

GISELE TESSARI SANTOS

**APLICAÇÃO DA TERMODINÂMICA DE PROCESSOS IRREVERSÍVEIS À
ANÁLISE DE SECAGEM E DETERMINAÇÃO DE PROPRIEDADES
TÉRMICAS DE MATERIAIS POROSOS, POR MEIO DE FUNÇÕES DE
BASE RADIAL**

Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Agrícola, para obtenção do título de *Doctor Scientiae*.

VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL
2012

**Ficha catalográfica preparada pela Seção de Catalogação e
Classificação da Biblioteca Central da UFV**

T

S237a
2012

Santos, Gisele Tessari, 1982-
Aplicação de termodinâmica de processos irreversíveis à
análise de secagem e determinação de propriedades térmicas
de materiais porosos, por meio de funções de base radial /
Gisele Tessari Santos. – Viçosa, MG, 2012.
xix, 117f. : il. (algumas col.) ; 29cm.

Orientador: José Helvecio Martins.
Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa.
Inclui bibliografia.

1. Grãos - Secagem - Modelos matemáticos.
2. Termodinâmica. 3. Processos irreversíveis. I. Universidade
Federal de Viçosa. II. Título.

CDD 22. ed. 631.586

GISELE TESSARI SANTOS

**APLICAÇÃO DA TERMODINÂMICA DE PROCESSOS IRREVERSÍVEIS À
ANÁLISE DE SECAGEM E DETERMINAÇÃO DE PROPRIEDADES
TÉRMICAS DE MATERIAIS POROSOS, POR MEIO DE FUNÇÕES DE
BASE RADIAL**

Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Agrícola, para obtenção do título de *Doctor Scientiae*.

APROVADA: 29 de fevereiro de 2012.

Mauri Fortes
(Coorientador)

Wanyr Romero Ferreira

Sávio Augusto Lopes da Silva

Jadir Nogueira da Silva

José Helvecio Martins
(Orientador)

“... a mente que se abre a uma nova idéia...
... jamais voltará ao seu tamanho original...”

Albert Einstein

AGRADECIMENTOS

Registro, aqui, meus agradecimentos às pessoas que me apoiaram neste processo de aprendizado e contribuíram para a concretização deste trabalho.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. José Helvecio Martins, pela oportunidade, confiança e orientação durante todo o curso.

Agradeço, especialmente, ao amigo, professor e orientador Dr. Mauri Fortes pela enorme dedicação, pelo exemplo de pesquisa de qualidade e pelos ensinamentos essenciais à minha formação acadêmica.

À minha família, em especial aos meus queridos pais e ao meu querido irmão, pelo incentivo, amor incondicional e por sempre estarem presentes e acreditarem em mim.

Ao meu marido, André, sempre ao meu lado, pelo amor, carinho e incentivo nos momentos mais difíceis.

Aos meus amigos e colegas de doutorado, em especial ao amigo e sócio, Rafael Amantéa, pela amizade e companheirismo em todos os momentos.

Aos amigos que fiz em Viçosa, que me acompanharam durante todo este período e que estarão sempre ao meu lado.

Ao IETEC por confiar em meu trabalho e pelo apoio durante estes últimos anos.

À Consciente por me dar a oportunidade de vivenciar o lado prático da engenharia.

Aos professores do Departamento de Engenharia Agrícola da Universidade Federal de Viçosa pelos conhecimentos transmitidos nas disciplinas cursadas.

Ao CNPq pela bolsa concedida, que foi fundamental para a realização deste trabalho.

SUMÁRIO

<i>LISTA DE FIGURAS</i>	viii
<i>LISTA DE TABELAS</i>	xi
<i>LISTA DE SÍMBOLOS</i>	xii
<i>RESUMO</i>	xv
<i>ABSTRACT</i>	xviii
<i>INTRODUÇÃO GERAL</i>	1
<i>CAPÍTULO 1</i>	3
APLICAÇÃO DO MÉTODO DE FUNÇÃO DE BASE RADIAL A PROBLEMAS UNIDIMENSIONAIS DE DISPERSÃO DE CONTAMINANTE EM SOLO NÃO SATURADO	3
RESUMO	3
ABSTRACT	4
1.1. INTRODUÇÃO	5
1.2. METODOLOGIA	7
1.2.1. Modelo Físico-Matemático de Transporte de Solutos em Solos	7
1.2.2. Metodologia Numérica.....	11
1.2.2.1. Método de Funções de Base Radial Clássico	11
1.2.2.2. Método de Funções de Base Radial Modificado	14
1.2.3. Problemas Exemplos.....	15
1.3. RESULTADOS E DISCUSSÃO	17

1.3.1. Infiltração de Água em Solo não Saturado com Presença de Solute com Valores de Concentração Prescritos	17
1.3.2. Infiltração de Água em Solo não Saturado com Presença de Solute com Fluxo de Água Prescrito	19
1.4. CONCLUSÕES	22
1.5. REFERÊNCIAS	22
<i>CAPÍTULO 2</i>	27
ANÁLISE POR TERMODINÂMICA IRREVERSÍVEL DE SECAGEM DE UM ÚNICO GRÃO DE TRIGO: MODELAGEM E SIMULAÇÃO DOS FENÔMENOS FÍSICOS INERENTES.....	27
RESUMO	27
ABSTRACT	28
2.1. INTRODUÇÃO	29
2.2. METODOLOGIA	34
2.2.1. Modelo Físico-Matemático de Secagem em Camada Fina.....	34
2.2.2. Metodologia Numérica.....	40
2.2.2.1. Método de Funções de Base Radial Clássico	40
2.2.2.2. Método de Funções de Base Radial Modificado	44
2.2.2.3. O Método adaptativo no tempo para solução de equações diferenciais parciais (EDP) e ordinárias (EDO).....	48
2.3. RESULTADOS E DISCUSSÕES	52
2.3.1. Simulação de secagem de grãos de trigo utilizando coordenadas esféricas e condição de contorno de Dirichlet	54
2.3.2. Simulação de secagem de grãos de trigo, utilizando coordenadas esféricas e condição de contorno de convecção.....	57

2.3.3. Simulação de secagem de grãos de trigo, utilizando coordenadas cilíndricas e condição de contorno de convecção.....	64
2.3.4. Discussão sobre o quadro global da modelagem teórica do processo de secagem	68
2.4. CONCLUSÕES	72
2.5. REFERÊNCIAS	73
<i>CAPÍTULO 3.....</i>	80
EFEITO DA FORMA DO GRÃO DE TRIGO NA AVALIAÇÃO DAS PROPRIEDADES FENOMENOLÓGICAS RELACIONADAS À SECAGEM: UMA ABORDAGEM DA TERMODINÂMICA DE PROCESSOS IRREVERSÍVEIS	80
RESUMO	80
ABSTRACT	81
3.1. INTRODUÇÃO	82
3.2. METODOLOGIA	88
3.2.1. Modelo Físico-Matemático de Secagem em Camada Fina.....	88
3.2.2. Metodologia Numérica.....	93
3.2.2.1. Método de Funções de Base Radial Clássico	93
3.2.2.2. Método de Funções de Base Radial Modificado	98
3.3. RESULTADOS E DISCUSSÕES	100
3.3.1. Simulação de secagem de grãos de trigo utilizando coordenadas cilíndricas e condição de contorno de convecção.....	102
3.3.2. Discussão sobre o quadro global da modelagem teórica do processo de secagem	106
3.4. CONCLUSÕES	110

3.5. REFERÊNCIAS	111
-------------------------------	------------

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1.1. Perfil espacial-temporal da carga de pressão em solo obtido pelo método proposto e pelo programa HYDRUS para o primeiro exemplo (condições de contorno de Dirichlet para as equações de Richards e de transporte de soluto). 18
- Figura 1.2. Perfil espacial-temporal da concentração de soluto em solo obtido pelo método proposto e pelo programa HYDRUS para o primeiro exemplo (condições de contorno de Dirichlet para as equações de Richards e de transporte de soluto). 18
- Figura 1.3. Perfil espacial-temporal da carga de pressão em solo obtido pelo método proposto e pelo programa HYDRUS para o segundo exemplo (condição de contorno de fluxo $q_0(t) = -0,1 \text{ m} \cdot \text{h}^{-1}$ para a equação de Richards). 19
- Figura 1.4. Perfil espacial-temporal do conteúdo volumétrico de água em solo obtido pelo método proposto e pelo programa HYDRUS para o segundo exemplo (condição de contorno de fluxo $q_0(t) = -0,1 \text{ m} \cdot \text{h}^{-1}$ para a equação de Richards). 20
- Figura 1.5. Perfil espacial-temporal da concentração de soluto em solo obtido pelo método proposto e pelo programa HYDRUS para o segundo exemplo (condição de contorno de fluxo $q_0(t) = -0,1 \text{ m} \cdot \text{h}^{-1}$ para a equação de Richards). 21
- Figura 1.6. Perfil espacial-temporal do fluxo de água em solo obtido pelo método proposto e pelo programa HYDRUS para o segundo exemplo (condição de contorno de fluxo $q_0(t) = -0,1 \text{ m} \cdot \text{h}^{-1}$ para a equação de Richards). 21
- Figura 2.1. Distribuição normalizada dos pontos nodais utilizados para discretização do grão de trigo com formato esférico. 53
- Figura 2.2. Comparação entre as curvas de secagem preditas (linhas contínuas) e respectivos dados experimentais (em pontos discretos): Soluções numéricas com condição de contorno de Dirichlet e coordenadas esféricas. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2. 55
- Figura 2.3. Fluxos de massa preditos na superfície do grão à temperatura de secagem de $26,7^\circ\text{C}$: Soluções numéricas com condição de contorno de Dirichlet e coordenadas esféricas. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2. 56
- Figura 2.4. Fluxos de massa preditos na superfície do grão à temperatura de secagem de $67,5^\circ\text{C}$: Soluções numéricas com condição de contorno de Dirichlet e coordenadas esféricas. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2. 56
- Figura 2.5. Comparação entre as curvas de secagem preditas (linhas contínuas) e respectivos dados experimentais (em pontos discretos): Soluções numéricas com

condição de contorno de convecção e coordenadas esféricas. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.....	57
Figura 2.6. Temperatura predita no centro do grão de trigo considerando condição de contorno de convecção. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.	59
Figura 2.7. Distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo a 26,7°C. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.	60
Figura 2.8. Distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo a 47°C. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.	60
Figura 2.9. Distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo a 67,5°C. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.	61
Figura 2.10. Distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo a 87,8°C. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.	61
Figura 2.11. Fluxos de massa preditos na superfície do grão à temperatura de secagem de 26,7°C e condição de contorno de convecção. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.	63
Figura 2.12. Fluxos de massa preditos na superfície do grão à temperatura de secagem de 67,5°C e condição de contorno de convecção. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.	63
Figura 2.13. Comparação entre as curvas de secagem preditas (linhas contínuas) e respectivos dados experimentais (em pontos discretos): Soluções numéricas com condição de contorno de convecção e coordenadas cilíndricas. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.....	64
Figura 2.14. Distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo a 26,7°C. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.	65
Figura 2.15. Distribuição da temperatura (°C) predita dentro do grão de trigo a 26,7°C e tempo de secagem de 50s. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.....	66
Figura 2.16. Distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo a 87,8°C. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.	67
Figura 2.17. Distribuição da temperatura (°C) predita dentro do grão de trigo a 87,8°C e tempo de secagem de 50s. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.....	68
Figura 2.18. Grão de trigo (Fonte:Encyclopaedia Britannica, http://www.britannica.com)	70

