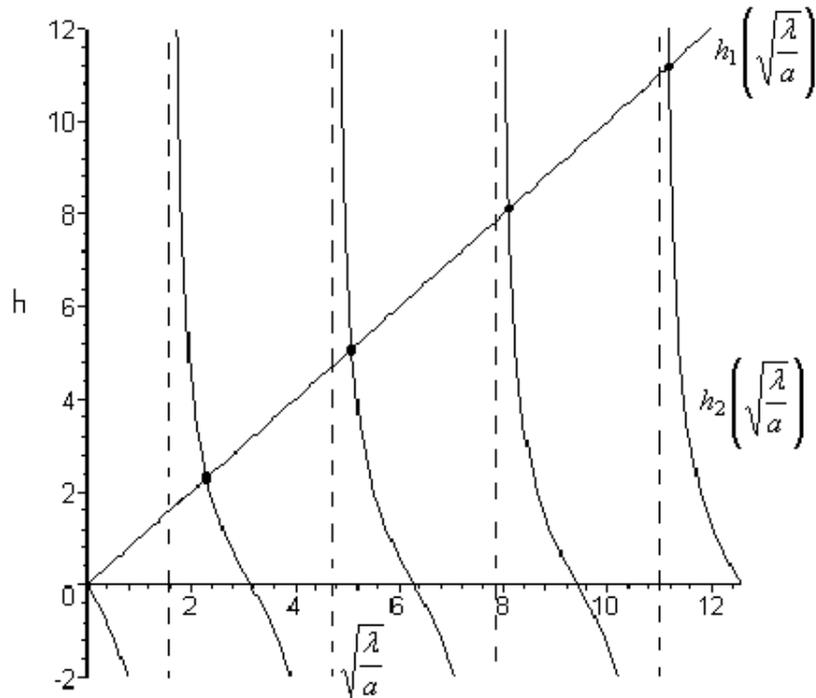


Figura 3.5: Representação gráfica dos autovalores para $a = 1/4$, $b = -1$ e $c = -1/2$

$$= \frac{A_n^2}{2} \sqrt{\frac{a}{\lambda_n}} \left[\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} - \frac{1}{2} \text{sen} \left(2\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} \right) \right]$$

o que implica em:

$$A_n = \left[\frac{2\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}}}{\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} - \frac{1}{2} \text{sen} \left(2\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} \right)} \right]^{\frac{1}{2}}; \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.53)$$

Desde que a série em (3.46) converge, podemos obter as derivadas de $u(x, t)$ conforme segue:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} b'_n(t) \Phi_n(x) \quad (3.54)$$

e

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \sum_{n=1}^{\infty} b_n(t) \Phi_n''(x) = - \sum_{n=1}^{\infty} b_n(t) \frac{\lambda_n}{a} \Phi_n(x) \quad (3.55)$$

Expandindo também a função $g(x, t)$ como uma série das autofunções $\Phi_n(x)$ podemos escrever:

$$g(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n(t) \Phi_n(x); \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.56)$$

com

$$\gamma_n(t) = \int_0^1 g(x, t) \Phi_n(x) dx; \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.57)$$

Tabela 3.2: Autovalores do problema (3.47) para os dez primeiros valores de n , com $a = 1/4$, $b = -1$ e $c = -1/2$

n	λ_n
1	1.309799825064882
2	6.469354336897196
3	16.386966272527410
4	31.207339105057270
5	50.953563162230570
6	75.631233902971770
7	105.242186589986100
8	139.787157545389400
9	179.266486856546800
10	223.680348715834700

Para calcular $b_n(t)$ substituímos (3.54), (3.55) e (3.56) em (3.42), obtendo:

$$\sum_{n=1}^{\infty} b'_n(t) \Phi_n(x) = -a \sum_{n=1}^{\infty} b_n(t) \frac{\lambda_n}{a} \Phi_n(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n(t) \Phi_n(x)$$

ou

$$\sum_{n=1}^{\infty} [b'_n(t) + \lambda_n b_n(t) - \gamma_n(t)] \Phi_n(x) = 0; \quad \forall x \in (0, 1)$$

o que implica em:

$$b'_n(t) + \lambda_n b_n(t) = \gamma_n(t); \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.58)$$

onde $\gamma_n(t)$ é dada por (3.57). Para resolver (3.58) necessitamos de uma condição inicial

$$b_n(0) = \alpha_n; \quad n = 1, 2, \dots$$

Tomando $t = 0$ temos de (3.43) e (3.46) que:

$$u(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n(0) \Phi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \Phi_n(x) = \varphi(x); \quad \forall x \in (0, 1)$$

Assim, os valores iniciais α_n são os coeficientes da expansão em autofunções de $\varphi(x)$, ou seja:

$$\alpha_n = \int_0^1 \varphi(x) \Psi_n(x) dx; \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.59)$$

Resolvendo a equação diferencial ordinária (3.58) para $b_n(0) = \alpha_n$ temos que:

$$b_n(t) = \alpha_n e^{-\lambda_n t} + \int_0^t e^{[-\lambda_n(t-\tau)]} \gamma_n(\tau) d\tau; \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.60)$$

Segue então que

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n b_n(t) \text{sen} \left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} x \right)$$

e

$$\omega(x, t) = \Psi_1 e^{[-\beta t - \mu x]} + \sum_{n=1}^{\infty} A_n b_n(t) \text{sen} \left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} x \right)$$

Finalmente, substituindo $\omega(x, t)$ em (3.33), a solução do problema (3.23) com condição inicial (3.24) e condições de contorno (3.25) é:

$$\Psi(x, t) = \Psi_1 + e^{[\beta t + \mu x]} \sum_{n=1}^{\infty} A_n b_n(t) \text{sen} \left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} x \right) \quad (3.61)$$

com A_n dado por (3.53) e $b_n(t)$ por (3.60) para

$$\alpha_n(t) = A_n \int_0^1 (\Psi_0 - \Psi_1) e^{-\mu x} \text{sen} \left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} x \right) dx$$

e

$$\gamma_n(t) = A_n \int_0^1 [(a\mu^2 + \beta)\Psi_1 + f(x, t)] e^{[-\beta t - \mu x]} \text{sen} \left(\sqrt{\frac{\lambda_n}{a}} x \right) dx$$

Com o objetivo de validar o método numérico utilizado, foram realizadas comparações entre os dados obtidos numericamente e pela solução analítica apresentada. Como o modelo utilizado no presente trabalho é constituído de um sistema de quatro equações diferenciais parciais acopladas, temos que a função $f(x, t)$ depende do teor de umidade do ar na equação (2.30) e da temperatura do ar na equação (2.32). Assim, para fins exclusivos de comparação, escolhemos para o termo fonte uma função teste cujo gráfico se assemelha às curvas obtidas numericamente para esse termo. Ressaltamos, para o leitor, que essas funções teste são utilizadas somente nas comparações entre as soluções analítica e numérica apresentadas na seqüência deste capítulo. Assim, nas comparações com dados experimentais e nas demais simulações que são apresentadas no próximo capítulo, voltamos a usar a formulação original para os termos fonte.

Na primeira simulação consideramos a situação com a equação de transferência de massa no ar e aproximamos o termo fonte através da função

$$f(x, t) = e^{[k_1 t + k_2 x]} \quad (3.62)$$

Assim, resolvendo a equação (3.23) com a condição inicial (3.24) e as condições de contorno (3.25), para $\Psi_0 = \Psi_1 = 1$ (situação em questão), $a = 1/4$, $b = -1$, $c = -1/2$, $k_1 = -0,03$ e $k_2 = 0,1$, obtemos os resultados para as soluções analítica e numérica mostradas, respectivamente, na figura 3.6 para três posições no interior da câmara ($x^* = 1/8$, $x^* = 1/2$ e $x^* = 7/8$).

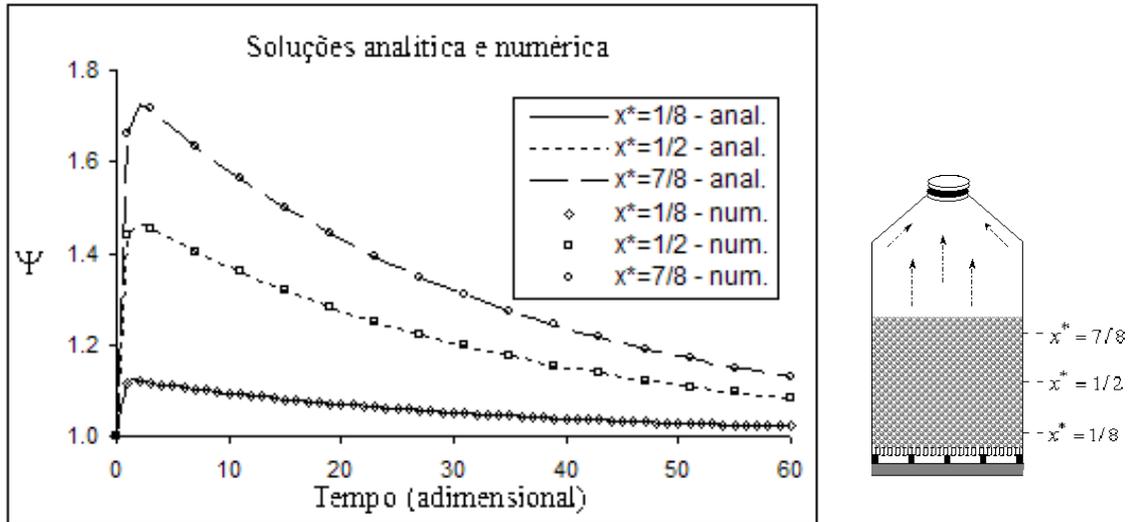


Figura 3.6: Soluções analítica e numérica de Ψ como função do tempo (adimensional) para $\Psi_0 = \Psi_1 = 1$, $a = 1/4$, $b = -1$, $c = -1/2$, $f(x, t)$ dada pela equação (3.62) com $k_1 = -0.03$ e $k_2 = 0.1$

O aumento do valor de Ψ no início do processo, quando x^* se aproxima da unidade, justifica-se pelo termo advectivo, uma vez que a geração de umidade que se tem na entrada da câmara é levada por esse processo para os demais pontos.

Observa-se, na figura 3.6, que existe boa concordância entre as curvas obtidas numérica e analiticamente para todas as posições da câmara. Essa concordância é reforçada pela figura 3.7, que mostra o valor do erro relativo entre as soluções numérica e analítica. O erro relativo é calculado por:

$$E_R = \frac{|\Psi - \bar{\Psi}|}{|\Psi|}$$

onde Ψ representa a solução analítica e $\bar{\Psi}$ a solução numérica.

Numa segunda simulação consideramos a situação com a equação de transferência

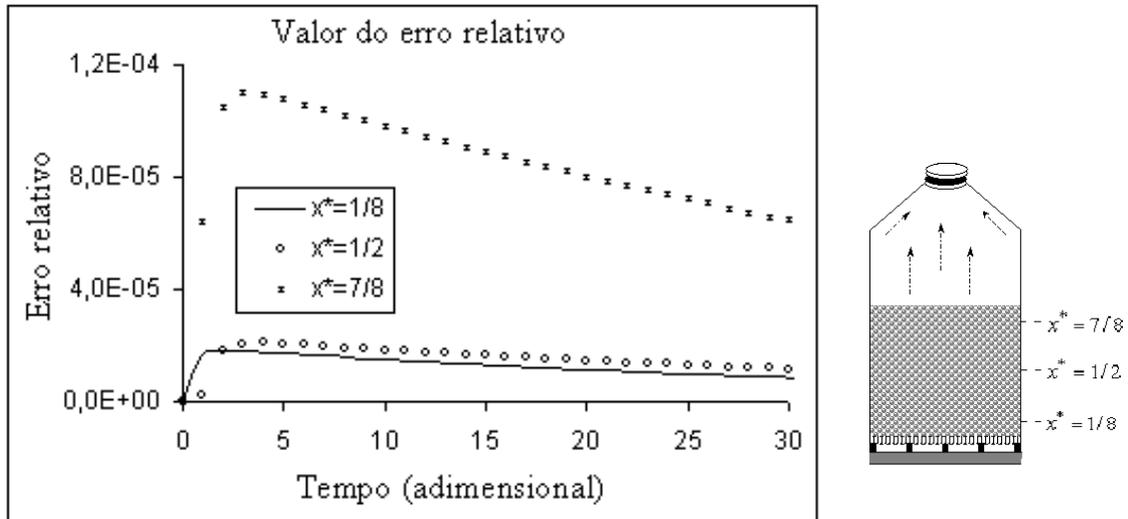


Figura 3.7: Valor do erro relativo entre as soluções analítica e numérica de Ψ como função do tempo (adimensional) para $\Psi_0 = \Psi_1 = 1$, $a = 1/4$, $b = -1$, $c = -1/2$, $f(x, t)$ dada pela equação (3.62) com $k_1 = -0.03$ e $k_2 = 0.1$

de calor no ar. Para essa situação aproximamos o termo fonte através da função

$$f(x, t) = 1 - e^{k_1 t} \quad (3.63)$$

Para esse caso precisamos resolver a equação (3.23) com a condição inicial (3.24) e as condições de contorno (3.25), para $\Psi_0 = 0$ e $\Psi_1 = 1$. Adotamos também para essa situação $a = 1/4$, $b = -1$, $c = -1/2$ e $k_1 = -0.03$ e obtemos os resultados para as soluções analítica e numérica mostrados na figura 3.8 para as mesmas posições da câmara ($x^* = 1/8$, $x^* = 1/2$ e $x^* = 7/8$).

Como era esperado, a figura 3.8 mostra que nas posições iniciais da câmara de secagem ($x^* \rightarrow 0$) ocorre um rápido aquecimento do ar. Nas posições finais da câmara ($x^* \rightarrow 1$), demora mais para ocorrer o aquecimento. Percebe-se, neste caso, a influência da convecção e da difusão, uma vez que escolhemos como termo fonte uma função independente da variável x .