Figura 3.1. Distribuição normalizada dos pontos nodais utilizados para discretização do grão de trigo com formato esférico e de elipsóide prolato.....	102
Figura 3.2. Comparação entre as curvas de secagem preditas (linhas contínuas) e respectivos dados experimentais (em pontos discretos - triângulos): Soluções numéricas com condição de contorno de convecção e coordenadas cilíndricas.....	103
Figura 3.3. Distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo com formato de elipsóide prolato com excentricidade 2 e 2,5, e esférico a 47°C.....	105
Figura 3.4. Distribuição da temperatura (°C) predita dentro do grão de trigo com formato de elipsóide prolato com excentricidade 2 e 2,5, e esférico a 47°C e tempo de secagem de 50s.....	106
Figura 3.5 Grão de trigo (Fonte: Encyclopaedia Britannica, http://www.britannica.com).	109

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1. Propriedades Físicas dos Grãos de Trigo	38
Tabela 2.2. Condições experimentais de Secagem	39
Tabela 2.3. Coeficientes obtidos a partir de simulações com condição de contorno de Dirichlet e coordenadas esféricas.....	52
Tabela 2.4. Coeficientes obtidos a partir das simulações com condições de contorno de convecção e coordenadas esféricas e cilíndricas.....	52
Tabela 2.5. Diferenças entre modelos de secagem ao se usarem coordenadas esféricas e condições de contorno de Convecção e de Dirichlet.....	58
Tabela 2.6. Acurácia dos modelos de secagem deste trabalho	71
Tabela 3.1. Propriedades Físicas dos Grãos de Trigo	92
Tabela 3.2. Coeficientes obtidos a partir de simulações com condição de contorno de convecção e coordenadas cilíndricas	101
Tabela 3.3. Acurácia dos modelos de secagem deste trabalho	110

LISTA DE SÍMBOLOS

CAPÍTULO 1

c	concentração de soluto na fase líquida [$\text{mmol}\cdot\text{m}^{-3}$], Equação (7) ou parâmetro de forma de funções de base radial, Equação (14)
D	coeficiente de dispersão da fase líquida [$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$]
D_L	dispersividade longitudinal [m]
D_w	coeficiente de difusão molecular em água livre [$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$]
h	carga de pressão da água [m]
K	função da condutividade hidráulica não saturada [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
K_s	condutividade hidráulica saturada [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
K_r	condutividade hidráulica relativa, adimensional
L	profundidade do solo [m]
m	parâmetro empírico ($m = 1 - \frac{1}{n}$, com $n > 1$), adimensional
n	parâmetro empírico ou enésimo plano de tempo, adimensional
N	número total de malhas
N_t	número total de passos de tempo
q	fluxo volumétrico [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]
r	norma euclidiana ($r_j = \ x - x_j\ $)
S	termo fonte [$\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$]
t	tempo [s]
x	vetor coordenada espacial ou vetor espacial do método de funções de base radial

Símbolos Gregos

α	ângulo (em graus) entre a direção do fluxo e do eixo vertical
θ	conteúdo volumétrico de água no solo [$\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$]
θ_r	teor residual de água no solo [$\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$]
θ_s	teor de água no solo saturado [$\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$]
γ	parâmetro empírico, adimensional
λ	coeficientes da função de aproximação usada pelo método RBF
τ	fator de tortuosidade do solo na fase líquida, adimensional
\square	função de base radial
Θ	valor que define o método de integração temporal, Equação (17)
Δx	espaçamento entre pontos
Δt	passo de tempo

Subscritos

0	ponto na superfície do solo
L	cota inferior no solo
i	estado inicial

CAPÍTULOS 2 e 3

A	área da superfície de um único grão de trigo [m ²]
a	semieixo principal maior do elipsoide [m]
b	semieixo principal menor do elipsoide [m]
c	calor específico [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹] ou parâmetro de forma de funções de base radial, Equação (17)
D _{atm}	coeficiente de difusão molecular do vapor d'água no ar [m ² .s ⁻¹]
D _p	diâmetro equivalente [m]
h _T	coeficiente de transferência de calor [W.m ² .K ⁻¹]
h _m	coeficiente de transferência de massa [s.m ⁻¹]
h _m *	fator de ajuste do coeficiente de transferência de massa, adimensional
H	umidade relativa no interior do produto, decimal
J _l	fluxo de líquido [kg.m ⁻² .s ⁻¹]
J _q	fluxo de calor [J.m ⁻² .s ⁻¹]
J _v	fluxo de vapor [kg.m ⁻² .s ⁻¹]
K _l	condutividade de líquido [s]
K _v	condutividade de vapor [m ² .s ⁻¹]
K _T	condutividade térmica [W.m ⁻¹ .K ⁻¹]
K _{ar}	condutividade térmica do ar [W.m ⁻¹ .K ⁻¹]
k _l *	fator de ajuste da condutividade de líquido, adimensional
k _v *	fator de ajuste da condutividade de vapor, adimensional
L _v	calor de vaporização da água no grão de trigo [J.kg ⁻¹]
L _w	calor diferencial específico da água no grão [J.kg ⁻¹]
L ₀	calor de vaporização da água livre [J.kg ⁻¹]
M	teor de água, base seca
\bar{M}	teor médio de água, base seca
n	enésimo plano de tempo
r	raio [m] ou coordenada radial ou norma euclidiana
R	raio [m]
rh	umidade relativa do ar de secagem
R _v	constante universal do gás aplicada ao vapor [J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
t	tempo [s]
T	temperatura termodinâmica [K], em todas as equações
V	volume [m ³]
v	velocidade [m.s ⁻¹]
x	vetor coordenada espacial ou norma euclidiana
∇	operador nabla = $\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$

Símbolos Gregos

μ	viscosidade cinemática [kg.m ⁻¹ .s ⁻¹]
ρ	massa específica [kg.m ⁻³]
□	função de base radial
λ	coeficientes da função de aproximação usada pelo método RBF
Θ	valor que define o método de integração temporal, Equação (20)

Δt passo de tempo

Subscritos

a meio ambiente (ar úmido)
b corpo
e equilíbrio
l fase líquida
M características de transferência de massa
R em $r = R$ (superfície)
s sólido ou superfície
T características de transferência de calor
v fase de vapor
0 estado inicial ou de saturação

Parâmetros adimensionais

Re = $\rho_a \cdot v \cdot D_p / \mu_a$, número de Reynolds

Pr = $c_p \cdot \mu_a / K_{ar}$, número de Prandtl

SC = $\mu_a / (\rho_a \cdot D_{atm})$, número de Schmidt

RESUMO

SANTOS, Gisele Tessari, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2012. **Aplicação da termodinâmica de processos irreversíveis à análise de secagem e determinação de propriedades térmicas de materiais porosos, por meio de funções de base radial.** Orientador: José Helvecio Martins. Coorientadores: Mauri Fortes e Paulo Marcos de Barros Monteiro.

Este trabalho é composto por três seções. As duas últimas seções estão relacionadas à análise do processo de secagem de um grão de trigo. A primeira seção apresentou uma nova técnica numérica para resolver problemas transientes de dispersão de contaminantes em solos não saturados. O esquema numérico serviu como base para resolver as complexas equações de secagem. Grãos cereais são úteis para a humanidade e naturalmente complexos. Eles são anisotrópicos, termos-sensíveis e biologicamente degradáveis sob variações psicrométricas adversas. A secagem adequada pode minimizar o ataque de insetos, o crescimento de fungos, deterioração da qualidade e efeitos indesejáveis das condições ambientais. O número de variáveis que definem a secagem de grãos é grande e inclui, entre outras, propriedades termofísicas do produto, forma, composição biológica e comportamentos do teor de água e térmico, grau de anisotropia, uso final e custo. A segunda seção deste trabalho teve como objetivo analisar a secagem de um grão de trigo a fim de saber sobre seu comportamento sob diversas condições ambientais para um eventual controle refinado das condições de secagem. Nesta direção, um modelo de termodinâmica de processos irreversíveis composto de um sistema de duas equações diferenciais parciais não-lineares, com a temperatura e o teor de água de equilíbrio como variáveis dependentes, foi resolvido. O método de solução numérica consistiu de uma forma modificada do esquema de funções de base radial cúbica. Resolveu-se o modelo em coordenadas esféricas e coordenadas cilíndricas, com condições de contorno convectivas. Soluções com condições de contorno de Dirichlet e coordenadas esféricas também foram investigadas e comparadas com as outras soluções. Os resultados mostraram excelente acurácia dos modelos propostos, apontando que o uso de condições de contorno de Dirichlet pode levar a altos gradientes hídricos e térmicos na superfície. Apresentou-se uma breve análise a

respeito do efeito de forma e anisotropia sobre o modelo esférico isotrópico proposto. Apresentaram-se e discutiram-se, em detalhes, resultados gráficos completos para quatro diferentes condições de secagem. A terceira parte deste estudo consistiu da análise da secagem de um grão de trigo com formatos de elipsóide prolato e de esfera a fim de melhor definir o modelo apropriado para simular o processo de secagem e permitir eventual projeto de secadores com minimização de danos causados pelos stresses hídricos e térmicos. Assim como na segunda seção deste trabalho, utilizou-se, para simular a secagem de trigo, um modelo embasado na termodinâmica de processos irreversíveis composto de um sistema de duas equações diferenciais parciais não lineares. O esquema de solução numérica consistiu de uma forma modificada do método de funções de base radial cúbica, utilizado para resolver o modelo em coordenadas cilíndricas, com condições de contorno convectivas. Os coeficientes obtidos incluem os coeficientes de transporte de líquido, vapor e de convecção de massa. Os resultados compararam-se, favoravelmente, com os resultados simulados e com os dados experimentais de Fortes et al. (1981a). Apresentou-se também uma breve discussão a respeito do efeito de forma e anisotropia na modelagem de secagem. Apresentaram-se os resultados para a condição de secagem especificada pela temperatura de bulbo seco de 47,0°C, umidade relativa de 33,8%, teor de água inicial do grão de trigo de 0,211 (base seca) e velocidade do ar de 1,5 m/s. Como dito anteriormente, a primeira seção deste trabalho serviu como base para o estudo do modelo de secagem de camada fina por meio da abordagem proposta por Fortes e Okos (1981). A principal motivação foi o fato de se disporem de soluções numéricas *benchmark* para o problema analisado de poluição de solos. Apresentou-se, então, o método de funções de base radial (FBR) com uma modificação no tratamento do processo de integração como uma ferramenta para resolver as equações de dispersão de contaminantes. Compararam-se sua precisão com a solução de referência obtida por meio da versão unidimensional do programa comercial HYDRUS. Os resultados mostraram que o método de FBR proposto é uma opção adequada para resolver problemas dominados pela advecção e problemas de transporte de solutos em solos. A solução obtida por meio do HYDRUS apresentou dispersão numérica para a concentração de soluto, enquanto o esquema de FBR modificado levou a soluções sem dispersão ou falsa difusão. O

método apresentou-se, portanto, como uma opção para obtenção de soluções precisas.

ABSTRACT

SANTOS, Gisele Tessari, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, February, 2012. **Irreversible thermodynamic analyses of drying and evaluation of porous media thermal properties through the radial basis functions method.** Adviser: José Helvecio Martins. Co-advisers: Mauri Fortes and Paulo Marcos de Barros Monteiro.

This work consists of three sections. The last two sections are related to the drying process analysis of wheat kernel. The first section presented a new numerical technique for solving transient problems of dispersion of contaminants in unsaturated soils. The numerical scheme served as basis for solving the complex drying equation. Cereal grains are useful to mankind and naturally complex. They are anisotropic, thermosensitive, biologically degradable under adverse psychrometric variations. Proper drying can minimize insect attack, mold growth, quality decay and undesired effects of environmental conditions. The number of variables that define grain drying is long and include, among others, product thermophysical properties, shape, biological composition and thermal and moisture content behavior, degree of anisotropy, end use and cost. The second section of this work aimed at analyzing wheat kernel drying as a means to know about its behavior under several environmental conditions for an eventual fine control of drying conditions. In this direction, an irreversible thermodynamics model composed of a system of two nonlinear partial differential equations, with temperature and equilibrium moisture content as dependent variables was solved. The numerical solution method consisted of a modified form of cubic radial basis functions scheme. The model was solved in spherical and cylindrical coordinates, with convective boundary conditions. Solutions with Dirichlet boundary conditions and spherical coordinates were also investigated and compared with the other solutions. The results showed excellent accuracy of the proposed models, pointing out that the use of Dirichlet boundary conditions may lead to high surface thermal and hydro gradients. A brief analysis is presented on the effect of shape and anisotropy on the proposed spherical isotropic model. Full graphical results for four different drying conditions are presented and discussed in detail. The third part of this study consisted of analysis of a wheat kernel with prolate ellipsoidal and spherical shapes in order to better define the appropriate

model to simulate the drying process and allow eventual dryer project with minimization of thermal and hydro stress damage. As in the second section of this work, was used a model grounded on thermodynamics of irreversible processes consisting of a system of two nonlinear partial differential equations. The numerical solution scheme consisted of a modified form of the cubic radial basis functions, used to solve the model in cylindrical coordinates, with convective boundary conditions. The obtained coefficients included the transport coefficients of liquid, vapor and mass convection. The results compared favorably with experimental data and simulated results from Fortes et al. (1981). We present a brief discussion on the effect of shape and anisotropy on drying modeling. Results are presented for the drying condition specified by the air dry bulb temperature of 47.0°C, relative humidity of 33.8%, wheat kernel initial moisture content of 0.211 (dry basis) and air velocity of 1.5 m/s. As previously stated, the first section of this work was the basis for the study of thin layer drying model by means of the approach proposed by Fortes and Okos (1981). The main motivation was the fact that there are benchmark numerical solutions available to the soil pollution problem analyzed. This part presents, then, the method of radial basis functions (RBF) with a change in the treatment of the integration process as a tool to solve equations of advection or dispersion of contaminants. Its accuracy is compared against benchmark solutions obtained from the one-dimensional version of the commercial software HYDRUS. The results show that the proposed RBF method is a suitable option to solve problems dominated by advection and solute transport in soils. The solution obtained by means of HYDRUS introduces numerical dispersion into the results of the solute problem, while the modified RBF scheme does not lead to dispersion, scattering or false diffusion. The method has, therefore, proved itself to be an option for obtaining accurate solutions.

INTRODUÇÃO GERAL

Esse trabalho consiste em três capítulos. O primeiro capítulo serviu como base para o estudo do modelo de secagem de camada fina por meio da abordagem proposta por Fortes e Okos (1981a), de igual nível de complexidade. A principal motivação foi o fato de se disporem de soluções numéricas *benchmark* para o problema analisado de poluição de solos.

Assim, o primeiro capítulo versa sobre um modelo utilizado na análise de escoamento insaturado de água e de contaminação de águas subterrâneas; as partes componentes desse modelo são de equações diferenciais parciais não lineares. Soluções analíticas para estes problemas são raras, uma vez que as propriedades relevantes de solos, principalmente a curva característica de água no solo e a condutividade hidráulica, são também não lineares. Apresenta-se, então, uma nova metodologia para solução do problema de Richards por meio do método de funções de base radial, com foco na função cúbica. A metodologia proposta permitiu analisar problemas transientes de dispersão de contaminantes em solos insaturados e os resultados compararam-se, favoravelmente, em termos de acurácia e a eficácia, com resultados *benchmark* obtidos por meio da versão unidimensional do programa comercial HYDRUS.

O segundo capítulo consistiu, primeiramente, da reavaliação do modelo do processo de secagem de camada fina utilizando a abordagem proposta por Fortes e Okos (1981a). Fortes et al. (1981a) aplicaram o seu modelo presumindo condições de contorno de Dirichlet devido à suposição de que a superfície dos grãos de trigo atingiu o teor de água de equilíbrio dentro de 3 a 5 min após o início da secagem. Esta hipótese pode ter causado uma super ou subestimação da condutividade do líquido e do vapor e perfil de temperatura e teor de água com declividades mais elevadas. Ainda neste capítulo, modelou-se e estudou-se por meio de soluções numéricas, em coordenadas esféricas e cilíndricas, o processo de secagem em camada fina do grão de trigo com formato esférico, fazendo uso do método de Funções de Base Radial (FBR) cúbica. Aplicou-se o modelo a toda a faixa de dados de secagem apresentados por Fortes et al. (1981). Implementou-se também um método simples e eficiente de solução adaptativa temporal de equações diferenciais parciais, aplicado, junto com a técnica de FBR para a solução dos problemas não

lineares. E, por último, compararam-se os resultados obtidos com os testes experimentais apresentados por Fortes et al. (1981) para validar os resultados da modelagem e técnicas de solução propostas.

O último capítulo consistiu no estudo e modelagem em coordenadas cilíndricas, do processo de secagem em camada fina, fazendo uso do método de Funções de Base Radial (FBR) cúbica; considerou-se o grão de trigo como tendo formato esférico e esferoidal prolato. Obtiveram-se, assim, os coeficientes de transporte de líquido, vapor e coeficientes de convecção de massa. A solução numérica, disponível na literatura, com modelo em coordenadas esferoidais prolatas, obtida por meio de volumes finitos foi obtida para apenas uma dimensão fixa de grãos de trigo, ou seja, apenas um conjunto de valores dos eixos. Neste capítulo, avaliaram-se e analisaram-se processos de secagem de grãos com formato de elipsóide (excentricidades de 2 e 2,5) e seu efeito sobre as estimativas das propriedades do grão de trigo. Simultaneamente, compararam-se os resultados obtidos com resultados análogos referentes a grãos esféricos. Por fim, mostraram-se que os resultados obtidos neste trabalho coincidem com os resultados experimentais de Fortes et al. (1981a), garantindo-se, assim, a validação dos resultados da modelagem e das técnicas de solução propostas.

CAPÍTULO 1

APLICAÇÃO DO MÉTODO DE FUNÇÃO DE BASE RADIAL A PROBLEMAS UNIDIMENSIONAIS DE DISPERSÃO DE CONTAMINANTE EM SOLO NÃO SATURADO

RESUMO

Fertilizantes, pesticidas e elementos químicos tóxicos de esgotos domésticos e industriais movem-se para baixo das raízes das plantas e podem contaminar as águas subterrâneas. Os fenômenos de transporte inerentes ao processo de contaminação de solos são complexos e requerem modelagem físico-matemática para melhor compreensão dos processos necessários para mitigação deles. Neste trabalho apresenta-se o método de funções de base radial (FBR) com uma modificação no tratamento do processo de integração como uma ferramenta para resolver as equações de dispersão de contaminantes no solo. Compara-se sua precisão com a solução de referência obtida por meio da versão unidimensional do programa comercial HYDRUS. Os resultados mostraram que o método de FBR proposto é uma opção adequada para resolver problemas dominados pela advecção e problemas de transporte de solutos em solos. A solução do HYDRUS apresentou dispersão numérica para a concentração de soluto, enquanto o esquema de FBR modificado levou a soluções sem dispersão ou falsa difusão. O método apresenta-se, portanto, como uma opção para obtenção de soluções precisas.

PALAVRAS-CHAVE: contaminação de solo, soluções numéricas sem malhas, transporte de soluto

APPLICATION OF RADIAL BASIS FUNCTION TO ONE-DIMENSIONAL PROBLEMS OF CONTAMINANT DISPERSION IN UNSATURATED SOIL

ABSTRACT

Fertilizers, pesticides and toxic chemicals from industrial and domestic sewage move down the roots of plants and can contaminate the groundwater. The transport phenomena underlying the process of contamination of soils are complex and require physical and mathematical modeling to better understand the processes required for their mitigation. This paper presents the method of radial basis functions (RBF) with a change in the treatment of the integration process as a tool to solve equations of advection or dispersion of contaminants in soil. Its accuracy is compared against benchmark solutions obtained from the one-dimensional version of the commercial software HYDRUS. The results show that the proposed RBF method is a suitable option to solve problems dominated by advection and solute transport in soils. The solution obtained by means of HYDRUS introduces numerical dispersion into the results of the solute problem, while the modified RBF scheme does not lead to dispersion, scattering or false diffusion. The method has, therefore, proved itself to be an option for obtaining accurate solutions.

KEYWORDS: soil contamination, meshless numerical solutions, solute transport

1.1. INTRODUÇÃO

A eliminação de elementos químicos residuais ou depósito destes no subsolo, originados de atividades humanas associadas, principalmente, a aglomerados urbanos, agricultura e indústria, tem sido, cada vez mais, controlada e criticada pela comunidade e organizações ambientais. Produtos domésticos e industriais tóxicos, fertilizantes e agrotóxicos usados na agricultura tendem a se mover para abaixo das raízes das plantas e, portanto, podem contaminar as águas subterrâneas (AGUIRRE & HAGHIGHI, 2003; FORTES et al., 2003; SUN & ZHANG, 2004; VANDERBORGHT et al., 2005). Desta maneira, as análises de escoamento subterrâneo e de transporte de solutos em solos saturados e insaturados podem fornecer informações valiosas para projetos de avaliação de risco ambiental (SUN & ZHANG, 2004; VANDERBORGHT et al., 2005; PHOON et al., 2007; ŠIMŮNEK et al., 2008). Portanto, o interesse em aplicações práticas de modelos de escoamento subterrâneo e de transporte de solutos em solos saturados e insaturados tem aumentado significativamente nos últimos anos, principalmente devido à crescente preocupação com a qualidade do subsolo e do meio ambiente em geral (SUN & ZHANG, 2004; VANDERBORGHT et al., 2005).

Os modelos utilizados na análise de escoamento de água e de contaminação de águas subterrâneas consistem em um conjunto de equações diferenciais parciais não-lineares. Uma vez que as propriedades relevantes do solo, principalmente a curva característica de água no solo e a condutividade hidráulica, são também não-lineares, soluções analíticas são raras. Por estas razões, muitos métodos numéricos têm sido desenvolvidos para modelar com precisão processos advectivos-difusivos. Desde os anos 70, o uso de modelos numéricos tais como elementos finitos, diferenças finitas e volumes finitos (BRUNONE et al., 2003; PHOON et al., 2007; CAPUTO & STEPANYANTS, 2008) para simular escoamentos de fluidos e transporte de massa em solos saturados e insaturados tem aumentado (FREEZE, 1971; PINDER, 1973; VAUCLIN et al., 1979; ZHANG et al., 1993; AGUIRRE & HAGHIGHI, 2003; VANDERBORGHT et al., 2005; HEALY, 2008; ŠIMŮNEK et al., 2008). Esses métodos utilizam esquemas de interpolação local e requerem um procedimento de subdivisão de malhas.

Fortes (1997) e Fortes & Ferreira (1999) propuseram o método difusional, que tem como base a transformação da equação de convecção-difusão em uma equação de difusão pura. A equação de difusão resultante pode ser resolvida pelo esquema de Galerkin ou outros esquemas numéricos e transforma a equação de convecção-difusão em uma equação totalmente difusional ou variacional. Fortes et al. (2003) aplicaram o método difusional em conjunto com o método de elementos finitos a problemas transientes de dispersão de contaminantes em solos não saturados e os resultados concordaram bem com os resultados obtidos por meio do método de elementos finitos de Taylor-Galerkin.