Para valores do tempo (adimensional) pequenos ocorre leve perturbação na solução analítica, cuja série foi truncada a partir do décimo termo. Isso, possivelmente, se deve ao fato da condição inicial não ser contínua, pois há um salto em $x^* = 0$. Este fato torna-se claro na figura 3.9, que mostra o valor do erro relativo

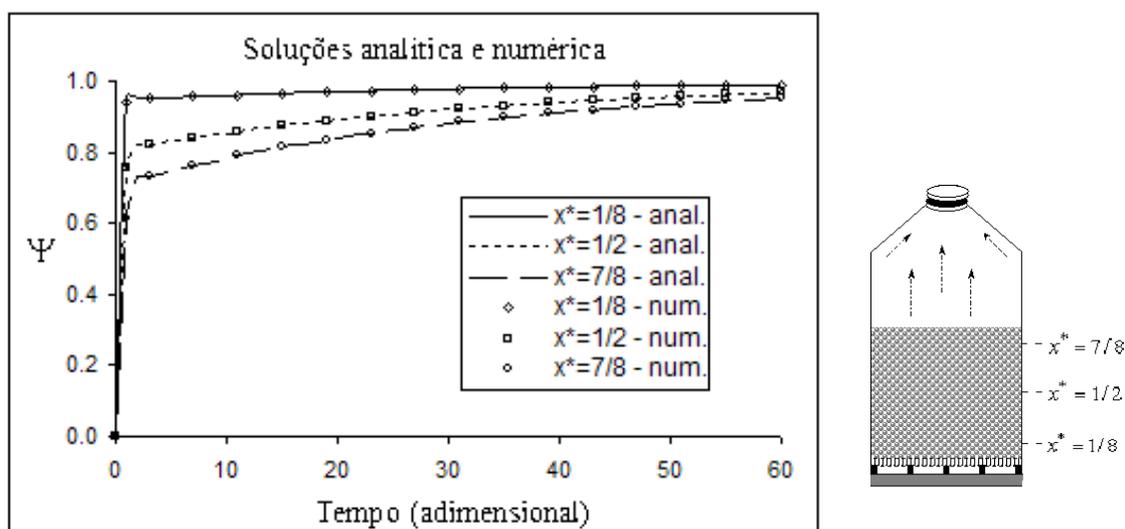


Figura 3.8: Soluções analítica e numérica de Ψ como função do tempo (adimensional) para $\Psi_0 = 0$, $\Psi_1 = 1$, $a = 1/4$, $b = -1$, $c = -1/2$, $f(x, t)$ dada pela equação (3.63) e $k_1 = -0.03$

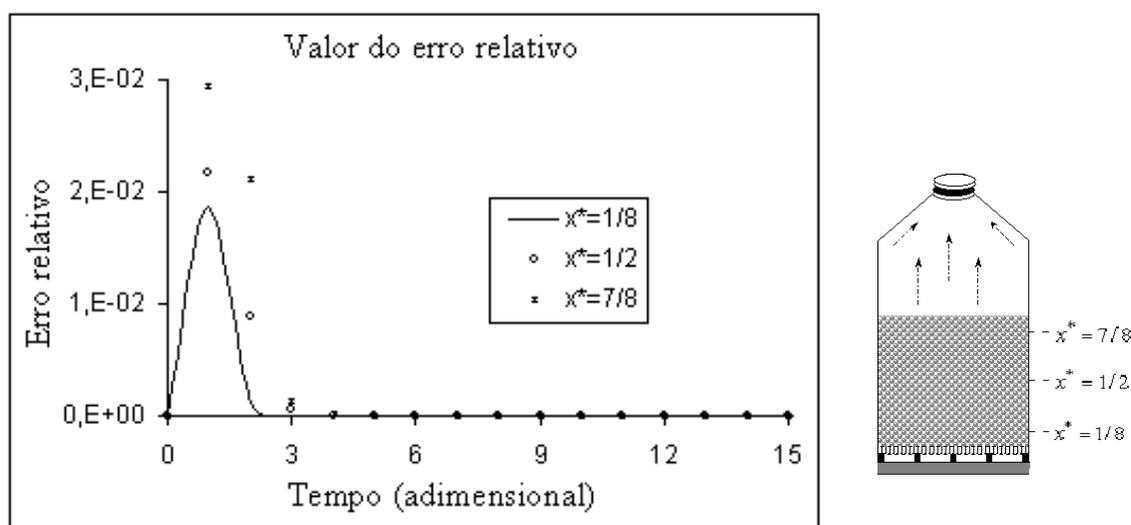


Figura 3.9: Valor do erro relativo entre as soluções analítica e numérica de Ψ como função do tempo (adimensional) para para $\Psi_0 = 0$, $\Psi_1 = 1$, $a = 1/4$, $b = -1$, $c = -1/2$, $f(x, t)$ dada pela equação (3.63) e $k_1 = -0.03$

entre as soluções analítica e numérica de Ψ como função do tempo (adimensional) para $\Psi_0 = 0$, $\Psi_1 = 1$, $a = 1/4$, $b = -1$, $c = -1/2$, $f(x, t)$ dada pela equação (3.63) e $k_1 = -0.03$. Note que para valores pequenos do tempo, o valor do erro relativo é

da ordem de 10^{-2} ; porém logo após esse erro cai para a ordem de 10^{-5} .

Observe ainda que o tempo é dado por $t = t^*L_c/U_0$ e a razão L_c/U_0 , para os valores considerados neste problema, fica na faixa de $L_c/U_0 = 10^{-2}$ a 5×10^{-2} . Segue assim que as diferenças observadas no início do processo de secagem não são importantes para as situações reais.

Uma vez avaliado o esquema numérico escolhido para resolver as equações governantes do modelo apresentado, no próximo capítulo discutiremos algumas simulações numéricas que visam a validação do modelo.

Capítulo 4

Resultados

Como já mencionado, o conjunto de equações diferenciais parciais que compõe o modelo matemático foi aproximado por um esquema numérico com aproximações de primeira ordem no tempo e de segunda ordem no espaço. Na seqüência estaremos apresentando uma série de comparações entre valores calculados numericamente pelo modelo, no caso unidimensional, com dados experimentais obtidos na literatura para secagem em leito profundo e em camada fina. Comparações com dados experimentais de secagem intermitente também serão apresentadas neste capítulo. Dando seqüência ao trabalho, faremos simulações para o problema de secagem no caso bidimensional. Em seguida, apresentaremos também simulações numéricas mostrando a influência de alguns parâmetros adimensionais envolvidos nas equações do modelo. As propriedades físicas do ar, do vapor e da água foram obtidas na literatura [31].

4.1 Comparação entre valores numéricos e dados experimentais de secagem em leito profundo para o caso 1-D

Com o objetivo de validar o modelo matemático apresentado, buscou-se, na literatura, dados experimentais de secagem de grãos. Como mencionado no capítulo 2, os termos A e n na equação (2.25), que representa o coeficiente convectivo de transferência de massa entre o ar e os grãos, foram obtidos a partir de simulações

e comparações com dados experimentais de secagem de grãos de soja [33], sendo $A = 1,33115 \times 10^{-11}$ e $n = 1,1$. Dessa forma, todas as comparações aqui apresentadas serão referentes à secagem desse tipo de grãos. No caso de secagem de outros produtos, esses coeficientes deverão ser novamente determinados. Dados experimentais para secagem em secadores de leito profundo são encontrados em Khatchatourian et al. [33] [34].

Os dados experimentais apresentados nestes dois trabalhos foram obtidos num micro secador de grãos instalado no Laboratório de secagem da UNIJUÍ (Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio grande do Sul). O referido secador do laboratório foi projetado para se assemelhar a um modelo real de secador de leito fixo, sendo composto por uma fonte de aquecimento de ar, sistema de ventilação para forçar a passagem do ar quente por entre a massa úmida de grãos, e uma caixa de secagem onde os grãos ficavam depositados durante o processo de secagem.

Para o sistema de ventilação usou-se um motor elétrico de $\frac{3}{4}$ de HP, com 3450 rotações por minuto, tendo duas hélices centrífugas acopladas em série e ligadas por uma tubulação. O fluxo de ar formado pelo ventilador era canalizado por um tubo de PVC com 50mm de diâmetro e dois metros de comprimento. A uma distância de um metro do ventilador foi instalado um medidor de vazão (diafragma) que mede a diferença de pressão exercida sobre uma coluna de álcool a ele acoplada em tubulação de vidro com escala.

Após passar pelo tubo de PVC, o ar entra para o aquecedor, uma caixa de madeira revestida internamente com papel laminado, para diminuir as perdas térmicas por radiação. Sua forma é de um prisma retangular que possui um metro de comprimento, 12cm de largura e 7cm de altura, internamente. Na caixa foram colocados 8 resistores elétricos de aquecedor cada um com potência nominal de 400 watt, sendo que 6 deles podem ser ligados e desligados independentemente por interruptores fixos e os outros dois, controlados através de reostatos, permitindo ajuste mais preciso da temperatura do ar de secagem. Esses dispositivos tornaram possível a manutenção das temperaturas praticamente constantes na entrada da caixa de secagem com uma margem de erro de aproximadamente $0,5^{\circ}C$. Saindo da caixa de aquecimento, o ar quente passa por uma conexão de 50cm de comprimento que

faz a ligação entre a caixa de aquecimento e a caixa de secagem. Na conexão que liga as duas caixas, foi colocado um dispositivo para não permitir a entrada do ar na caixa de secagem antes de atingir o equilíbrio de temperatura desejado, o que ocorreu cerca de 3 a 4 minutos após ligados os resistores e o ventilador. Dessa forma, procurou-se iniciar a secagem somente depois do ar atingir a temperatura na qual é realizada toda a secagem, temperatura esta medida por um sensor instalado dentro da conexão e que foi ligado a um multímetro digital com precisão de $0,1^{\circ}C$.

A caixa de secagem, colocada na posição vertical, tem a forma de um prisma de base retangular, de dimensões $12cm$ de comprimento e $7cm$ de largura, e $32cm$ de altura. As paredes são de madeira e as dimensões citadas são internas. A caixa foi dividida em 4 partes congruentes por planos horizontais com telas, denominadas aqui de secções. As bases inferior e superior também foram feitas de telas a fim de permitir a passagem do ar. Nos centros das 4 secções foram instalados sensores de temperatura que foram ligados a um outro multímetro digital também com precisão de $0,1^{\circ}C$, que foi acoplado a um controle eletrônico (bloco microcontrolado usando o PIC 16F84). Um esquema do secador experimental é apresentado na figura 4.1, sendo (1) o motor, (2) o diafragma, (3) a fonte de calor com resistores, (4) a conexão, (5) a câmara de secagem e (6) os sensores de temperatura..

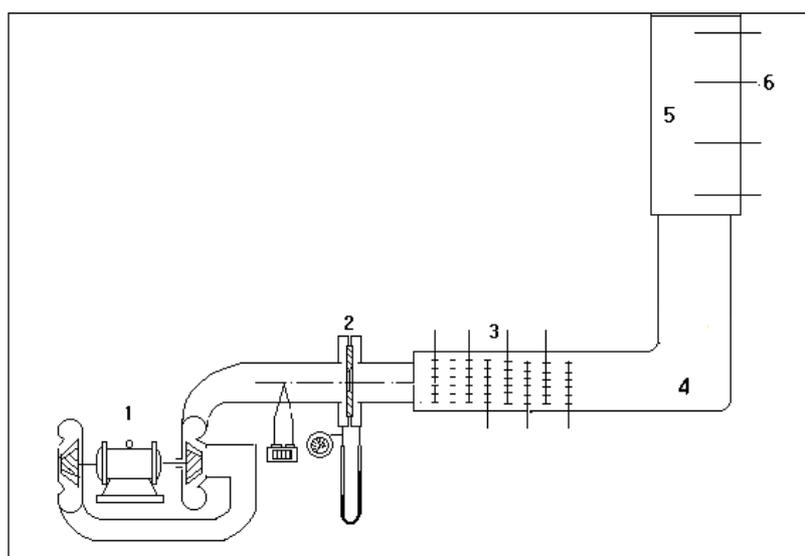


Figura 4.1: Esquema do equipamento experimental

Para melhor verificar o perfil de distribuição da temperatura em relação ao tempo

dentro dos grãos, um minúsculo termopar (com cerca de um milímetro de diâmetro), foi ligado a um terceiro multímetro digital.

Os valores da umidade nas quatro secções, após determinados tempos de secagem, foram calculados a partir da variação de massa apresentada pelos grãos. Para a obtenção dessa variação de massa, foi feita a pesagem de todos os grãos de cada secção antes e depois da secagem usando uma balança analítica com precisão de $0,01g$. Para evitar perdas de massa na forma de vapor de água até o procedimento da pesagem, os grãos foram colocados dentro de sacos plásticos que foram vedados, imediatamente após o término de cada sessão de secagem. Os valores de umidade dos grãos obtidos, foram médios para cada secção.

A velocidade média do ar de secagem foi obtida através da variação de pressão calculada a partir da medição da variação de altura de uma coluna de álcool, acoplada ao diafragma (placa de orifício), uma placa cilíndrica com um orifício no centro de $0,001017m^2$ de área, instalada no interior do tubo. Os cálculos foram efetuados conforme sugere Toniazzi, et al. [90] [91], usando a equação de Bernoulli.

Na figura 4.2 mostra-se um comparativo dos dados experimentais com os valores obtidos numericamente pelo modelo proposto para a temperatura $T^* = \frac{T - T_{amb}}{T_{ar} - T_{amb}}$ dos grãos na forma adimensional com $T_{ar} = 65^\circ C$, $T_{amb} = 18^\circ C$, $X_0 = 0,31$, $U_0 = 4,75m s^{-1}$ e umidade relativa do ar de 85%, o que corresponde à umidade inicial do ar de aproximadamente $Y = 10^{-2}$.

A comparação para o teor de umidade dos grãos na forma adimensional $X^* = \frac{X}{X_0}$ para essas mesmas condições é mostrada na figura 4.3 ao longo de três horas de secagem.

Observa-se que há crescimento muito rápido da temperatura dos grãos logo na entrada da câmara de secagem, enquanto que quando $x^* \rightarrow 1$, a temperatura cresce mais lentamente. Isso se deve ao fato do ar entrar quente naquela posição e este perder calor para os grãos, chegando em ($x^* = 1$) com temperatura bastante inferior a do início da câmara de secagem. Esse aquecimento rápido no início da câmara, associado à presença de ar mais seco naquela posição, justifica também o decréscimo acentuado das curvas de teor de umidade na posição $x^* = 1/8$, quando comparada com a posição $x^* = 7/8$ onde, além de ter temperaturas mais baixas, tem-se maior

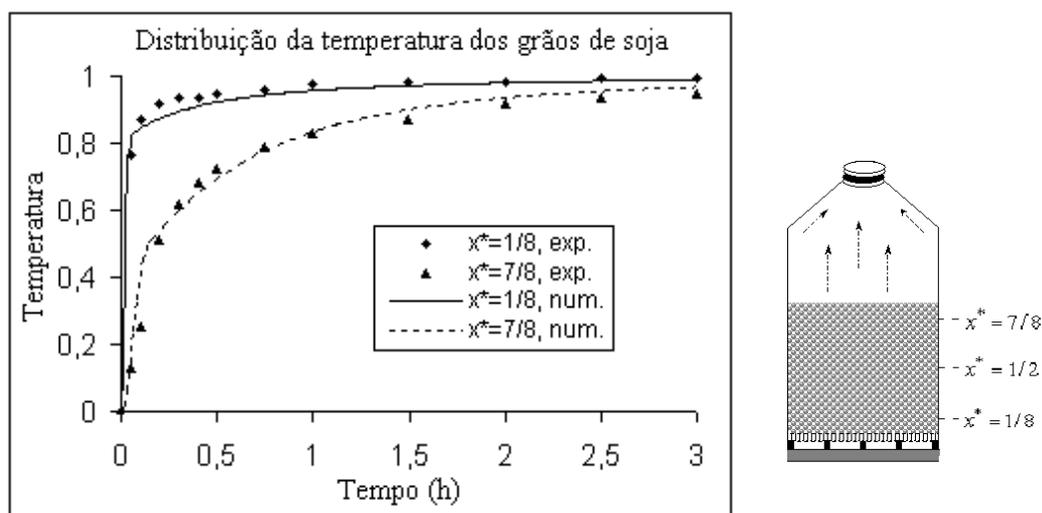


Figura 4.2: Distribuição da temperatura dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{ar} = 65^{\circ}C$, $T_{amb} = 18^{\circ}C$, $X_0 = 0,31$, $U_0 = 4,75m.s^{-1}$ e $UR = 85\%$

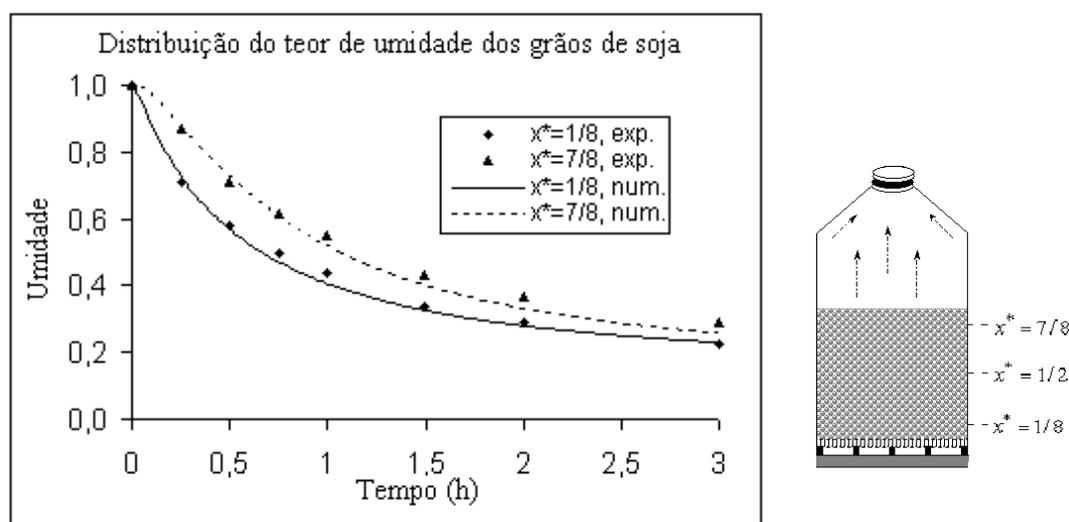


Figura 4.3: Distribuição do teor de umidade dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{ar} = 65^{\circ}C$, $T_{amb} = 18^{\circ}C$, $X_0 = 0,31$, $U_0 = 4,75m.s^{-1}$ e $UR = 85\%$

concentração de vapor no ar, uma vez que a massa de água na forma de vapor que sai dos grãos junta-se à umidade inicialmente já contida no ar. Esses mesmos fenômenos também são observados na figura 4.4, que mostra as curvas de distribuição da temperatura dos grãos e na figura 4.5, que mostra o teor de umidade dos grãos de soja para $T_{ar} = 55^{\circ}C$, $T_{amb} = 16^{\circ}C$, $X_0 = 0,21$, $U_0 = 4,61m.s^{-1}$ e umidade

relativa do ar de 80%, correspondendo à umidade inicial do ar de aproximadamente $Y = 8,2 \times 10^{-3}$.

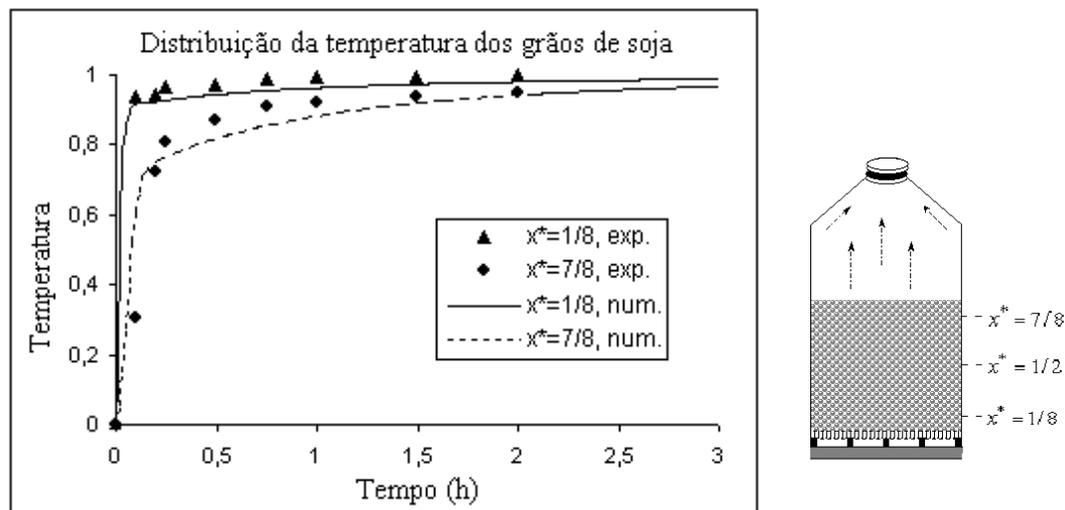


Figura 4.4: Distribuição da temperatura dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{ar} = 55^{\circ}C$, $T_{amb} = 16^{\circ}C$, $X_0 = 0,21$, $U_0 = 4,61m.s^{-1}$ e $UR = 80\%$

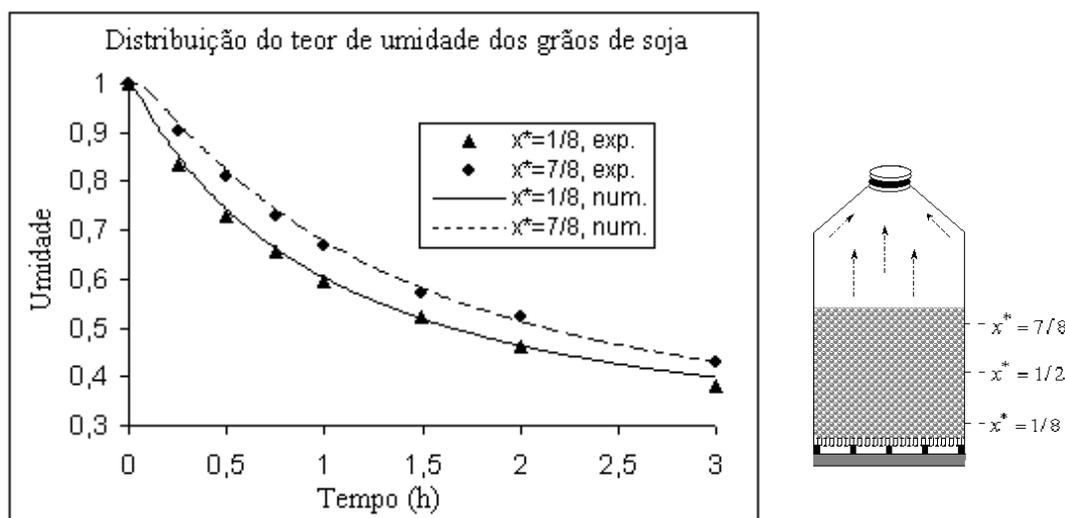


Figura 4.5: Distribuição do teor de umidade dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{ar} = 55^{\circ}C$, $T_{amb} = 16^{\circ}C$, $X_0 = 0,21$, $U_0 = 4,61m.s^{-1}$ e $UR = 80\%$

A exemplo do que ocorre com grande parte dos modelos disponíveis na literatura, nosso modelo apresenta boa concordância entre os valores calculados e os dados experimentais disponíveis para temperaturas de secagem relativamente baixas (na

faixa de $50^{\circ}C$ a $70^{\circ}C$, aproximadamente). Observamos pequena discrepância nas curvas da temperatura quando $x^* \rightarrow 1$ na câmara de secagem mostradas na figura 4.4. Acreditamos que essa discrepância seja resultado de alguma simplificação feita no modelo e/ou algum erro da leitura na obtenção dos dados experimentais. Para ter alguma contribuição significativa do presente modelo em relação aos que já existiam anteriormente, é importante avaliar a eficiência deste modelo para temperaturas mais elevadas do ar de secagem. Essa comparação é feita com dados experimentais de secagem de grãos de soja em camada fina e será apresentada na seção seguinte.

4.2 Comparação entre valores numéricos e dados experimentais de secagem em camada fina

Com a finalidade de avaliar a eficiência do modelo apresentado nesta tese para temperaturas mais elevadas do ar de secagem, apresentamos comparações feitas com dados experimentais de secagem de grãos de soja para temperaturas de $80^{\circ}C$ e $110^{\circ}C$. Encontramos dados experimentais para essa faixa de temperatura para secagem em camada fina, obtidos em Borges [9]. Os experimentos apresentados neste trabalho também foram realizados no laboratório de secagem da UNIJUÍ, no equipamento já descrito anteriormente, porém, sendo a câmara de secagem substituída por bandejas contendo uma camada delgada de grãos a serem secados. Como os dados referem-se à camada fina, as curvas numéricas respectivas foram calculadas na posição $x^* = 0$. Os valores das condições iniciais neste experimento são diferentes do que nas simulações anteriores, seguindo as condições usadas nos experimentos obtidos na literatura.

A figura 4.6 mostra as curvas de secagem para $T_{ar} = 80^{\circ}C$, $T_{amb} = 22^{\circ}C$, $X_0 = 0,24$ e para valores da velocidade do ar na entrada da câmara de secagem de $U_0 = 0,5ms^{-1}$ e de $U_0 = 1,5ms^{-1}$ e $UR = 68\%$. Já a figura 4.7 mostra o comparativo entre as curvas de secagem calculadas e experimentais para $T_{ar} = 110^{\circ}C$, $T_{amb} = 20^{\circ}C$, $X_0 = 0,24$ e para valores da velocidade do ar na entrada da câmara de secagem de $U_0 = 0,5ms^{-1}$ e de $U_0 = 1,5ms^{-1}$ e $UR = 68\%$.

Observe, novamente, que há boa concordância para as curvas calculadas pelo

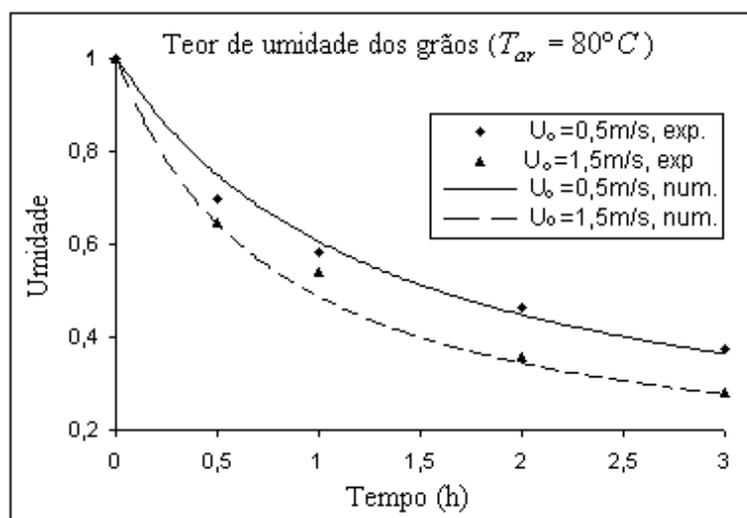


Figura 4.6: Distribuição do teor de umidade dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{ar} = 80^{\circ}C$, $T_{amb} = 22^{\circ}C$, $X_0 = 0,24$ e $UR = 68\%$

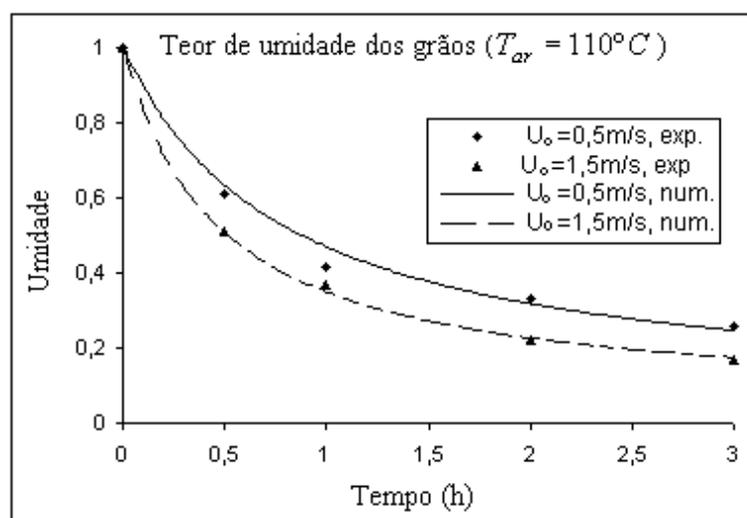


Figura 4.7: Distribuição do teor de umidade dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{ar} = 110^{\circ}C$, $T_{amb} = 20^{\circ}C$, $X_0 = 0,24$ e $UR = 68\%$

modelo com os dados experimentais, o que garante boa confiabilidade ao modelo também para temperaturas elevadas. Note também, nas figuras 4.6 e 4.7, que a velocidade do ar tem influência significativa no processo de transferência de massa entre os grãos e o ar, o que justifica a inclusão desse fator na equação (2.25). Da mesma forma, a variação dos outros parâmetros envolvidos nesta equação são satis-

fatórios nos resultados apresentados, apesar das pequenas discordâncias nas curvas do teor de umidade apresentadas nas figuras 4.6 e 4.7, que acreditamos serem pequenos problemas de ajustes na influência da velocidade logo no início do processo de secagem, principalmente no caso das baixas velocidades, além de possíveis erros de leitura na obtenção de dados experimentais.