Este trabalho diz respeito à solução numérica de equações diferenciais parciais não-lineares associadas à dispersão de contaminantes. Assim, é importante comentar sobre o programa computacional HYDRUS-1D, que consiste em um programa computacional propriamente, denominado de HYDRUS, e em uma interface gráfica interativa com o usuário, denominada de HYDRUS1D. O programa HYDRUS (ŠIMŮNEK et al., 2009) foi originalmente desenvolvido para resolver numericamente a equação de Richards para fluxo de água saturado e insaturado e equações do tipo de advecção-dispersão para transporte de calor e de solutos. Um grande número de modificações foi incluído nos modelos do HYDRUS para permitir a avaliação dos possíveis efeitos dos processos biológicos no fluxo de fluidos e transporte de contaminantes no subsolo. As equações que definem o fluxo e o transporte, no programa HYDRUS, são resolvidas numericamente usando o esquema padrão de elementos finitos do tipo Galerkin. Além disso, no HYDRUS-1D é implementada uma técnica de estimativa de parâmetro do tipo Marquardt-Levenberg para estimação inversa dos parâmetros hidráulicos do solo e ou, de transporte de soluto e de reação a partir do fluxo transiente ou estacionário medido e ou, dos dados de transporte (ŠIMŮNEK et al., 2008; ŠIMŮNEK et al., 2009).

Mais recentemente, o método das funções de base radial (FBR) começou a ser usado por pesquisadores, em razão de ser um método sem malha e pode ser facilmente estendido a problemas multidimensionais (SARRA, 2005; ZHANG, 2006; DRISCOLL & HERYUDONO, 2007). O método de FBR tem sido utilizado para solucionar problemas de interpolações complexas, bem como para resolver numericamente equações diferenciais parciais (BROWN et al., 2005). O método de

FBR utiliza combinações lineares de uma função de base $\varphi(r)$ de uma variável vetorial r , expandida sobre um dado centro de dados dispersos $x_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, \dots, N$ para aproximar uma função desconhecida. O método de FBR gera, então, um sistema de equações lineares, que pode ser resolvido para obter a solução atualizada no plano de tempo $n+1$, a partir de soluções anteriores conhecidas. Alguns exemplos de FBRs são a Cúbica, a *Spline* de Placa Fina (TPS), a Multiquádrica (MQ) e a Gaussiana (FASSHAUER, 2007). A precisão das funções de base radial MQ e Gaussiana depende do parâmetro de forma c da função de base radial, que só pode ser otimizado por meio de abordagens empíricas (RIPPA, 1999). Um estudo recente (GOTO et al., 2007) mostra que a abordagem empírica para a obtenção do parâmetro de forma pode ser equivocada ou requerer conhecimento prévio de soluções analíticas.

Neste trabalho tem-se por objetivo apresentar uma nova metodologia para solução do problema de Richards por meio do método de funções de base radial, com foco na função cúbica. O uso de funções radiais cúbicas visa eliminar a necessidade de investigar empiricamente um valor aceitável da função de forma. Estudam-se problemas transientes de dispersão de contaminantes em solos insaturados e comparam-se a precisão e a eficácia deles com os resultados obtidos por meio da versão unidimensional do programa comercial HYDRUS.

1.2. METODOLOGIA

1.2.1. Modelo Físico-Matemático de Transporte de Solutos em Solos

Neste trabalho, os problemas transientes de dispersão de contaminantes em solos não saturados são estudados adotando-se as seguintes hipóteses simplificadoras (GURGEL et al., 1995, FORTES et al., 2003):

- A concentração de soluto é pequena e não afeta o escoamento e as propriedades físicas do solo e da água.
- A interação química entre o soluto, o escoamento e o meio poroso é descrita adequadamente pela hipótese de sorção linear.

- O soluto adsorvido no solo e em solução encontra-se em equilíbrio local de concentração.
- A pressão de ar no solo é constante ao longo do domínio de infiltração e não exerce resistência ao fluxo.
- A matriz é sólida.
- O processo é isotérmico.

A equação de Richards para o movimento unidimensional uniforme de água em um meio poroso rígido parcialmente saturado é (ŠIMŮNEK et al., 2008):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K \left(\frac{\partial h}{\partial x} + \cos \alpha \right) \right] - S \quad (1)$$

em que

- h - Carga de pressão de água [m];
- θ - Conteúdo volumétrico de água no solo [$\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$];
- t - Tempo [s];
- x - Coordenada espacial [m] (positiva para cima);
- S - Termo fonte [$\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$];
- α - Ângulo (em graus) entre a direção do fluxo e do eixo vertical (ex: $\alpha = 0^\circ$ para o fluxo vertical, 90° para o fluxo horizontal, e $0^\circ < \alpha < 90^\circ$ para o fluxo inclinado);
- K - Função de condutividade hidráulica não saturada [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$].

Neste trabalho, a Equação (1) foi transformada em função da carga de pressão de água (h). Apenas o fluxo vertical foi considerado ($\alpha = 0^\circ$) e o termo fonte foi negligenciado. Assim, a Equação (1) pode ser reescrita na forma:

$$\frac{\partial \theta}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K \left(\frac{\partial h}{\partial x} + 1 \right) \right] \quad (2)$$

A função de condutividade hidráulica não saturada é dada por:

$$K(h, x) = K_s(x) \cdot K_r(h, x) \quad (3)$$

em que

- K_s - Condutividade hidráulica saturada [$m \cdot s^{-1}$];
 K_r - Condutividade hidráulica relativa, adimensional.

As propriedades hidráulicas do solo não saturado, $\theta(h)$ e $K(h)$, na Equação (1) são, em geral, funções altamente não-lineares da carga de pressão. Neste trabalho, o modelo analítico utilizado é o modelo apresentado por van Genuchten (1980), em conjunto com o modelo estatístico de distribuição de tamanho dos poros de Mualem (1976). Utilizaram-se esses modelos para se obter a função de condutividade hidráulica não saturada em termos dos parâmetros de retenção de água no solo. A expressão para a condutividade hidráulica relativa pode ser escrita na forma:

$$K_r(h) = S_e^{1/2} \left[1 - (1 - S_e^{1/m})^m \right]^2 \quad (4)$$

Na Equação (4), S_e é a saturação efetiva dada por:

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \left(1 + (\gamma |h|)^n \right)^{-m} \quad (5)$$

em que

- θ_r - Teor residual de água no solo [];
 θ_s - Teor de água no solo saturado [];
 γ - Parâmetro empírico [];
 m - Parâmetro empírico ($m = 1 - \frac{1}{n}$, com $n > 1$);

As condições iniciais e de contorno para a solução da Equação (2) são:

$$h(x, 0) = h_i(x), \quad h(0, t) = h_0(t), \quad h(L, t) = h_L(t) \quad (6)$$

O transporte de componentes miscíveis em um escoamento unidimensional transiente pode ser descrito pela equação de advecção-dispersão para o transporte de soluto (ŠIMŮNEK et al., 2008):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta \cdot c) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta \cdot D \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x}(q \cdot c) \quad (7)$$

em que

- c - Concentração de soluto na fase líquida [$\text{m mol} \cdot \text{m}^{-3}$];
- t - Tempo [s];
- x - Coordenada espacial vertical, orientada para baixo, na direção z [m];
- θ - Teor volumétrico de água no solo [$\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$];
- q - Densidade de fluxo volumétrico [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$];
- D - Coeficiente de dispersão para a fase líquida [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$].

O coeficiente de dispersão na Equação (7) é definido por:

$$\theta \cdot D = D_L |q| + \theta \cdot D_w \cdot \tau \quad (8)$$

em que

- D_L - Dispersividade longitudinal [m];
- $|q|$ - Valor absoluto da densidade de fluxo da lei de Darcy [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$];
- D_w - Coeficiente de difusão molecular em água livre [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$];
- τ - Fator de tortuosidade do solo na fase líquida [].

O fator de tortuosidade pode ser calculado em função do teor de água no solo por meio da equação (ŠIMŮNEK et al., 2008):

$$\tau = \frac{\theta^{7/3}}{\theta_s^2} \quad (9)$$

A distribuição inicial e as condições de contorno para análise de concentração de soluto no solo são dadas, respectivamente, por:

$$c(x, 0) = c_i(x) \quad (10)$$

$$c(0, t) = c_0(t), \quad c(L, t) = c_L(t) \quad (11)$$

1.2.2. Metodologia Numérica

1.2.2.1. Método de Funções de Base Radial Clássico

O método de funções de base radial (FBR) faz uso de combinações lineares de uma função de base $\phi(r)$ de uma variável, expandida sobre um dado centro de dados dispersos $x_i \in \mathfrak{R}^d$, $i = 1, \dots, N$, para aproximar uma função desconhecida $h(x, t)$ por:

$$h(x, t) = \sum_{j=1}^N \lambda_j(t) \phi(r_j) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \phi(\|x - x_j\|) \quad (12)$$

em que

r_j - Norma euclidiana ($r_j = \|x - x_j\|$);

λ_j - Coeficientes a serem determinados.

As funções de base radial mais usuais são citadas a seguir (KOC et al., 2003; FASSHAUER, 2007).

Thin plate spline - TPS: $\phi(r_j) = r_j^4 \log(r_j)$ (13)

Multiquádrica - MQ: $\phi(r_j) = \sqrt{c^2 + r_j^2}$ (14)

Cúbica: $\phi(r_j) = r_j^3$ (15)

Gaussiana: $\phi(r_j) = e^{-c^2 r_j^2}$ (16)

Deve-se notar que os pontos de malha, aqui definidos por r_j , não requerem qualquer regra formal, exceto a definição de quais são os contornos. O método, então, não requer malhas, ou seja, é “sem malha”. Adicionalmente, além da extensão óbvia para muitas dimensões, o método só requer a colocação de pontos em contornos importantes. Nenhuma regra para malhas é necessária e nela se situa a importância do método de colocação de função de base radial, ao contrário de outros métodos numéricos.

Utiliza-se, neste trabalho, apenas a FBR Cúbica, devido à sua simplicidade e precisão comprovada para outros tipos de problemas e devido à dificuldade associada

à obtenção de valores adequados para o parâmetro de forma, c , que depende do tipo de problema (GOTO et al., 2007).

Aplicação do Método de Funções de Base Radial Clássico à Equação de Richards

A metodologia de FBR para obter a solução numérica da equação de Richards requer discretização da equação original, a Equação (2). Desse modo, a equação de Richards original, Equação (2), pode ser discretizada usando o teorema do valor médio classicamente aplicado à solução de equações diferenciais ordinárias, $\frac{dh}{dt} = f(h, t)$ (HOFFMAN, 1992; SANTOS et al., 2009):

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = f(x, t) \approx (1 - \Theta) \cdot f(x_t, t) + \Theta \cdot f(x_{t+\Delta t}, t + \Delta t), \quad \forall 0 \leq \Theta \leq 1 \quad (17)$$

Na Equação (17), definindo Θ igual a 0, 0,5 ou 1 obtêm-se os esquemas de Euler explícito, Crank-Nicolson ou Euler implícito, respectivamente. Assim, a forma discretizada da Equação (2) torna-se:

$$\begin{aligned} h(x, t^n) - h(x, t^n + \Delta t) + \Delta t(1 - \Theta) \frac{1}{\partial \theta / \partial h} \left\{ \nabla \left[K(\nabla h(x, t^n) + 1) \right] \right\} + \\ + \Delta t \cdot \Theta \frac{1}{\partial \theta / \partial h} \left\{ \nabla \left[K(\nabla h(x, t^n + \Delta t) + 1) \right] \right\} = 0 \end{aligned} \quad (18)$$

Na Equação (18), n indica o n ésimo plano de tempo e $\nabla = \frac{\partial}{\partial x}$. Definindo $h(x, t^n) = h^n$, $h(x, t^n + \Delta t) = h^{n+1}$, $\alpha = \Theta \cdot \Delta t$ e $\beta = (1 - \Theta) \Delta t$, a equação anterior toma a forma:

$$h^{n+1} - \alpha \left(\frac{1}{\partial \theta / \partial h} \right) \left\{ \nabla \left[K(\nabla h^{n+1} + 1) \right] \right\} = h^n + \beta \left(\frac{1}{\partial \theta / \partial h} \right) \left\{ \nabla \left[K(\nabla h^n + 1) \right] \right\} \quad (19)$$

Agora, definem-se dois novos operadores, H_{left} e H_{right} :

$$H_{\text{left}} = h^{n+1} - \alpha \left(\frac{1}{\partial \theta / \partial h} \right) \left\{ \nabla \left[K(\nabla h^{n+1} + 1) \right] \right\}; H_{\text{right}} = h^n + \beta \left(\frac{1}{\partial \theta / \partial h} \right) \left\{ \nabla \left[K(\nabla h^n + 1) \right] \right\} \quad (20)$$

Com a definição da Equação (20) a Equação (19) torna-se:

$$\sum_{j=1}^N \lambda_j^{n+1} H_{\text{left}} \phi(x_{ij}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j^n H_{\text{right}} \phi(x_{ij}); \quad \forall i = 1, \dots, N \quad (21)$$

A Equação (21) é um sistema de equações lineares cuja solução permite obter os coeficientes desconhecidos, λ_j^{n+1} , a partir dos valores conhecidos de λ_j^n no passo de tempo anterior. A partir destes coeficientes, pode-se obter $h(x, t)$ utilizando a Equação (12).

Aplicação do Método de Funções de Base Radial Clássico à Equação de Transporte de Solutos

O método de FBR mostrado no item anterior foi aplicado à equação de transporte de solutos. Assim, o desenvolvimento da Equação (7), por meio do teorema do valor médio, leva a:

$$\begin{aligned} & \left\{ c^{n+1} - \alpha \left(\frac{1}{\theta} \right) \left[\nabla(\theta \cdot D \cdot \nabla c^{n+1}) - \nabla[-K(\nabla h^{n+1} + 1)c^{n+1}] - c^{n+1} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right) \right] \right\} = \\ & = \left\{ c^n + \beta \left(\frac{1}{\theta} \right) \left[\nabla(\theta \cdot D \cdot \nabla c^n) - \nabla[-K(\nabla h^n + 1)c^{n+1}] - c^n \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (22)$$

Os operadores H_{left} e H_{right} são, agora, definidos por:

$$\begin{aligned} H_{\text{left}} &= \left\{ c^{n+1} - \alpha \left(\frac{1}{\theta} \right) \left[\nabla(\theta \cdot D \cdot \nabla c^{n+1}) - \nabla[-K(\nabla h^{n+1} + 1)c^{n+1}] - c^{n+1} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right) \right] \right\} \\ H_{\text{right}} &= \left\{ c^n + \beta \left(\frac{1}{\theta} \right) \left[\nabla(\theta \cdot D \cdot \nabla c^n) - \nabla[-K(\nabla h^n + 1)c^{n+1}] - c^n \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (23)$$

Finalmente, os novos operadores H_{left} e H_{right} , quando aplicados à Equação (21), geram outro sistema de equações lineares de FBR equivalente à forma discretizada da Equação (7).

1.2.2.2. Método de Funções de Base Radial Modificado

Aplicação do Método de FBR Modificado à Equação de Richards

O algoritmo proposto para obter, pelo método de **FBR**, os diversos termos e, assim, uma aproximação numérica para a solução da equação de Richards, consistiu em avaliar ou obter seqüencialmente os termos ou parâmetros como descrito a seguir.

1.
$$\nabla h = \left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right) \lambda \quad (24)$$

2.
$$KK = K(\nabla h + 1) \quad (25)$$

3. Função de interpolação λ_k em função de ϕ e KK .

$$KK = \phi \cdot \lambda_k \quad (26)$$

4.
$$\text{Pr ov1} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right) \lambda_k \quad (27)$$

5.
$$H_{\text{left}} = h^{n+1} - \alpha \left(\frac{1}{\partial \theta / \partial h} \right) (\text{Pr ov1})^{n+1} = H_{\text{right}} = h^n + \beta \left(\frac{1}{\partial \theta / \partial h} \right) (\text{Pr ov1})^n \quad (28)$$

6. Finalmente, aplicam-se os novos operadores, H_{left} e H_{right} , à Equação (21), gerando outro sistema de equações lineares de FBR que é a forma discretizada proposta para a Equação (2).

Aplicação do Método de FBR Modificado à Equação de Transporte de Soluto

No caso da equação relativa ao soluto, que é uma equação de advecção-dispersão, o algoritmo proposto para obter, pelo método de FBR, os diversos termos e, assim, uma aproximação numérica para a solução da equação de transporte de soluto, consistiu em avaliar ou obter seqüencialmente os termos ou parâmetros como descrito a seguir.

1.
$$\nabla c = \left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right) \lambda \quad (29)$$

2.
$$q = -K(\nabla h + 1) \quad (30)$$

em que ∇h é obtido utilizando a Equação (24)

$$3. \quad D1 = \theta \left[\frac{(D_L \cdot |q|) + (\theta \cdot D_w \cdot \tau)}{\theta} \right] \nabla c \quad (31)$$

4. Função de interpolação λ_d em função de ϕ e D1.

$$D1 = \phi \cdot \lambda_d \quad (32)$$

$$5. \quad \text{Pr ov2} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right) \lambda_d \quad (33)$$

6. Função de interpolação λ_{qc} em função de ϕ e $(q \cdot c)$.

$$q \cdot c = \phi \cdot \lambda_{qc} \quad (34)$$

$$7. \quad \text{Pr ov3} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right) \lambda_{qc} \quad (35)$$

$$8. \quad \begin{aligned} H_{\text{left}} &= \left\{ c^{n+1} - \alpha \left(\frac{1}{\theta} \right) \left[\text{Pr ov2} - \text{Pr ov3} - c^{n+1} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right) \right] \right\} = \\ &= H_{\text{right}} = \left\{ c^n + \beta \left(\frac{1}{\theta} \right) \left[\text{Pr ov2} - \text{Pr ov3} - c^n \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (36)$$

9. Por último, os novos operadores, H_{left} e H_{right} , são aplicados à Equação (21), gerando outro sistema de equações lineares de FBR que é a forma discretizada proposta para a Equação (7).

1.2.3. Problemas Exemplos

Analisou-se o problema de infiltração de água e de um soluto dissolvido em um solo inicialmente livre de soluto para simular o transporte de soluto durante o escoamento de água em solo não saturado. Assim, resolveram-se as Equações (2) e (7). Os resultados foram obtidos utilizando o programa computacional Mathcad, uma linguagem de programação matemática simbólica que permite implementar facilmente algoritmos para resolver problemas matemáticos.

Os problemas propostos foram resolvidos para um solo de profundidade $L = -6$ m com os seguintes parâmetros hidráulicos: $n = 1,506$, $\alpha = 1,433 \text{ m}^{-1}$, $\theta_r = 0$, $\theta_s = 0,3308$, $K_s = 0,25 \text{ m}$, $D_L = 0,01 \text{ m}$, $D_w = 0 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$.

O contaminante considerado foi o tricloroetileno (Fortes et al., 2003). De acordo com a Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (2011), usa-se este contaminante para desengraxamento de metais; solvente para extração de óleos, gorduras e ceras; solvente de tintas; limpeza a seco; líquido refrigerante e para troca de calor; nas sínteses orgânicas; como fumigante; em medicina (anestésico).

Foram consideradas, inicialmente, para o primeiro exemplo, condições de contorno de Dirichlet para as equações de Richards e de transporte de soluto, ou seja:

$$\begin{cases} h_i(x) = -0,003 & \forall x = 0 \\ h_i(x) = -6,918 & \forall x = -1, \dots, L \\ h_0(t) = -0,003 \\ h_L(t) = -6,918 \end{cases} \quad (37)$$

$$\begin{cases} c_i(x) = 1 & \forall x = 0 \\ c_i(x) = 0 & \forall x = -1, \dots, L \\ c_0(t) = 1 \\ c_L(t) = 0 \end{cases} \quad (38)$$

No segundo exemplo, considerou-se um fluxo constante (condições de Neumann) no contorno superior para a solução da equação de Richards e, no contorno inferior, aplicou-se condição de contorno de Dirichlet. Na equação de transporte de soluto, consideraram-se condições de contorno de Dirichlet tanto no contorno superior quanto no inferior. Assim, assumiram-se as seguintes condições iniciais e de contorno no segundo exemplo:

$$\begin{cases} h_i(x) = -6,918 & \forall x = 0, \dots, L \\ h_0(t) = q_0(t) = -K \left(\frac{\partial h}{\partial x} + 1 \right) \\ h_L(t) = -6,918 \end{cases} \quad (39)$$

$$\begin{cases} c_i(x) = 1 & \forall x = 0 \\ c_i(x) = 0 & \forall x = -1, \dots, L \\ c_0(t) = 1 \\ c_L(t) = 0 \end{cases} \quad (40)$$

O esquema explícito apresentou maior precisão que os esquemas implícitos (FORTES e FERREIRA, 1999) em problemas similares e foi adotado neste trabalho.

As soluções das equações de Richards e de transporte de solutos, Equações (2) e (7), respectivamente, foram comparadas com os resultados obtidos a partir do programa computacional HYDRUS (ŠIMŮNEK, 2008).

O número total de malhas é N , e o tamanho da malha, Δx , é definido por $\Delta x = \frac{L}{N}$. Analogamente, o número total de passos de tempo é N_t , enquanto o passo de tempo, Δt , é definido por $\Delta t = \frac{\text{Tempo_final}}{N_t}$. O método de integração é definido pelo valor de Θ .

1.3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

1.3.1. Infiltração de Água em Solo não Saturado com Presença de Solute com Valores de Concentração Prescritos

As Figuras 1.1 e 1.2 referem-se aos resultados obtidos a partir das simulações do primeiro exemplo. Neste exemplo, utilizaram-se os seguintes parâmetros: $N = 80$, $\Delta x = -0,075$, $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ e método de integração $\Theta = 0$.

A Figura 1.1 mostra as curvas de carga de pressão na direção vertical do solo para os tempos $t = 1, 2, 3, 4$ e 5 h. Pode-se observar que o método de FBR modificado, utilizando a função cúbica levou a excelentes resultados quando comparado aos resultados obtidos com o programa HYDRUS.

A Figura 1.2 apresenta o desempenho do método de FBR modificado utilizando a função cúbica aplicado à solução da equação de transporte de soluto em solo não saturado. Nessa figura, mostra-se a concentração de soluto no solo em função da profundidade do solo. Considerou-se o tempo de simulação igual a $1, 2, 3, 4$ e 5 h. Observando os resultados obtidos por meio do método de FBR modificado utilizando a função cúbica na Figura 1.2, observa-se um pequeno avanço de fase no tempo para a concentração de soluto nas duas primeiras horas, quando comparado aos resultados do programa HYDRUS. Observando os resultados do programa HYDRUS, pode-se observar uma pequena dispersão numérica, próxima à profundidade do solo igual a -1 m. Portanto, pode-se considerar o método de

FBR modificado utilizando a função cúbica adequado para resolver a equação de transporte de solutos.