Uma avaliação do modelo para o problema de secagem intermitente também é feita e é apresentada na seção que segue.

4.3 Comparação entre valores numéricos e dados experimentais para a secagem intermitente

A secagem intermitente consiste em submeter os grãos a um processo de secagem com ar quente por um determinado período, seguido por outro período de tempo em que o grão é resfriado. Em alguns casos, durante o período de resfriamento, ocorre a aeração dos grãos, isto é, o sistema de ventilação não é desligado, cessando apenas o aquecimento do ar de secagem.

Dados experimentais com esse tipo de processo são apresentados por Weber, [92] [93]. Os dados experimentais apresentados nestes trabalhos também foram obtidos no laboratório de secagem de grãos da UNIJUÍ, nos mesmos equipamentos descritos anteriormente, porém, com outras dimensões para a câmara de secagem dos grãos. A forma da nova caixa de secagem também é de um prisma retangular, porém com dimensões de $24,5\text{cm}$ por $13,5\text{cm}$ na base retangular e 50cm de profundidade. A caixa também foi dividida em quatro seções e os sensores colocados na parte central de cada seção.

Na seqüência apresentamos as comparações entre os dados numéricos e os dados experimentais para três simulações, para diferentes valores da temperatura do ar de secagem, da velocidade do ar na entrada da câmara, do teor de umidade inicial do produto e da temperatura ambiente. Para cada uma das três simulações são apresentados os gráficos com as curvas da temperatura do ar, do teor de umidade dos grãos e da temperatura dos grãos de soja que foram secados. Os resultados são apresentados para quatro posições da câmara de secagem ($x^* = 1/8$, $x^* = 3/8$,

$x^* = 5/8$ e $x^* = 7/8$). Os valores da temperatura e do teor de umidade são usados na forma adimensional.

A primeira simulação foi realizada para temperatura ambiente $T_{amb} = 23^\circ C$, temperatura do ar de secagem na entrada da câmara $T_{ar} = 70^\circ C$, teor de umidade inicial do produto $X_0 = 0,214$, velocidade do ar de secagem na entrada da câmara $U_0 = 1,25ms^{-1}$ e umidade relativa do ar ambiente $UR = 48,7\%$.

A figura 4.8 compara os valores obtidos pelo esquema numérico e os dados experimentais da temperatura do ar no interior do secador para três horas de secagem com ar quente seguido de cinquenta minutos de aeração com temperatura do ar na entrada da câmara igual à temperatura ambiente. Observa-se uma discordância significativa nos valores da temperatura no período da aeração. Esse fato será avaliado mais tarde, após a apresentação da figura 4.16.

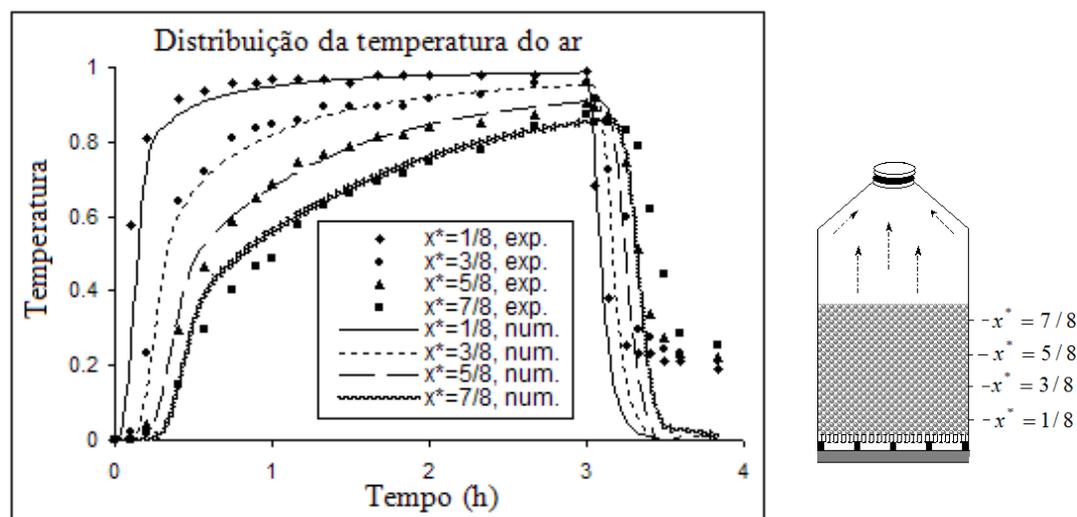


Figura 4.8: Distribuição da temperatura do ar no interior da câmara para $T_{amb} = 23^\circ C$, $T_{ar} = 70^\circ C$, $X_0 = 0,214$ e $U_0 = 1,25ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidas de 50 minutos de aeração

Os comparativos entre valores numéricos e dados experimentais para a distribuição do teor de umidade dos grãos de soja obtidos na primeira simulação são mostrados na figura 4.9. Já as curvas de distribuição da temperatura dos grãos de soja para as mesmas condições da primeira simulação, porém com 45 minutos de secagem com ar quente, seguidos de 50 minutos de aeração com temperatura igual

à temperatura ambiente, são apresentados na figura 4.10.

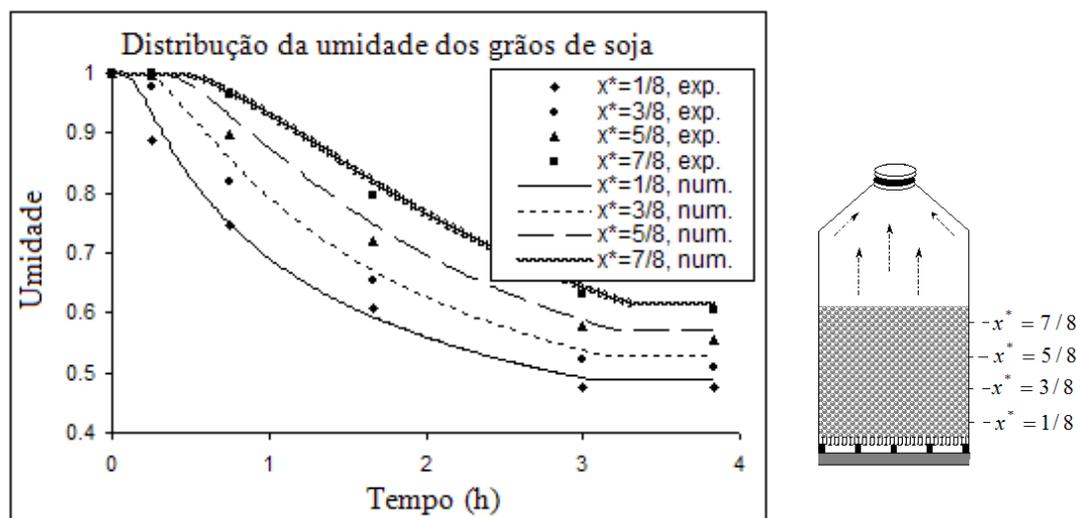


Figura 4.9: Distribuição do teor de umidade dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{amb} = 23^{\circ}C$, $T_{ar} = 70^{\circ}C$, $X_0 = 0,214$ e $U_0 = 1,25ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidas de 50 minutos de aeração

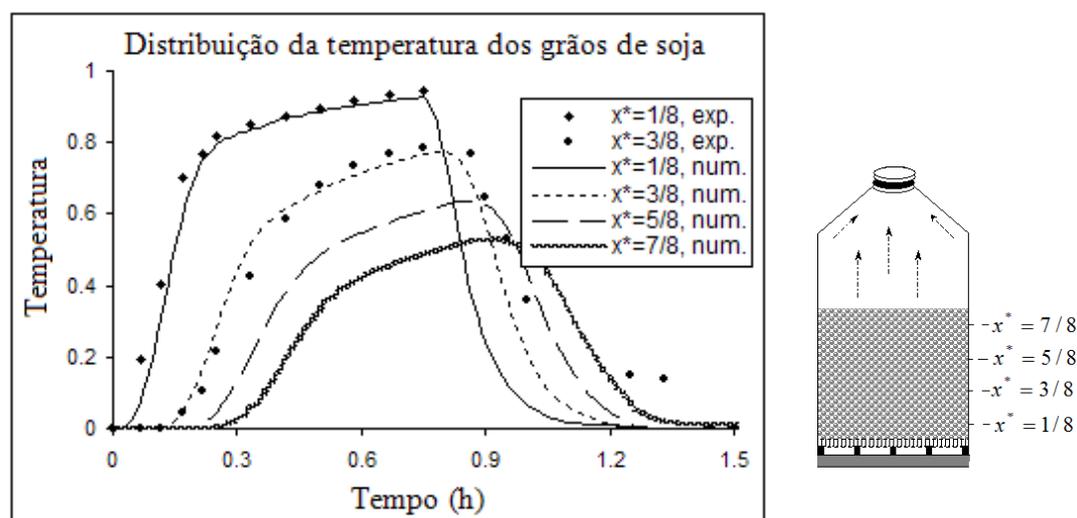


Figura 4.10: Distribuição da temperatura dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{amb} = 23^{\circ}C$, $T_{ar} = 70^{\circ}C$, $X_0 = 0,214$ e $U_0 = 1,25ms^{-1}$ com 45 minutos de secagem seguidos de 50 minutos de aeração

Observe que há boa concordância entre os valores obtidos numericamente com os dados experimentais, principalmente para as curvas que mostram o teor de umidade

dos grãos (figura 4.9). Já no caso das curvas de temperatura, observa-se um rápido desvio entre os valores numéricos e experimentais na parte final da câmara. Como possíveis causas para esses desvios, apontamos as perdas de calor na saída da câmara, não consideradas no modelo, e a eventual interferência do meio granular no processo de convecção de forma que no modelo, onde essas situações não são consideradas, a temperatura na parte final da câmara de secagem se eleva mais rapidamente do que na situação real (experimento).

Uma segunda simulação foi realizada para temperatura ambiente $T_{amb} = 21^{\circ}C$, temperatura do ar de secagem na entrada da câmara $T_{ar} = 70^{\circ}C$, teor de umidade inicial do produto $X_0 = 0,227$, velocidade do ar de secagem na entrada da câmara $U_0 = 2,5ms^{-1}$ e umidade relativa do ar ambiente $UR = 62\%$.

A figura 4.11 compara os valores numéricos com os dados experimentais da temperatura do ar no interior do secador para três horas de secagem com ar quente seguido de cinquenta minutos de aeração. As referidas curvas são mostradas para as mesmas posições que na simulação anterior.

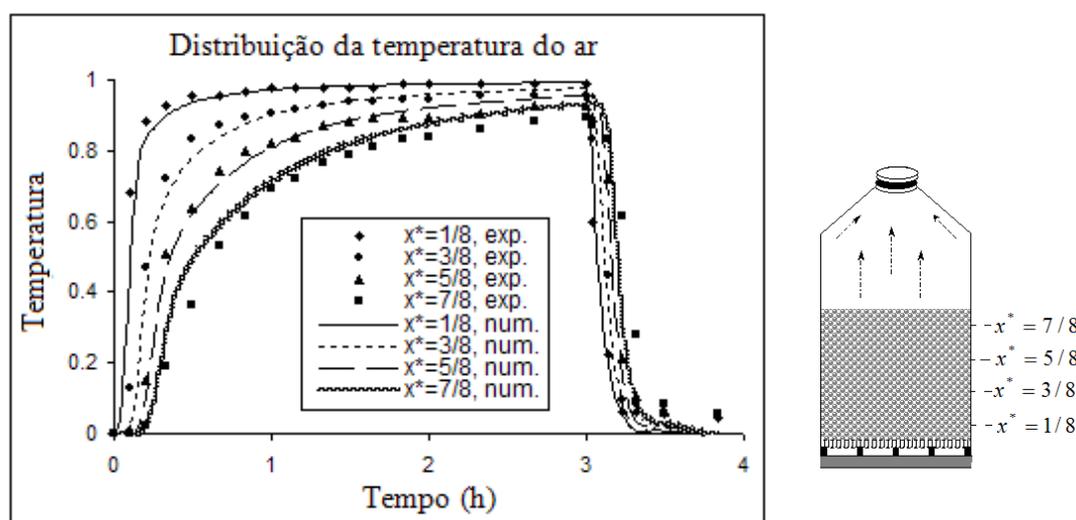


Figura 4.11: Distribuição da temperatura do ar no interior da câmara para $T_{amb} = 21^{\circ}C$, $T_{ar} = 70^{\circ}C$, $X_0 = 0,227$ e $U_0 = 2,5ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidos de 50 minutos de aeração

As curvas de distribuição do teor de umidade (adimensional) dos grãos de soja (valores numéricos e experimentais) para a segunda simulação são mostrados na

figura 4.12.

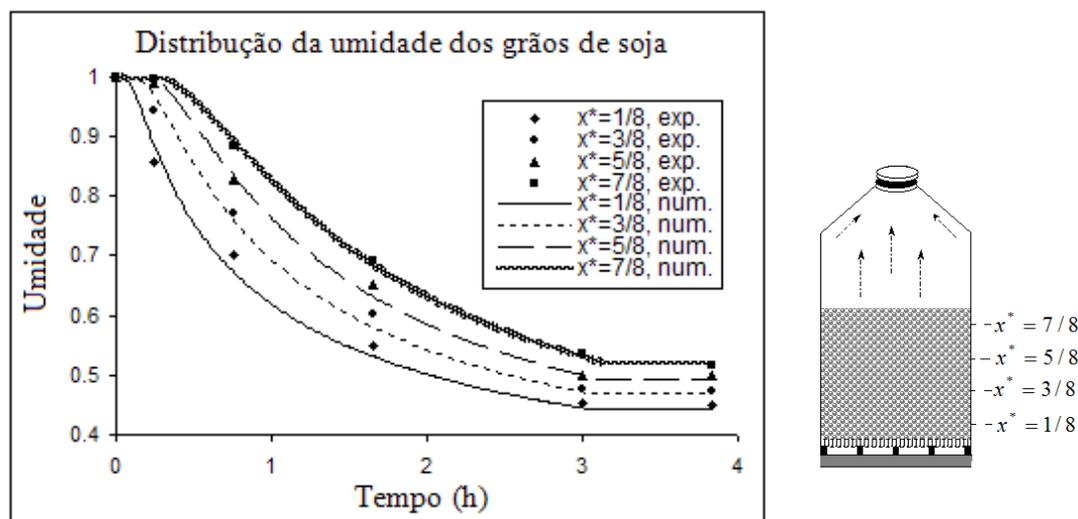


Figura 4.12: Distribuição do teor de umidade dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{amb} = 21^{\circ}C$, $T_{ar} = 70^{\circ}C$, $X_0 = 0,227$ e $U_0 = 2,5ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidos de 50 minutos de aeração

Já as curvas de distribuição da temperatura dos grãos para as mesmas condições da segunda simulação são apresentadas na figura 4.13. Os dados experimentais para as curvas da temperatura dos grãos encontrados na literatura não apresentaram medições para todas as seções da câmara. Por esse motivo, nesta figura, apresentamos valores experimentais apenas para a posição $x^* = 7/8$. Optamos, porém, por apresentar os valores numéricos de todas as seções. Pelo mesmo motivo, na figura 4.10 são apresentados dados experimentais apenas para as posições $x^* = 1/8$ e $x^* = 3/8$.

A exemplo do que ocorreu na primeira simulação, nesta também observamos boa concordância entre os valores obtidos numericamente com os dados experimentais, especialmente para as curvas que mostram o teor de umidade dos grãos (figura 4.12). Novamente, no caso das curvas de temperatura (figuras 4.11 e 4.13), observa-se discordância um pouco maior entre os valores numéricos e experimentais na parte final da câmara, isto é, quando $x^* \rightarrow 1$.

Para finalizar as comparações com dados experimentais apresentamos uma terceira simulação do processo de secagem intermitente. Desta vez, a simulação foi

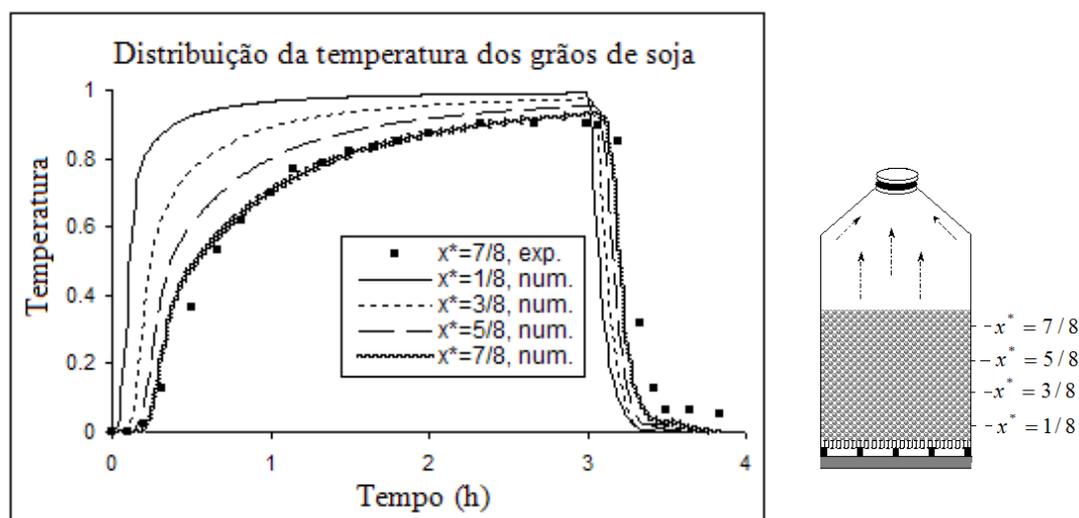


Figura 4.13: Distribuição da temperatura dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{amb} = 21^{\circ}C$, $T_{ar} = 70^{\circ}C$, $X_0 = 0,227$ e $U_0 = 2,5ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidos de 50 minutos de aeração

realizada para temperatura ambiente $T_{amb} = 13^{\circ}C$, temperatura do ar de secagem na entrada da câmara $T_{ar} = 50^{\circ}C$, teor de umidade inicial do produto $X_0 = 0,227$, velocidade do ar de secagem na entrada da câmara $U_0 = 2,5ms^{-1}$ e umidade relativa do ar ambiente $UR = 70\%$. As curvas da temperatura do ar dessa simulação são mostradas na figura 4.14.

A figura 4.15 compara os valores do teor de umidade do produto ao longo do tempo referentes à terceira simulação, enquanto que as curvas da temperatura dos grãos de soja são mostrados na figura 4.16.

Observe nas curvas de temperatura que, durante a aeração, tem-se maior resfriamento na solução numérica do que na experimental. Imaginamos que uma possível causa para essa discrepância seja o fato de que o ambiente em que estava o secador (o laboratório de secagem é no interior de uma sala) possa ter aquecido durante as três horas de secagem com ar quente. No caso desta hipótese ser verdadeira, no momento em que foi feita a aeração, a temperatura ambiente era superior que a temperatura no início da secagem. Já no modelo, essa variação de temperatura foi desconsiderada.

Com o objetivo de verificar a influência da posição dos grãos a serem secados no

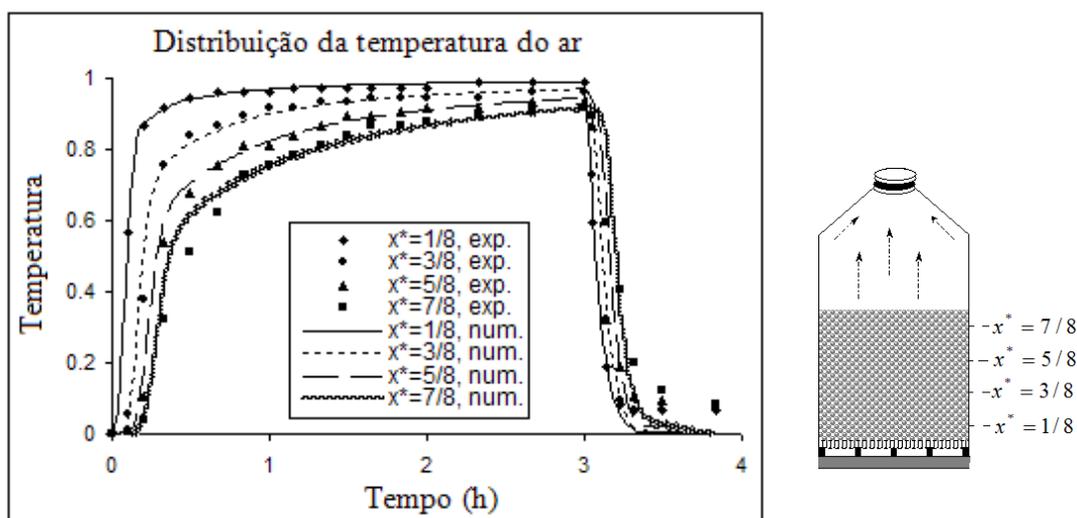


Figura 4.14: Distribuição da temperatura do ar no interior da câmara para $T_{amb} = 13^\circ C$, $T_{ar} = 50^\circ C$, $X_0 = 0,227$ e $U_0 = 2,5ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidos de 50 minutos de aeração

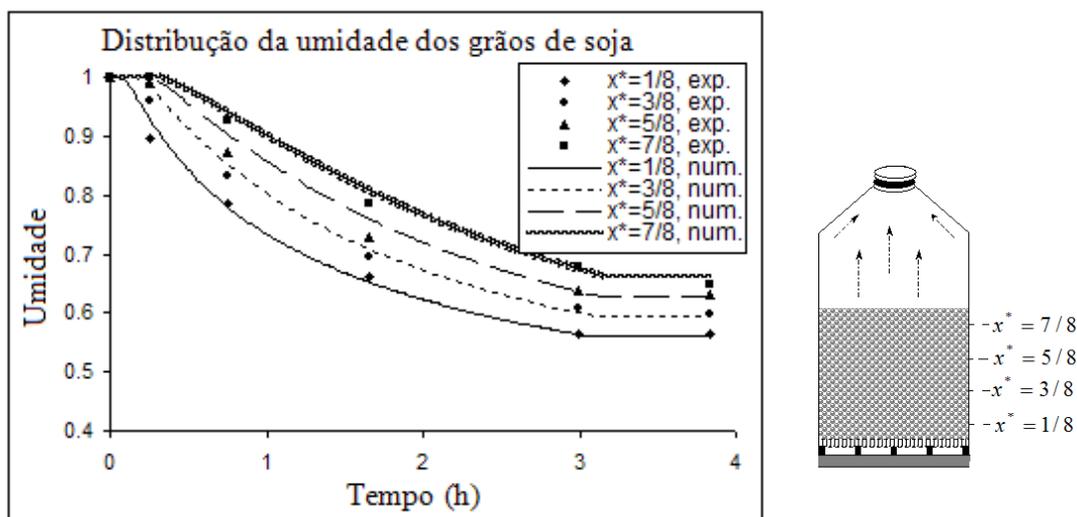


Figura 4.15: Distribuição do teor de umidade dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{amb} = 13^\circ C$, $T_{ar} = 50^\circ C$, $X_0 = 0,227$ e $U_0 = 2,5ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidos de 50 minutos de aeração

interior do secador, foram feitas simulações numéricas em duas dimensões. Estas simulações são apresentadas na próxima seção.

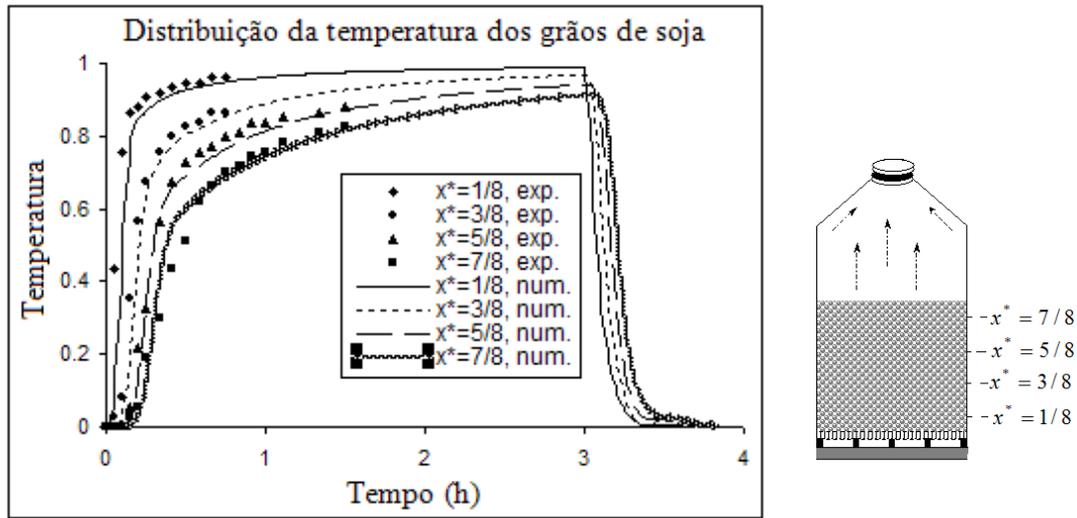


Figura 4.16: Distribuição da temperatura dos grãos de soja no interior da câmara para $T_{amb} = 13^{\circ}C$, $T_{ar} = 50^{\circ}C$, $X_0 = 0,227$ e $U_0 = 2,5ms^{-1}$ com 3 horas de secagem seguidos de 50 minutos de aeração

4.4 Simulações numéricas de secagem para o caso 2-D

As simulações numéricas para o caso bidimensional foram feitas considerando-se uma câmara de secagem com $32cm$ de altura e $12cm$ de largura, conforme os experimentos descritos na primeira seção do presente capítulo. O domínio espacial foi dividido em uma malha retangular, conforme mostra a figura 4.17.

Para a integração temporal considerou-se um intervalo de tempo da ordem de 10^{-4} .

As simulações numéricas aqui apresentadas foram realizadas para $T_{ar} = 90^{\circ}C$, $T_{amb} = 25^{\circ}C$, $X_0 = 0,32$, $U_0 = 1,0ms^{-1}$ e umidade relativa do ar de 80%, o que corresponde a umidade inicial do ar de secagem de aproximadamente $Y_0 = 1,4 \times 10^{-2}$.

As Figuras 4.18 a 4.21 mostram as simulações numéricas para a temperatura (adimensional) dos grãos $T^* = \frac{T-T_{amb}}{T_{ar}-T_{amb}}$ para os seguintes tempos: $t = 0,5h$ (Fig. 4.18), $t = 1h$ (Fig. 4.19), $t = 1,5h$ (Fig. 4.20) e $t = 2h$ (Fig. 4.21). Para cada tempo, mostramos a variação da temperatura dos grãos em relação à posição horizontal do grão (valor de j) para as posições verticais x^* ($x^* = 0$ para $i = 0$,

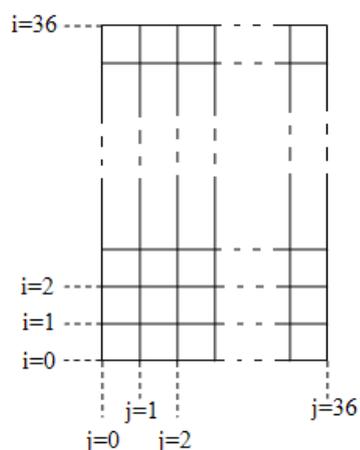


Figura 4.17: Malha para a simulação numérica no caso 2-D

$x^* = 1/4$ para $i = 9$, $x^* = 1/2$ para $i = 18$, $x^* = 3/4$ para $i = 27$ e $x^* = 1$ para $i = 36$).