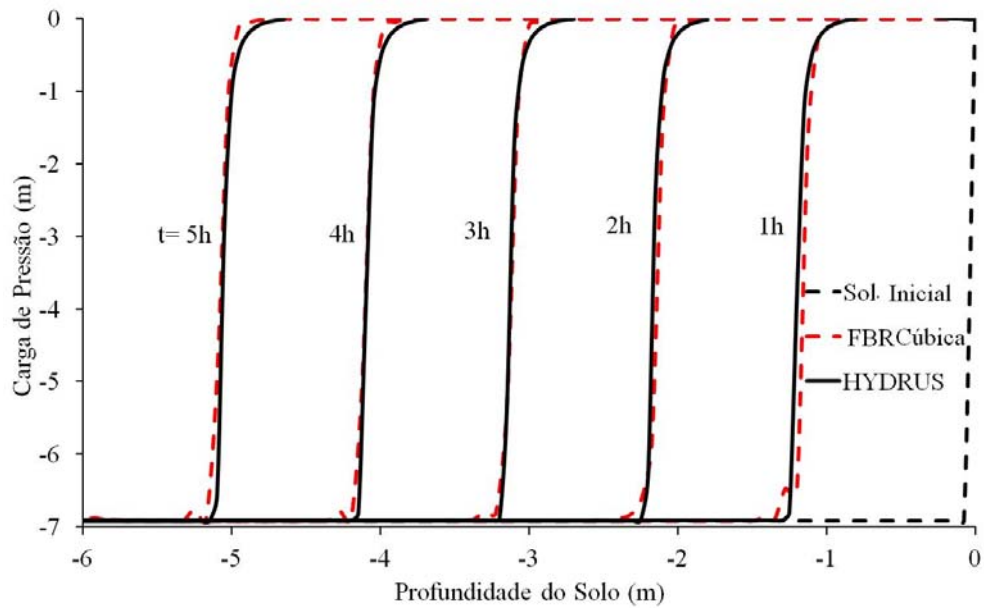


Figura 1.1. Perfil espacial-temporal da carga de pressão em solo obtido pelo método proposto e pelo programa HYDRUS para o primeiro exemplo (condições de contorno de Dirichlet para as equações de Richards e de transporte de soluto).

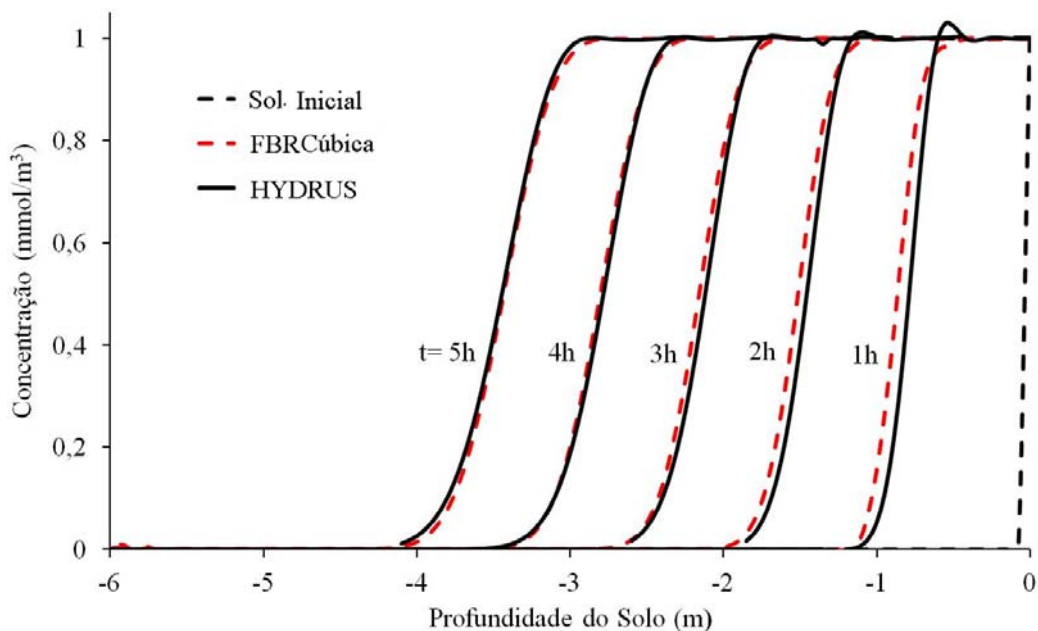


Figura 1.2. Perfil espacial-temporal da concentração de soluto em solo obtido pelo método proposto e pelo programa HYDRUS para o primeiro exemplo (condições de contorno de Dirichlet para as equações de Richards e de transporte de soluto).

1.3.2. Infiltração de Água em Solo não Saturado com Presença de Solute com Fluxo de Água Prescrito

As Figuras 1.3, 1.4, 1.5 e 1.6 referem-se aos resultados obtidos a partir das simulações do segundo exemplo. Para este exemplo, utilizaram-se os seguintes parâmetros: $N=120$, $\Delta x = -0,05$, $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ e o método de integração $\Theta = 0$ e condição de contorno de fluxo $q_0(t) = -0,1 \text{ m} \cdot \text{h}^{-1}$ para a equação de Richards.

A Figura 1.3 mostra a variação da carga de pressão em função da profundidade do solo para $t = 1, 2, 3, 4$ e 5 h. Observa-se um pequeno avanço no tempo na parte superior das curvas obtidas pelo método modificado de FBR Cúbica quando comparadas às curvas obtidas pelo programa HYDRUS. Entretanto, o método modificado de FBR Cúbica continua a ser uma excelente opção para resolver a equação de Richards com condição de contorno de fluxo.

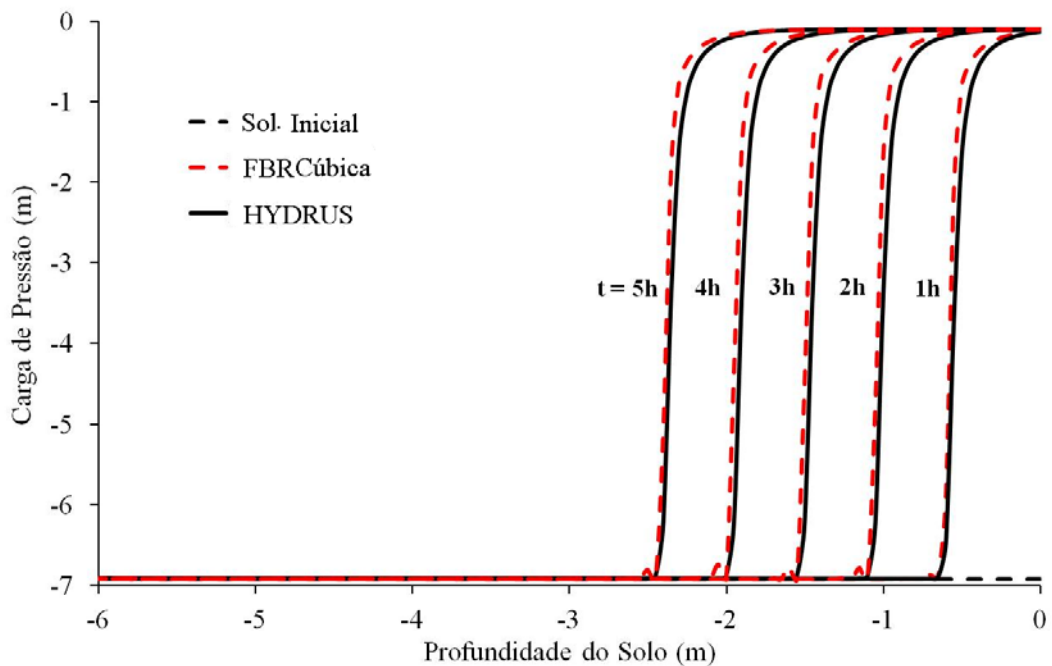


Figura 1.3. Perfil espacial-temporal da carga de pressão em solo obtido pelo método proposto e pelo programa HYDRUS para o segundo exemplo (condição de contorno de fluxo $q_0(t) = -0,1 \text{ m} \cdot \text{h}^{-1}$ para a equação de Richards).

Na Figura 1.4 é apresentada a variação do conteúdo de água em função da profundidade do solo. Novamente, pode-se observar um avanço muito pequeno no tempo na parte superior das curvas obtidas pelo método modificado de FBR Cúbica comparadas às curvas obtidas pelo programa HYDRUS.

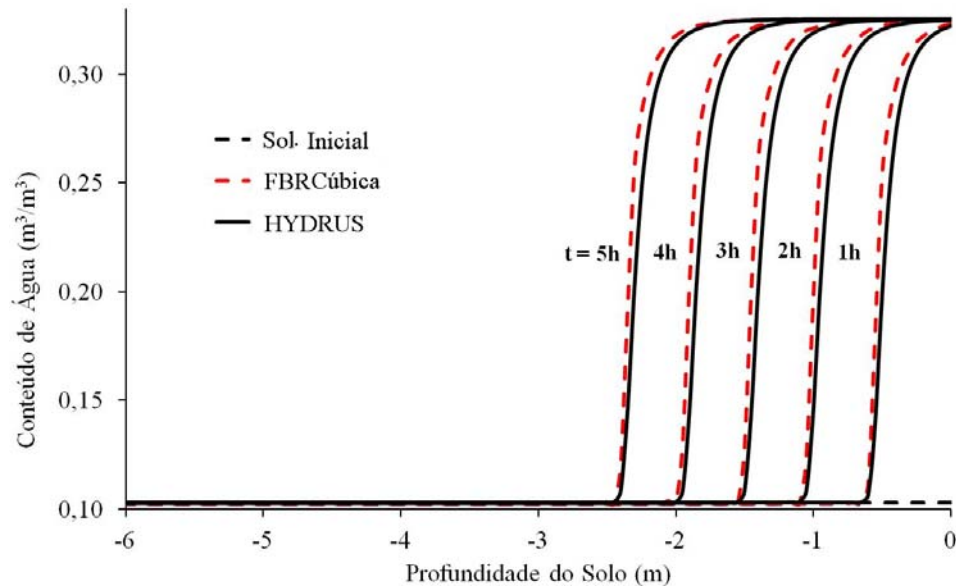


Figura 1.4. Perfil espacial-temporal do conteúdo volumétrico de água em solo obtido pelo método proposto e pelo programa HYDRUS para o segundo exemplo (condição de contorno de fluxo $q_0(t) = -0,1 \text{ m} \cdot \text{h}^{-1}$ para a equação de Richards).

Na Figura 1.5 é mostrada a solução da equação de transporte de solutos em solo não saturado. Observa-se a concentração de soluto no solo em função da profundidade do solo. Pode-se constatar que o esquema de FBR apresentou resultados muito melhores que os do programa HYDRUS, uma vez que não apresentou qualquer dispersão numérica.

A Figura 1.6 mostra que o fluxo obtido pelo esquema modificado de FBR Cúbica apresenta um pequeno avanço no tempo em relação ao fluxo obtido pelo programa HYDRUS, além de apresentar dispersão numérica no contorno inferior.