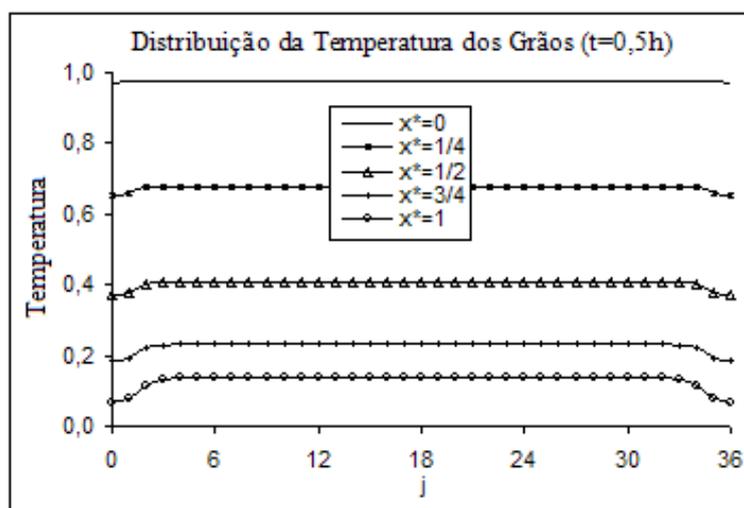


Figura 4.18: Distribuição da temperatura (adimensional) dos grãos para $t = 0,5h$

Note que o valor da temperatura cresce em todas as posições da câmara de secagem ao longo do tempo; porém na entrada da mesma (em $x^* = 0$) a temperatura cresce praticamente de forma uniforme, independente do valor de j . Já para as posições mais avançadas (próximo de $x^* = 1$) percebe-se que nas proximidades das paredes a temperatura dos grãos permanece mais baixa do que na parte central (em relação à horizontal) da câmara de secagem, aproximando as curvas de temperatura

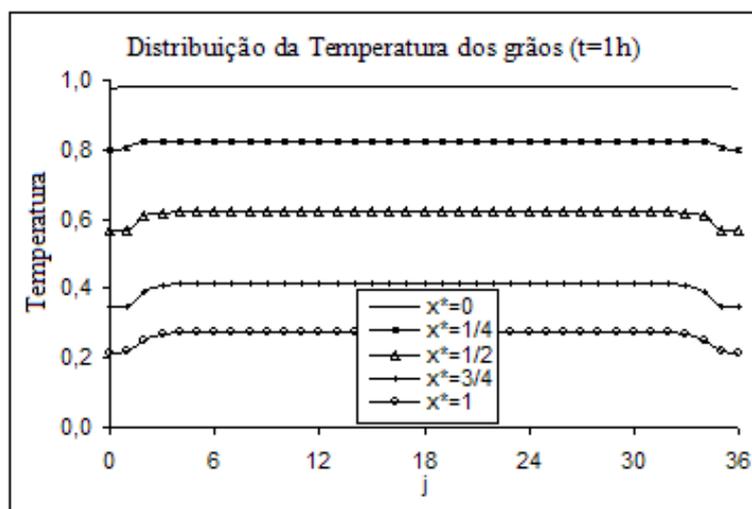


Figura 4.19: Distribuição da temperatura (adimensional) dos grãos para $t = 1h$

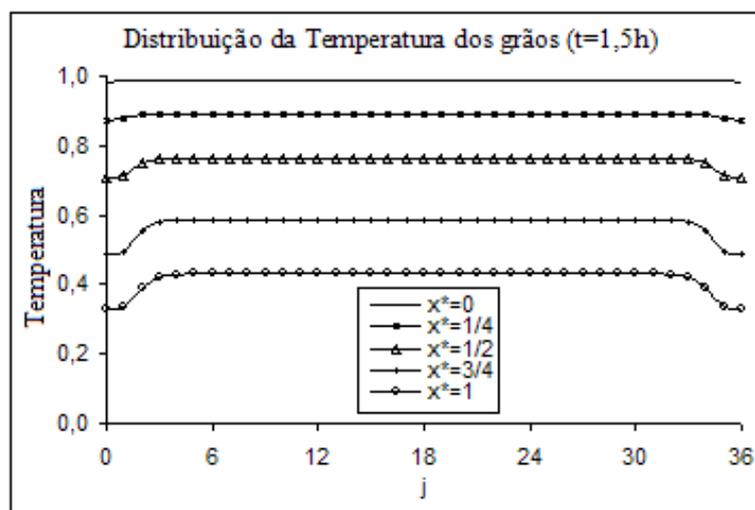


Figura 4.20: Distribuição da temperatura (adimensional) dos grãos para $t = 1,5h$

à forma parabólica.

Simulações numéricas do teor de umidade dos grãos na forma adimensional $X^* = \frac{X}{X_0}$ para os tempos $t = 0,5h$, $t = 1h$, $t = 1,5h$ e $t = 2h$ são mostradas nas figuras 4.22 até 4.25, respectivamente, para as mesmas posições adotadas no caso da temperatura dos grãos.

Observamos que o teor de umidade dos grãos decresce ao longo do tempo em toda a câmara de secagem. A exemplo do que ocorre com as curvas de temperatura, novamente temos um perfil parabólico, porém agora o processo é mais lento próximo

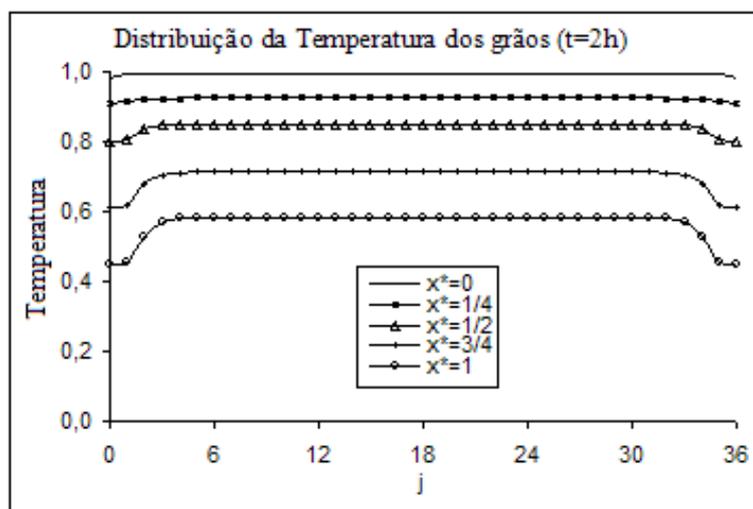


Figura 4.21: Distribuição da temperatura (adimensional) dos grãos para $t = 2h$

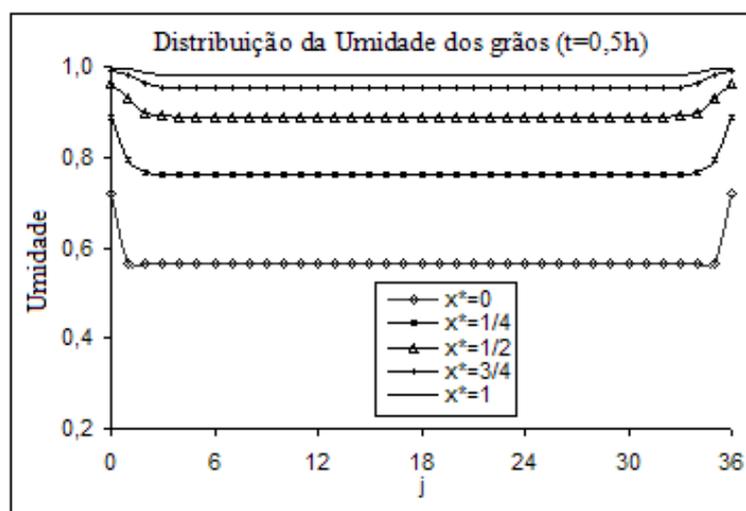


Figura 4.22: Distribuição da umidade (adimensional) dos grãos para $t = 0,5h$

das paredes. Esse fenômeno se acentua nas posições da câmara de secagem nas quais $x^* \rightarrow 1$. Acredita-se que no caso de secadores reais, onde as dimensões são bastante maiores do que as consideradas neste trabalho, esse efeito pode se tornar mais significativo.

O estudo apresentado nesta seção sugere a necessidade do uso de duas ou três dimensões no momento do projeto de secadores. Possivelmente, entradas de ar nas laterais dos secadores poderiam auxiliar na obtenção de um processo mais uniforme de secagem. Porém este estudo requer um esforço computacional bastante elevado,

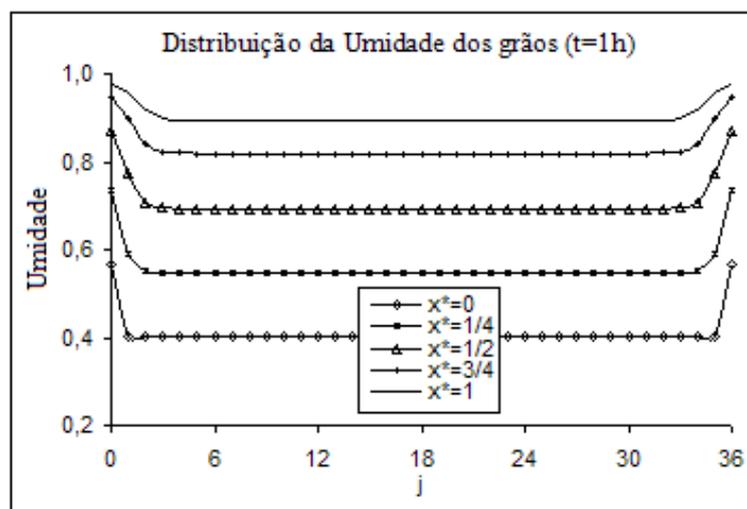


Figura 4.23: Distribuição da umidade (adimensional) dos grãos para $t = 1h$

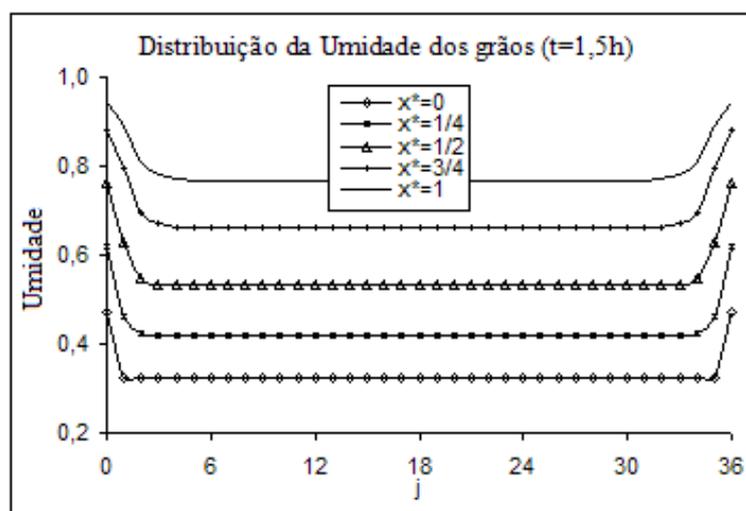


Figura 4.24: Distribuição da umidade (adimensional) dos grãos para $t = 1,5h$

motivo pelo qual as simulações aqui apresentadas foram realizadas no computador Cray - T94 do CESUP da UFRGS. Para a obtenção dos dados acima, o programa levou em torno de vinte dias para rodar neste computador.

Após a validação do modelo matemático através de inúmeras comparações entre valores numéricos e dados experimentais e das simulações em duas dimensões, foram realizadas algumas simulações para avaliar a influência de parâmetros adimensionais. Essas simulações foram realizadas para o caso unidimensional e são apresentadas na próxima seção.

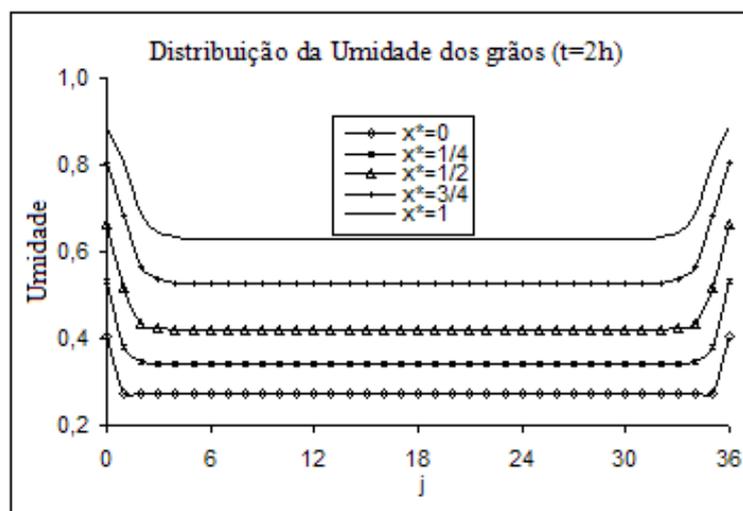


Figura 4.25: Distribuição da umidade (adimensional) dos grãos para $t = 2h$

4.5 Avaliação da influência de parâmetros adimensionais

Quando um modelo descreve os processos de transferência de calor e massa convém fazer uma avaliação da influência dos parâmetros adimensionais envolvidos. Isso permitirá maior controle dos parâmetros que induzem a variações significativas nas variáveis do modelo. Neste trabalho, verificou-se a influência dos números de Reynolds, Prandtl, Schmidt e Eckert. O primeiro e o último apresentaram as influências mais significativas no processo de secagem. Na figura 4.26 mostra-se a influência do número de Reynolds na faixa $Re = 200$ a 2000 para o teor de umidade dos grãos. Vale observar que essa variação é obtida pela variação da velocidade do ar de secagem. Note que quanto maior a velocidade do ar, mais energia é trazida para dentro da câmara e mais rapidamente a umidade que sai dos grãos é carregada para fora do secador.

Para avaliar a influência do número de Eckert no processo de transferência de calor e massa, a figura 4.27 mostra a distribuição da temperatura dos grãos para valores desse parâmetro na faixa $Ec = 10^{-5}$ a 5×10^{-5} . Essas variações foram obtidas pela variação do gradiente de temperatura. Como era esperado, para valores menores do número de Eckert temos um crescimento mais rápido da temperatura dos grãos

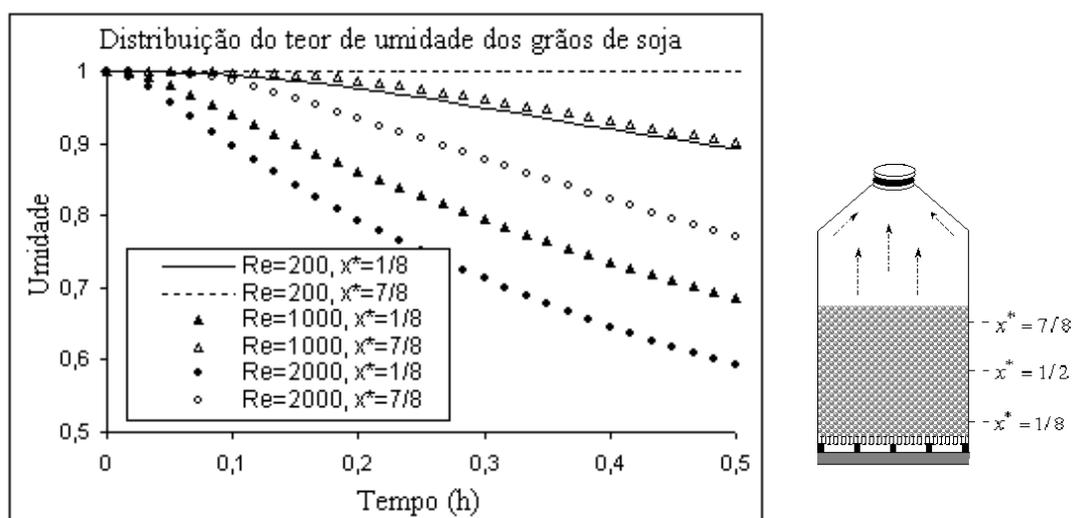


Figura 4.26: Influência do número de Reynolds na distribuição da umidade dos grãos ao longo do tempo, $Re = 200$ a 2000 .

e, como consequência, um decréscimo mais acentuado do teor de umidade dos grãos. Isso se justifica uma vez que esse parâmetro é inversamente proporcional à variação de temperatura envolvida no processo. Os valores baixos do número de Eckert, usados nesta simulação, refletem as situações reais do problema, uma vez que se considera situações em que temos grandes gradientes de temperatura e velocidade do ar de secagem relativamente baixa.

A influência do número de Schmidt no processo de transferência de calor e massa é avaliada na figura 4.28, que mostra a distribuição do teor de umidade dos grãos de soja em duas posições da câmara de secagem para valores do parâmetro na faixa $Sc = 0,7$ a $Sc = 2,0$. Observe que a influência desse parâmetro não é significativa no processo de secagem dos grãos. O mesmo ocorre com o número de Prandtl, que foi avaliado também na faixa $Pr = 0,7$ a $Pr = 2,0$, e sua variação não apresentou influências significativas no processo de secagem.

Após a exposição do problema, da obtenção das soluções e da apresentação dos resultados, estamos finalizando a presente tese com as principais conclusões, contribuições e com algumas sugestões para trabalhos futuros.

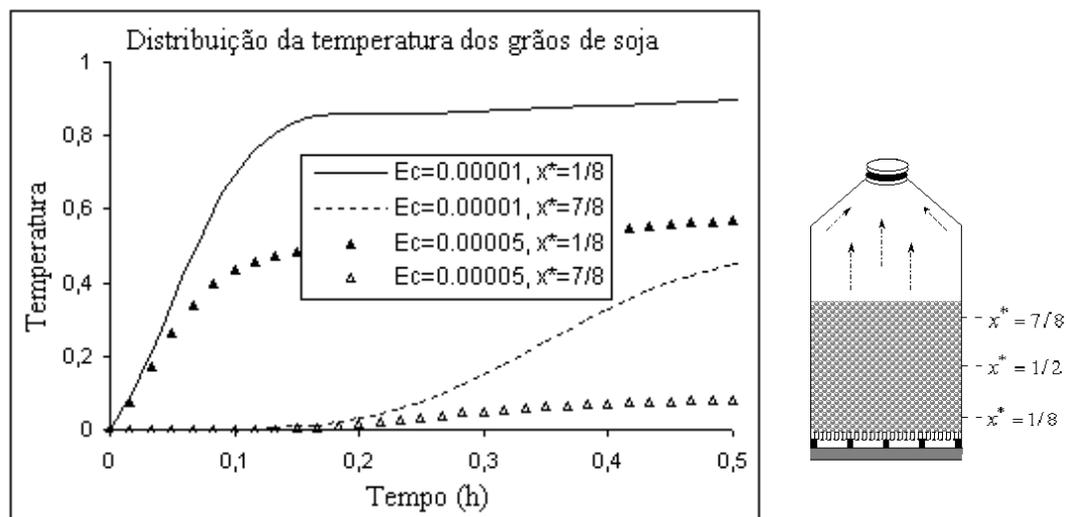


Figura 4.27: Influência do número de Eckert na distribuição da temperatura dos grãos ao longo do tempo, $Ec = 10^{-5}$ a 5×10^{-5} .

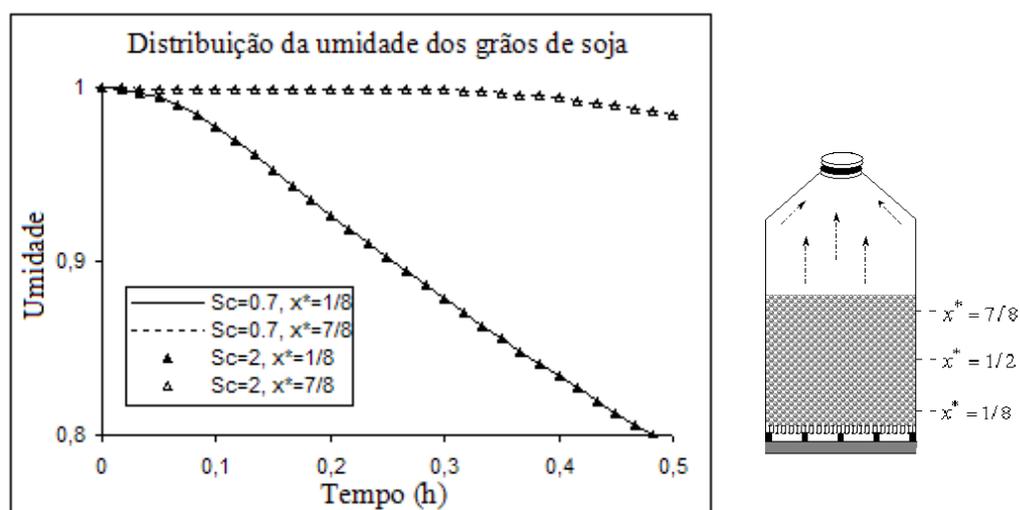


Figura 4.28: Influência do número de Schmidt na distribuição do teor de umidade dos grãos ao longo do tempo, $Sc = 0.7$ a 2.0

Capítulo 5

Conclusões e contribuições

A realização desta tese teve como finalidade o desenvolvimento de um modelo matemático para descrever o processo de transferência de calor e massa em meios granulares.

Apresentamos um modelo matemático para descrever esses processos baseado nas equações de Navier-Stokes. O modelo é composto por um conjunto de quatro equações diferenciais parciais para o caso unidimensional. Uma para o balanço de energia no ar, uma para o balanço de energia no grão, uma para o balanço de massa de água no ar e outra para o balanço de massa de água no grão. Os termos fonte da equação da energia e massa foram modelados obedecendo as leis físicas envolvidas no processo. As equações governantes do modelo foram demonstradas no trabalho.

Foi feita a adimensionalização das variáveis envolvidas no modelo e, conseqüentemente, obteve-se as equações governantes do mesmo na forma adimensional. As condições iniciais e de contorno do problema também foram estabelecidas.

Para o caso de mais de uma dimensão, a equação da continuidade, as equações da quantidade de movimento e a equação de Poisson para a pressão são utilizadas para descrever o movimento do ar ao redor dos grãos.

As equações do modelo foram resolvidas e os valores obtidos pelo modelo foram comparados com dados experimentais.

5.1 Contribuições do trabalho

Com a realização desta tese trouxemos algumas contribuições [63] [64] [65] [66] [67] [68] para um melhor entendimento dos processos de transferência de calor e massa, tais como:

- Desenvolvimento do modelo matemático que descreve os processos de transferência de calor e massa em meios granulares.
- Desenvolvimento de uma expressão para o coeficiente convectivo de transferência de massa entre o grão de soja e o ar (Eq.: 2.25), usando a analogia de Chilton-Colburn e a proporcionalidade dessa transferência com algumas grandezas envolvidas, como a temperatura, o teor de umidade de equilíbrio e instantânea do produto. As constantes de proporcionalidade e as potências de algumas grandezas foram ajustadas a partir de comparações com dados experimentais de secagem de grãos de soja.
- Verificação da ordem do esquema em relação ao tempo e ao espaço, além das regiões de estabilidade e de convergência do esquema.
- Obtenção de uma solução analítica para as principais equações envolvidas no modelo. Essa solução foi comparada com simulações numéricas para algumas funções teste para os termos fonte. Essas funções foram escolhidas de forma a se aproximar o máximo possível da situação real. Para a obtenção das soluções numéricas foram desenvolvidos códigos em Fortran 90 com a finalidade de resolver as equações de diferenças obtidas a partir da aplicação do esquema numérico. Verificou-se boa concordância entre as soluções analíticas e numéricas, ficando o erro máximo entre as duas na ordem de 10^{-4} para as situações avaliadas.
- Realização de simulações e comparações entre dados experimentais e valores obtidos numericamente pelo modelo. Essas comparações foram feitas para vários valores das grandezas envolvidas no processo, tais como a temperatura e a velocidade do ar na entrada da câmara de secagem, a temperatura do ar ambiente, o teor de umidade inicial do produto e a umidade relativa do ar

ambiente. Foram mostrados gráficos com comparações para as curvas da temperatura do ar, da temperatura dos grãos e do teor de umidade dos grãos para várias situações: secagem em leito profundo, secagem em camada fina e para o processo de secagem intermitente.

- Verificação de boa concordância entre os dados experimentais e os valores numéricos na maioria das simulações apresentadas, o que dá credibilidade ao modelo desenvolvido. A validação do modelo foi obtida para faixas de temperatura do ar de secagem maiores do que a maioria dos modelos encontrados na literatura. A faixa para a velocidade do ar em que o modelo foi avaliado também é bastante significativa.
- Realização de simulações para o caso bi-dimensional do processo de secagem de grãos. Verificou-se, neste caso, que próximo das paredes da câmara de secagem, a temperatura do ar e dos grãos cresce mais lentamente, retardando o processo de secagem nestas posições. Acreditamos que esta informação seja relevante no momento da elaboração de projetos de secadores.
- Avaliação da influência de alguns parâmetros adimensionais, concluindo-se que os números adimensionais de Reynolds e de Eckert são os que mais influenciam nos processos de transferência de calor e massa analisados.

Dessa forma, a tese contribui para o desenvolvimento científico numa área bastante complexa como os processos de transferência de calor e massa, mais especificamente no que se refere à secagem de grãos.

Sugerimos para trabalhos futuros a utilização do modelo no aprofundamento do estudo da secagem intermitente no caso em que não ocorre aeração forçada, mas apenas convecção natural; a obtenção do coeficiente convectivo de transferência de massa entre o grão e o ar para outros produtos; e o aproveitamento do modelo para descrever o resfriamento de reatores nucleares de pequeno porte [62][81][82].

Referências Bibliográficas

- [1] Aguerre, R. J., Suarez, C. *Diffusion of bound water in starchy materials: application to drying*. Journal of Food Engineering 64, pp. 389-395, 2004.
- [2] Ahrens, D. C., Villela, F. A. *Effects of intermittent drying on the physiological quality of blue lupine seeds*. Scientia Agricola 35(2-3), pp. 309-315, 1996.
- [3] Ahrens, D. C., Villela, F. A. *Secagem estacionária de sementes de trigo com utilização de gás liquefeito de petróleo*. Revista Brasileira de Sementes 27(2), pp.81-86, 2005.
- [4] Anderson, D. A., Tannehill, J. C., Pletcher, R. H. *Computational fluid mechanics and heat transfer*. McGraw-Hill, New York, 1984.
- [5] Asaithambi, A. *A shooting method for nonlinear heat transfer using automatic differentiation*. Applied Mathematics and Computation, 2006 (article in press).
- [6] Batchelor, G. K. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1967.
- [7] Bejan, A. *Convection heat transfer*. John Wiley Sons, 1984.
- [8] Bogaerts, P., Castillo, J., Hanus, R. *Analytical solution of the non-uniform heat exchange in a reactor cooling coil with constant fluid flow*. Mathematics and Computers in Simulation 43, pp.101-113, 1997.
- [9] Borges, P. A. P. *Modelagem dos Processos envolvidos nos sistemas de secagem e de armazenamento de grãos*. Tese de doutorado, PROMEC/UFRGS, 2002.

- [10] Boyce, D. S. *Grain moisture and temperature changes with position and time during through drying*. Journal Agricultural Engineering Research 10, pp. 33-41, 1965.
- [11] Boyce, D. S. *Heat and moisture transfer in ventilated grain*. Journal Agricultural Engineering Research 11, pp. 255-265, 1966.
- [12] Brooker, D. B., Bakker-Arkema, F. W., Hall, C. W. *The drying and storage of grains and oilseeds*. Van Nostrand Reinhold, Avi Book, New York, 1992.
- [13] Cai, R., Gou, C., Li, H. *Algebraically explicit analytical solutions of unsteady 3-D nonlinear non-Fourier (hyperbolic) heat conduction*. International Journal of Thermal Sciences, 2006 (article in press).
- [14] Carslaw, H. S., Jaeger, J. C. *Conduction of heat in solids*. Oxford: Clarendon, 1959.
- [15] Cavalcanti, M. E. R. M., Dantas, L. A., Braga, M. E. D. *Programa computacional para simulação de secagem de grãos*. Revista Brasileira de Produtos Agroindustriais 1 (1), p.33-50, 1999.
- [16] Cherniha, R. M. *New anzätze and exact solutions for nonlinear reaction-diffusion equations arising in mathematical biology*. Sym. Nonlinear Math. Phys. 1, pp. 138-146, 1997.
- [17] Colburn, A. P. *Heat transfer and pressure drop in empty, Baffled, and Packed tubes*. Industrial and Engineering Chemistry 23(8) 1931.
- [18] Chilton, T. H., Colburn, A. P. *Mass transfer (absorption) coefficients prediction from data on heat transfer and fluid friction*. Industrial and Engineering Chemistry 26, 1934.
- [19] Courtois, F., Lebert, A., Lasseran, J. C, Bimbenet, J. J. *Simulation of industrial dryers: solving numerical and computer problems*. Drying Technology 9(4) pp. 927-945, 1991.
- [20] Coddington, E. A., Levinson, N. *Theory of ordinary differential equations*. McGrawHill, 1955.