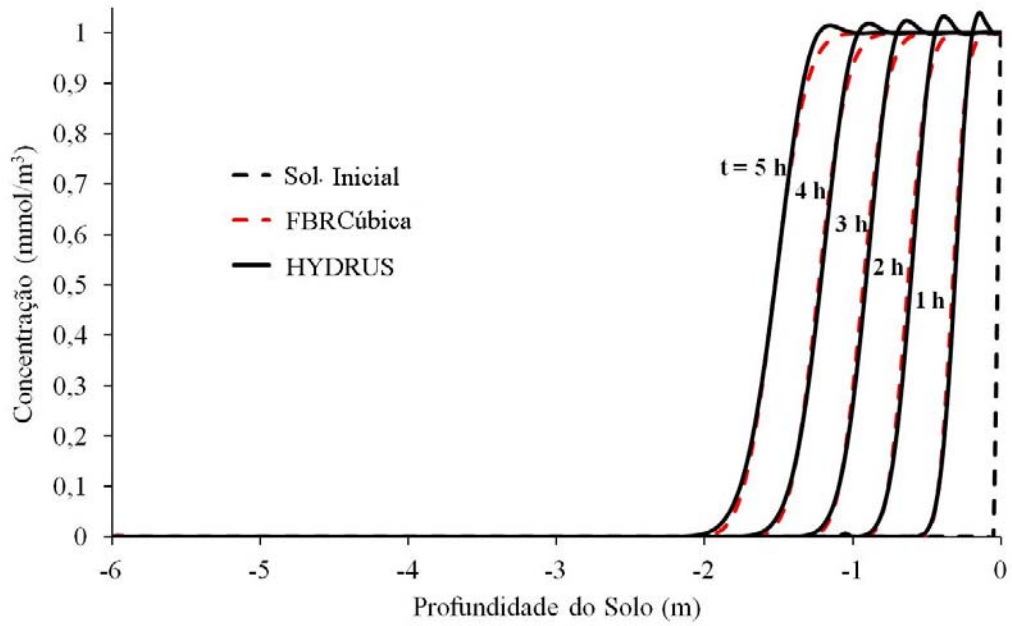


Figura 1.5. Perfil espacial-temporal da concentração de soluto em solo obtido pelo método proposto e pelo programa HYDRUS para o segundo exemplo (condição de contorno de fluxo $q_0(t) = -0,1 \text{ m} \cdot \text{h}^{-1}$ para a equação de Richards).

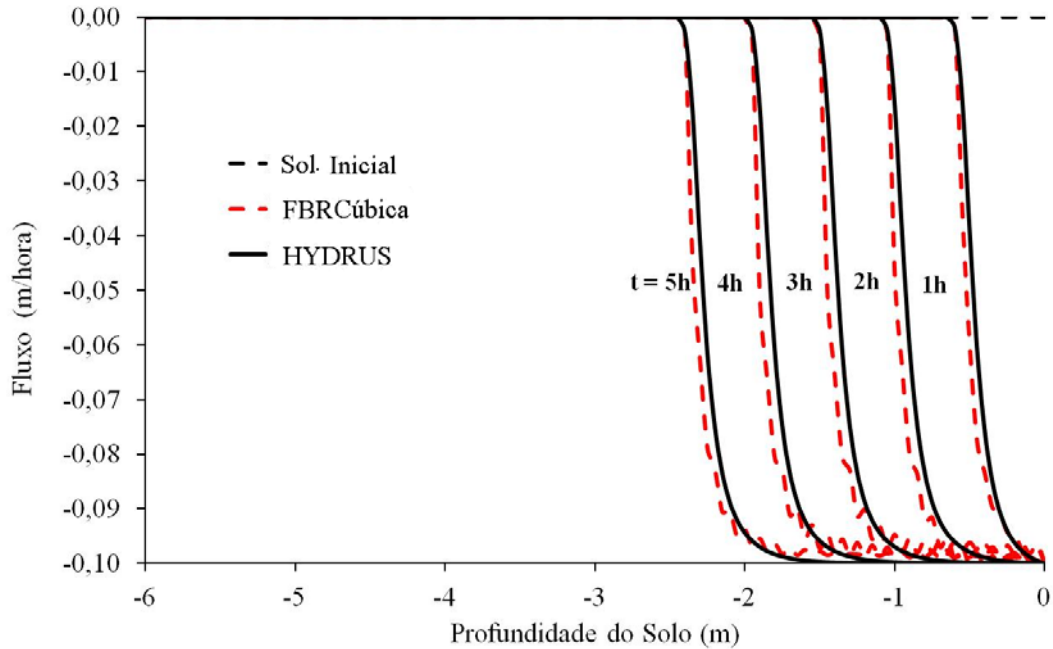


Figura 1.6. Perfil espacial-temporal do fluxo de água em solo obtido pelo método proposto e pelo programa HYDRUS para o segundo exemplo (condição de contorno de fluxo $q_0(t) = -0,1 \text{ m} \cdot \text{h}^{-1}$ para a equação de Richards).

1.4. CONCLUSÕES

Neste trabalho apresentou-se o método FBR para resolver problemas de escoamento de água e transporte de solutos em solos não saturados. O método FBR modificado mostrou-se adequado para resolver problemas de infiltração de contaminantes.

O método FBR provou ser uma excelente opção para resolver problemas dominados por advecção, como problemas de transporte de solutos em solos. O esquema de FBR levou a soluções estáveis e sem falsas difusões quando se consideraram condições de contorno de Dirichlet. Por outro lado, considerando condições de contorno de fluxo constante, o esquema de FBR levou a soluções sem falsas difusões, no entanto, apresentou dispersão numérica para o fluxo de água.

Já o programa HYDRUS, apresentou dispersão numérica para a concentração de soluto tanto, para o primeiro exemplo, em que as condições de contorno para a infiltração de água e para o soluto eram constantes, quanto para o segundo, em que a condição de contorno para a infiltração de água era de fluxo constante e para soluto era também constante.

Em geral, as comparações entre o desempenho do método de FBR modificado e do programa HYDRUS mostraram que a metodologia proposta é precisa e competitiva para resolver problemas transientes unidimensionais de dispersão de contaminantes em solos não saturados.

A modificação relevante no método de FBR clássico proposta neste trabalho permitiu resolver as equações de Richards e de transporte de soluto de maneira muito mais eficiente do que a abordagem tradicional.

1.5. REFERÊNCIAS

AGUIRRE, C. G.; HAGHIGHI, K. Stochastic modeling of transient contaminant transport. *Journal of Hydrology*, v. 276, pp. 224–239, 2003.

BROWN, D.; LING, L.; KANSA, E.; LEVESLEY, J. On approximate cardinal preconditioning methods for solving PDEs with radial basis functions. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 29, n. 4, pp. 343–353, 2005.

BRUNONE, B.; FERRANTE, M.; ROMANO, N.; SANTINI, A. Numerical simulations of one-dimensional infiltration into layered soils with the Richards equation using different estimates of the interlayer conductivity. *Vadose Zone Journal*, v. 2, n.2, pp. 193–200, 2003.

CAPUTO, J.; STEPANYANTS, Y. A. Front solutions of Richards' equation. *Transp. Porous Med.*, v. 74, n.1, pp.1–20, 2008.

COMPANHIA AMBIENTAL DO ESTADO DE SÃO PAULO. Ficha de Informação de Produto Químico. Disponível em:
http://www.cetesb.sp.gov.br/emergencia/produtos/ficha_completa1.asp?consulta=TRICLOROETILENO. Acesso em: 24 de jan. 2011.

DRISCOLL, T. A.; HERYUDONO, A. R. H. Adaptive residual subsampling methods for radial basis function interpolation and collocation problems. *Computers and Mathematics with Applications*, v. 53, n.6, pp. 927–939, 2007.

FASSHAUER, G. E. *Meshfree approximation methods with matlab*. World Scientific Publishers, Singapore, 2007.

FORTES, M. The diffusional method for convection-diffusion equations: finite element one dimensional solutions. *Numerical Methods in Thermal Problems*, v.10, n. 1, pp. 57-68, 1997.

FORTES, M.; FERREIRA, W. R.; CRESPO, L. C. A.; JUNHO, R. A. C. Dispersão de contaminantes em solos não saturados mediante comparação entre metodologias de solução numérica por elementos finites. *Eng. Agríc., Jaboticabal*, v. 23, n. 3, pp.477-485, 2003.

FORTES, M.; FERREIRA, W. R. The one-dimensional transient diffusional method: finite element adaptive solutions to convection-diffusion problems. *International Journal of Thermal Sciences*, v.38, pp.780-796, 1999.

FREEZE, R. A. Three-dimensional, transient, saturated-unsaturated flow in a groundwater basin. *Water Resources Research*, Washington, v.7, n.2, p.347-366, 1971.

- GOTO, Y.; FEI, Z.; KAN, S.; KITA, E. Options valuation by using radial basis function approximation. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 31, n. 10, pp. 836-843, 2007.
- GURGEL, C. E. P.; SHIRMOHAMMADI, A.; MADANI, A.; HAGHIGHI, K.; AGUIRRE, I. Finite element analysis of water and chemical flow through porous media. In: ASAE SUMMER MEETING, Chicago, 1995. Proceedings... Chicago: American Society of Agricultural Engineering, 1995. p.110.
- HEALY, R. W. Simulating water, solute, and heat transport in the subsurface with the VS2DI software package. *Vadose Zone Journal*, v. 7, n.2, pp. 632–639, 2008.
- HOFFMAN, J.D. *Numerical Methods for Engineers and Scientists*. McGraw-Hill, New York, 1992.
- KOC, M. B.; BOZTOSUN, I.; BOZTOSUN, D. On the Numerical Solution of Black-Scholes Equation. In: INTERNATIONAL WORKSHOP ON MESHFREE METHODS, Lisbon, Anais..., CD-ROM, Portugal, 6p, 2003.
- MUALEM, Y. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media, *Water Resour. Res.*, v.12, n.3, 513-522, 1976.
- PHOON, K.; TAN, T.; CHONG, P. Numerical simulation of Richards equation in partially saturated porous media: under-relaxation and mass balance. *Geotech Geol Eng*, v. 25, n.5, pp. 525–541, 2007.
- PINDER, G. F. A Galerkin-Finite element simulation of groundwater contamination on Long Island, New York. *Water Resources Research*, v. 9, n.6, pp.1657-1669,1973.
- RIPPA, S. An algorithm for selecting a good value for the parameter c in radial basis function interpolation. *Advances in Computational Mathematics*, v. 11, n. 2, pp. 193–210, 1999.
- SANTOS, G. T.; SOUZA, M. C.; FORTES, M. Use of radial basis functions for meshless numerical solutions applied to financial engineering barrier options. *Pesquisa Operacional*, v.29, n. 2, pp.419-437, 2009.

SARRA, S. A. Adaptive radial basis function methods for time dependent partial differential equations. *Applied Numerical Mathematics*, v. 54, n. 1, pp. 79–94, 2005.

ŠIMŮNEK, J.; JACQUES, D.; TWARAKAVI, N. K. C.; van GENUCHTEN, M. T. Selected HYDRUS modules or modeling subsurface flow and contaminant transport as influenced by biological processes at various scales. *Biologia*, v. 64, n.3, pp. 465–469, 2009.

ŠIMŮNEK, J.; ŠEJNA, M.; SAITO, H.; SAKAI, M.; van GENUCHTEN, M. T. The HYDRUS-1D software package for simulating the movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated media, Version 4.08, *HYDRUS Software Series 3*, Department of Environmental Sciences, University of California Riverside, Riverside, California, USA, pp. 330, 2008.