- [21] Crank, J. *The mathematics of diffusion*. Oxford: Clarendon, 1975.
- [22] Cunha, M. L., Canto, M. W., Marsaioli Jr., A. *Drying pulped coffee cherry beans by means of hot air and microwaves*. *Ciência e Tecnologia de Alimentos* 23(3), pp. 381-385, 2003.
- [23] Debnath, L. *Nonlinear partial differential equations for scientists and engineers*. Birkhäuser, 1997.
- [24] De Bortoli, A. L. *Introdução à dinâmica de fluidos computacional*. Ed. da Universidade/UFRGS, Porto Alegre, 2000.
- [25] Evans, L. C. *Partial differential equations*. American Mathematical Society, 1998.
- [26] Fregolente, L. V., Santos, O. A. A., Jorge, L. M. M. *Estimation of effective grain thermal properties in a fixed bed dryer*. *Ciência e Tecnologia de Alimentos* 24(2), pp.270-276, 2004.
- [27] Gastón, A. L., Abalone, R. M., Giner, S. A., Bruce, D. M. *Effect of modelling assumptions of the effective water diffusivity in wheat*. *Biosystems Engineering* 88(2), pp. 175-185, Postharvest Technology, 2004.
- [28] Gorguis, A. *A comparison between Cole-Hopf transformation and the decomposition method for solving Burgers' equations*. *Applied Mathematics and Computation* 173, pp. 126-136, 2006.
- [29] Hao, Y. L., Tao. Y. X. *Non-thermal equilibrium melting of granular packed bed in horizontal forced convection. Part I: experiment*. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 46, pp. 5017-5030, 2003.
- [30] Hirsch, C. *Numerical computation of internal and external flows*. Wiley series in numerical methods in engineering. John Wiley & Sons, 1992.
- [31] Incropera, F. P., DeWitt, D. P. *Fundamentals of heat and mass transfer*. John Wiley & Sons, 2002.
- [32] Keener, J. P. *Principles of Applied Mathematics*. Perscus Books, 2000.

- [33] Khatchatourian O., Borges P., Petry V.J. *Dinâmica de secagem de grãos de soja em câmara de leito fixo: modelo matemático e análise comparativa dos métodos numéricos de resolução*. MERCOFRIO, Porto Alegre, pp.01-10, 2000.
- [34] Khatchatourian O., Borges P., Petry V.J. *Mathematical model and numerical methods for the simulation of dynamics of drying of soy grains in camera of fixed bed*. Proceedings of LACAFLUM - V Latin American and Caribbean Congress on Fluid Mechanics, Caracas, pp.1-6, 2001.
- [35] Kreyszig, E. *Introductory functional analysis with applications*. John Wiley, New York, 1978.
- [36] Lasseran, J. C. *Experiências práticas sobre secagem-aeração*. Revista Brasileira de Armazenamento. 6(1), pp. 13-23, 1981.
- [37] Lasseran, J. C. *The drying of grains: principles, equipment, energy savings and fire safety*. Preservation and storage of grains, Lavoisier, Paris, pp. 606-663, 1988.
- [38] Laurindo, J. B., Prat, M. *Modeling of drying in capillary-porous media: A discrete Approach*. Drying technology 17, pp.1769-1787, 1998.
- [39] Lions, J. L., Dautray, R. *Mathematical analysis and numerical methods for science and technology*. V.6, Springer-Verlag, 2000.
- [40] Liu, Q., Bakker-Arquema, F. W. *A model-predictive controller of grain drying*. Journal of Food Engineering 49, pp. 321-326, 2001.
- [41] Liu, Q., Montross, M. D., Bakker-Arquema, F. W. *Stochastic modeling of grain drying. Part 1: experimental investigation*. Journal Agricultural Engineering Research 66, pp. 267-274, 1997.
- [42] Liu, Q., Bakker-Arquema, F. W. *Stochastic modeling of grain drying. Part 2: model development*. Journal Agricultural Engineering Research 66, pp. 275-280, 1997.
- [43] Liu, Q., Bakker-Arquema, F. W. *Stochastic modeling of grain drying. Part 3: analysis of crossflow drying*. Journal Agricultural Engineering Research 66, pp. 281-286, 1997.

- [44] Luikov, A. V. *Heat and mass transfer in capilar-porous bodies*. Pergamon, New York, 1966.
- [45] Ma, C. C., Chang, S. W. *Analytical exact solutions of heat conduction problems for anisotropic multi-layered media*. Journal of Heat and Mass Transfer 47, pp. 1643-1655, 2004.
- [46] Maliska, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. LTC, Rio de Janeiro, 1995.
- [47] Marini, L. J., Gutkoski, L. C., Elias, M. C., Mezzomo, N. *Effect of intermittent drying on oat grain stability*. Brazilian Journal of Food Technology 8(3), pp. 260-267 2005.
- [48] Marinos-Kouris, D., Maroulis, Z. B., Kiranoudis, C. T. *Modeling, simulation and desing of convective industrial dryers*. Drying Technology. 16 Issue 6, pp. 993-1026, 1998.
- [49] Marsaioli Jr., A. *Desenvolvimento da Tecnologia de Aplicação de Microondas em Secador Cilíndrico Rotativo Combinado com Ar Quente para Produtos Granulados*. Tese de Doutorado, DEA/FEA UNICAMP, 1991.
- [50] Meng, Q., Hu, W. *Roof cooling effect with humid porous medium*. Energy and Buildings 37, pp. 1-9, 2005.
- [51] Mhimid, A. N. *Heat and mass transfer during drying of granular products by combined convection and conduction*. Drying Technology. 17 Issue 6, pp. 1043-1063, 1999.
- [52] Mhimid, A. N., S. Ben, Forh, J. P. *Heat and mass transfer during drying of granular products - simulations with convective and conductive boundary conditions*. Journal of Heat and Mass Transfer 43, pp. 2779-2791, 2000.
- [53] Milosevic, N. D., Raynaud, M. *Analytical solutions of transient heat conduction in a two-layer anisotropic cylindrical slab excited superficially by a short laser pulse*. Journal of Heat and Mass Transfer 47, pp. 1627-1641, 2004.

- [54] Mitchell, A.R. *The finite difference method in partial differential equations*. Wiley, Chichester, 1980.
- [55] Morey, R. V., Cloud, H. A. *Simulation and evaluation of a multiple column crossflow grain dryer*. Transaction of the ASAE 16, pp.984-987, 1973.
- [56] Nellist, M. E. *Modeling the performance of a cross-flow grain dryer*. Journal Agricultural Engineering Research 37, pp.51-66, 1987.
- [57] Oliveira, L., Haghghi, K. *Conjugate heat and mass transfer in convective drying of multiparticle systems. Part I: Theoretical considerations*. Drying Technology. 17 Issue 3-5, pp. 433-461, 1998.
- [58] Oliveira, L., Haghghi, K. *Conjugate heat and mass transfer in convective drying of multiparticle systems. Part II: Soybean drying*. Drying Technology. 17 Issue 3-5, pp. 462-483, 1998.
- [59] Ozisik, M. N. *Finite difference methods in heat transfer*. Boca Raton, 1994.
- [60] Pamuk, S. *An application for linear and nonlinear heat equations by Adomian's decomposition method*. Applied Mathematics and Computation 163, pp. 89-96, 2005.
- [61] Parry, J. L. *Mathematical modeling and computer simulation of heat and mass transfer in agricultural grain drying*. Journal of Engineering Research 32 pp. 1-29, 1985.
- [62] Petry, V. J., De Bortoli, A. L., Sefidvash, F. *Passive cooling of a fixed bed nuclear reactor*. Lavoisier, Paris, pp. 305-308, 2005.
- [63] Petry, V. J., De Bortoli, A. L., Khatchatourian O. *Development of a mathematical model for heat and mass transfer inside a granular medium*. Computational Methods in Engineering and Science - EPMESC X, Press & Springer-Verlag, Sanya, Hainan, China, pp. 649-655, 2006.
- [64] Petry, V. J., De Bortoli, A. L., Khatchatourian O. *Mathematical model for heat and mass transfer inside a granular medium*. Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering, Belém, PA, Brazil, pp. 01-09, 2006.

- [65] Petry, V. J., De Bortoli, A. L., Khatchatourian O. *Validation of a mathematical model for heat and mass transfer inside a granular medium*. (trabalho submetido à revista: "International Journal of Heat and Mass Transfer").
- [66] Petry, V. J., De Bortoli, A. L., Khatchatourian O. *Passive cooling of a granular medium inside a cylindrical chamber*. Seventh International Meeting on High Performance Computing for Computational Science - VECPAR'06, Rio de Janeiro, pp. 1-11, 2006.
- [67] Petry, V. J., De Bortoli, A. L., Khatchatourian O. *A mathematical model for heat and mass transfer of a granular medium inside a fixed bed reactor*. Anais do 64º Seminário de Análise - SBA, pp. 1-08, 2006.
- [68] Petry, V. J., De Bortoli, A. L., Khatchatourian O. *Two-dimensional mathematical model of heat and mass transfer in the grains drying process*.(trabalho submetido ao "19th International Congress of Mechanical Engineering 2007").
- [69] Polyanin, A, D. *Handbook of linear and partial differential equations for engineers and scientists*. Chapman Hall/CRC, 2002.
- [70] Polyanin, A, D. *Exact solutions of nonlinear sets of equations of the theory of heat and mass transfer in reactive media and mathematical biology*. Theoretical Foundations of Chemical Engineering 38(6), pp. 622-635, 2004.
- [71] Prachayawarakorn, S., Poomsa-ad, N., Soponronnarit, S. *Quality maintenance and economy with high-temperature paddy-drying processes*. Journal of Stored Products Research 41, pp. 333-351, 2005.
- [72] Puzzi, D. *Conservação dos grãos armazenados*. Agronômica Ceres, São Paulo, 1973.
- [73] Reda, G. A. R. *Propagation of boundary of inhomogeneous heat conduction equation*. Applied Mathematics and Computation 141, pp. 231-239, 2003.
- [74] Reed, M., Simon, B. *Methods of modern mathematical physics*, vol. 1: Functional analysis. Academic Press, New York, 1972.

- [75] Reis, J. A. dos, Carrocci, L. R. *Análise de modelos de sistemas de secagem*. MERCOFRIO, Porto Alegre, 1998.
- [76] Resio, A. N. C., Aguerre, R. J., Suarez, C. *Drying characteristics of amaranth grain*. Journal of Food Engineering 65, pp. 197-203, 2004.
- [77] Ribeiro, D. M., Corrêa, P. C., Rodrigues, D. H., Goneli, A. L. D. *Analysis of physical properties variation of soy grains during the drying process*. Ciência e Tecnologia de Alimentos 25(3), pp. 611-617, 2005.
- [78] Richtmayer, R. D. *Difference methods for initial value problems*. Interscience Publishers, New YORK, 1957.
- [79] Rumsey, T. R., Rovedo, C. O. *Two-dimensional simulation model for dynamic cross-flow rice drying*. Chemical Engineering and Processing 40, pp. 355-362, 2001.
- [80] Sarat W., Sakamon D. *Drying kinetics and quality of soy residue (okara) dried in a jet spouted-bed dryer*. Drying Technology 23(6), pp. 1229-1242, 2005.
- [81] Sefidvash, F. *Preliminary evaluation of the fixed and fluidized bed nuclear reactor concept using the IAEA-INPRO methodology*. Kerntechnik, pp. 01-06, 2004.
- [82] Sefidvash, F., Mohamad A. A. *Passive cooling characteristics of the fluidized bed nuclear reactor*. First International Conference on Applications of Porous Media, Jerba, Tunisia, 2002.
- [83] Sissom, L. E., Pitts, D. R. *Elements of transport phenomena*. McGraw-Hill, 1972.
- [84] Sod, G. A. *A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws*. Journal of Computational Physics 27, pp. 1-31, 1978.
- [85] Sod, G. A. *Numerical methods in fluid dynamics: initial and initial boundary-value problems*. Cambridge University, 1985.
- [86] Srivastava, V.K., John, J. *Deep bed grain drying modelling*. Energy Conversion and Management 43, pp.1689-1708, 2002.

- [87] Strikwerda, J. C. *Finite difference schemes and partial differential equations*. Chapman Hall, New York, 1989.
- [88] Thomas, J. W. *Numerical partial differential equations - Finite difference*. Springer-Verlag, 1995.
- [89] Tirawanichakul, Y., Prachayawarakorn, S. Varayanond, W., Soponronnarit, S. *Simulation and grain quality for in-store drying of paddy*. Journal of Food Engineering 64, pp. 405-415, 2004.
- [90] Toniazzo, N. A., Khatchatourian O., Borges P. *Estudo teórico/experimental e simulação numérica do escoamento do ar em silos*. MERCOFRIO, Porto Alegre, pp. 01-06, 1998.
- [91] Toniazzo, N. A., Khatchatourian O., Borges P. *Modelagem matemática do processo de secagem de soja: ar e grão em fluxos contrários*. INCIT, Porto Alegre, 2000.
- [92] Weber, P. E. *Dinâmica do processo de secagem de grãos de soja em camada espessa: simulação numérica e estudo experimental*. Dissertação de mestrado, DEFEM/UNIJUÍ, 2001.
- [93] Weber, P. E., Khatchatourian O., Borges P. *Simulação numérica do processo de secagem de soja em secador de fluxo contínuo*. In. Proceedings of the 16th Brazilian Congress of Mechanical Engineering - COBEM. vol. 9, Uberlândia, pp. 300-307, 2001.
- [94] Yefimova, O. Y., Kudryashov, N. A. *Exact solution of the Burgers-Huxley equation*. J. Appl. Maths Mechs 68, pp. 413-420, 2004.
- [95] Yosida, K. *Functional analysis*. Academic Press, Springer Verlag, 1966.
- [96] Zeidler, E. *Nonlinear functional analysis and its applications*. Springer-Verlag, 1990.
- [97] Zhihuai, M. Chonwen, C. *Simulation and optimization of cross flow grain dryers*. Drying Technology. 17(9), pp. 1767-1777, 1999.