SUN, A. Y.; ZHANG, D. A solute flux approach to transport through bounded, unsaturated heterogeneous porous media. *Vadose Zone Journal*, v. 3, n. 2, pp. 513–526, 2004.

van GENUCHTEN, M. T. A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, v.44, n. 3, p.892-898, 1980.

VANDERBORGHT, J.; KASTEEL, R.; HERBST, M.; JAVAUX, M.; THIÉRY, D.; VANCLOOSTER, M.; MOUVET, C.; VEREECKEN, H. A set of analytical benchmarks to test numerical models of flow and transport in soils. *Vadose Zone Journal*, v.4, n.1, pp. 206–221, 2005.

VAUCLIN, M.; KHANJI, D.; VACHAUD, G. Experimental and numerical study of a transient, two-dimensional unsaturated-saturated water table recharge problem. *Water Resources Research*, v.15, n. 5, pp.1089-1101, 1979.

VOGEL, T.; HUANG, K.; ZHANG, R.; van GENUCHTEN, M. T. The HYDRUS code for simulating onedimensional water flow, solute transport, and heat movement in variably saturated media. California: U.S. Salinity Laboratory, 1996. 187 p. (Research Report, 140)

ZHANG, R.; HUANG, K.; van GENUCHTEN, M. T. An efficient Eulerian-Lagrangian method for solving solute problems in steady and transient flow fields. *Water Resources Research*, v. 29, n. 12, pp. 4131-4138, 1993.

ZHANG, Y. Solve partial differential equations by two or more radial basis functions. *Applied Mathematics and Computation*, v. 181, n. 1, pp. 793-801, 2006.

CAPÍTULO 2

ANÁLISE POR TERMODINÂMICA IRREVERSÍVEL DE SECAGEM DE UM ÚNICO GRÃO DE TRIGO: MODELAGEM E SIMULAÇÃO DOS FENÔMENOS FÍSICOS INERENTES

RESUMO

Grãos cereais são úteis para a humanidade e naturalmente complexos. Eles são anisotrópicos, termos-sensíveis e biologicamente degradáveis sob variações psicrométricas adversas. A secagem adequada pode minimizar o ataque de insetos, o crescimento de fungos, deterioração da qualidade e efeitos indesejáveis das condições ambientais. O número de variáveis que definem a secagem é grande e inclui, entre outras, propriedades termofísicas do produto, forma, composição biológica e comportamento do teor de água e térmico, grau de anisotropia, uso final e custo. Este trabalho teve como objetivo analisar a secagem de um grão de trigo a fim de saber sobre seu comportamento sob diversas condições ambientais para um eventual controle refinado das condições de secagem. Nesta direção, um modelo de termodinâmica de processos irreversíveis composto de um sistema de duas equações diferenciais parciais não-lineares, com a temperatura e o teor de água de equilíbrio como variáveis dependentes, foi resolvido. O método de solução numérica consistiu de uma forma modificada do esquema de funções de base radial cúbica. Resolveu-se o modelo em coordenadas esféricas e cilíndricas, com condições de contorno convectivas. Soluções com condições de contorno de Dirichlet e coordenadas esféricas também foram investigadas e comparadas com as outras soluções. Os resultados mostraram excelente acurácia dos modelos propostos, apontando que o uso de condições de contorno de Dirichlet pode levar a altos gradientes hídricos e térmicos na superfície. Apresentou-se uma breve análise a respeito do efeito de forma e anisotropia sobre o modelo esférico isotrópico proposto. Apresentaram-se e discutiram-se, em detalhes, resultados gráficos completos para quatro diferentes condições de secagem.

PALAVRAS-CHAVE: termodinâmica irreversível, modelagem de secagem, secagem de um único grão de trigo

***IRREVERSIBLE THERMODYNAMICS ANALYSIS OF SINGLE
KERNEL WHEAT DRYING: MODELING AND SIMULATION OF
THE INHERENT PHYSICAL PHENOMENA***

ABSTRACT

Cereal grains are useful to mankind and naturally complex. They are anisotropic, thermosensitive, biologically degradable under adverse psychrometric variations. Proper drying can minimize insect attack, mold growth, quality decay and undesired effects of environmental conditions. The number of variables that define drying is long and include, among others, product thermophysical properties, shape, biological composition and thermal and water content behavior, degree of anisotropy, end use and cost. This work aimed at analyzing wheat kernel drying as a means to know about its behavior under several environmental conditions for an eventual fine control of drying conditions. In this direction, an irreversible thermodynamics model composed of a system of two nonlinear partial differential equations, with temperature and equilibrium moisture content as dependent variables was solved. The numerical solution method consisted of a modified form of cubic radial basis functions scheme. The model was solved in spherical and cylindrical coordinates, with convective boundary conditions. Solutions with Dirichlet boundary conditions and spherical coordinates were also investigated and compared with the other solutions. The results showed excellent accuracy of the proposed models, pointing out that the use of Dirichlet boundary conditions may lead to high surface thermal and hydro gradients. A brief analysis is presented on the effect of shape and anisotropy on the proposed spherical isotropic model. Full graphical results for four different drying conditions are presented and discussed in detail.

KEYWORDS: irreversible thermodynamics, drying modeling, single wheat kernel drying

2.1. INTRODUÇÃO

Processos de secagem são operações unitárias importantes nas indústrias química, metalúrgica, de papel, de madeira, de alimentos, de produtos agrícolas, de tratamento de resíduos, têxtil, dentre outras. Os processos de secagem têm sido amplamente estudados por consumir muita energia e ter um efeito decisivo na qualidade dos produtos secos (MUJUMDAR, 2007; MUJUMDAR e LAW, 2010).

Secagem é um processo importante na engenharia de processamento de alimentos e grãos e é um meio antigo de conservação de alimentos. O objetivo básico da secagem de alimentos é reduzir o teor de água do produto a níveis considerados seguros. Durante a secagem, ocorrem modificações tanto nas características físicas quanto nas características químicas e biológicas dos alimentos. Neste contexto, a secagem serve, também, para minimizar o desenvolvimento de microorganismos, de insetos e de reações indesejáveis que, normalmente, causam a deterioração dos produtos. O processo de secagem também ajuda a manter a estabilidade mecânica (resistência) do produto e diminuir o seu peso e custo de transporte (BROOKER et al., 1992; JAYAS e GHOSH, 2006; LÓPEZ et al., 2008; GHOSH et al., 2008b; NAWIRSKA et al., 2009).

Sob o ponto de vista físico, secagem é um processo que retira parte da umidade contida no produto por meio de transferência simultânea de calor e massa entre o produto e o ar de secagem. As taxas às quais estas transferências ocorrem dependem principalmente da estrutura e composição do produto a ser seco e das condições externas do meio de secagem tais como temperatura, umidade e velocidade do ar. A análise da transferência de calor e massa é complexa no caso de materiais biológicos e, mais especificamente, de grãos cereais. Os grãos são produtos higroscópicos capilares porosos cujos poros são preenchidos com água e ar. A variedade, maturidade fisiológica durante a colheita, secagem e reumidecimento no campo, geometrias complexas e anisotropia estão entre os fatores que aumentam a complexidade da análise da transferência de calor e massa nos grãos (FORTES et al., 1981; BROOKER et al., 1992; CAVALCANTI MATA et al., 2006).

A simulação e posterior análise de secagem de grãos em camada espessa têm por base, em geral, equações de secagem de camada fina de grãos. Portanto, a

acurácia do modelo de camada espessa depende da exatidão do modelo de secagem de camada fina utilizado. O conceito de camada fina é ainda mais necessário, uma vez que é usado na avaliação de tensões hídricas e térmicas que podem originar fissuras e eventual comprometimento da qualidade de grãos durante o processo de secagem (WONGWISES e THONGPRASERT, 2000; BASUNIA e ABE, 2001; YANG et al., 2002).

Assim, a definição do termo camada fina é importante, mas, não é óbvia. Ao se efetuarem simulações de secagem de grãos em camada espessa, pelos métodos numéricos disponíveis, deve-se discretizar espacialmente a massa de grãos em camadas finas de espessura ou tamanho geométrico tal que:

- Os requisitos de acurácia numérica das soluções a serem obtidas sejam satisfeitos, não havendo necessidade de maior refinamento de malhas ou volumes da camada;
- Não haja diferença de comportamento termodinâmico ou de transporte de massa, momentum ou energia entre quaisquer grãos da camada fina;

Por conseqüência, a camada fina deve ter comportamento idêntico ao de um grão individual, para todos os efeitos de análise ou simulação.

Há muitos trabalhos na literatura que apresentam modelos matemáticos para descrever a cinética de secagem de grãos em camada fina. Em geral, estes modelos são classificados como empíricos, semi-teóricos ou semi-empíricos e teóricos.

Os modelos teóricos descrevem o fenômeno de secagem levando em consideração as condições externas como temperatura, velocidade do ar, teor de água inicial, umidade relativa do ar, dentre outras; em conjunto com os mecanismos de transporte de água no interior do produto (BROOKER et al., 1992; PABIS, 1998; CAVALCANTI MATA et al., 2006). Como os modelos teóricos têm por base mecanismos de transporte de água no interior do produto e a termodinâmica de processos irreversíveis, tendem a refletir de forma mais adequada a física do processo de migração de água e da distribuição de temperatura no interior de materiais higroscópicos capilares porosos. Por esses motivos, os modelos teóricos se aplicam a problemas com condições de contorno e propriedades variáveis. Entretanto, seu uso requer o emprego de técnicas computacionais envolvendo análise

numérica complexa, pois não há soluções analíticas para a maioria dos modelos matemáticos resultantes.

Os principais modelos teóricos de camada simples incluem: os modelos mecanísticos como os modelos de difusão de líquido e ou, de difusão de vapor (PHILIP e De VRIES, 1957; PARTI, 1993; JIA et al., 2000; GASTÓN et al., 2002; YANG et al., 2002; WU et al., 2004; BENNAMOUN e BELHAMRI, 2006; GHOSH et al., 2008a e 2008b) e os modelos originados da termodinâmica de processos irreversíveis e ou, modelos mistos (LUIKOV, 1966; FORTES et al., 1981; HAGHIGHI et al., 1990; IRUDAYARAJ et al., 1992; KULASIRI e SAMARASINGHE, 1996; OLIVEIRA e LIMA, 2009).

Ghosh et al. (2008a,b) presumiram ser válido usar no modelo de secagem:

- as equações originais fenomenológicas de Fick e de Fourier, com coeficientes constantes (condutividade térmica e difusividade de massa), mesmo quando aplicadas a produtos biológicos, cujas propriedades físicas dependem da temperatura e do teor de água.
- expressões empíricas clássicas para coeficientes de transporte de calor e massa para a simulação de secagem.
- o modelo de difusão de líquido.

Os modelos semi-teóricos têm, geralmente, por base, a lei de resfriamento de Newton aplicada à transferência de massa. Eles tentam um compromisso entre teoria e facilidade de uso. Os exemplos mais clássicos de modelos semi-teóricos são os modelos de Page e de Lewis (PARTI, 1993; SINÍCIO et al., 1995; WONGWISES e THONGPRASERT, 2000; BASUNIA e ABE, 2001; ABALONE et al., 2006; CIHAN et al., 2007; KASHANINEJAD et al., 2007). Mohapatra e Rao (2005) usaram vários modelos semi-teóricos e empíricos para estudar as características de secagem do trigo parboilizado.

Os modelos empíricos não levam em consideração os fundamentos da termodinâmica pertinentes aos processos de secagem. Assim, eles negligenciam a física do processo de secagem e fornecem uma relação direta entre o tempo de secagem e o teor de água médio do produto (PARTI, 1993; CAVALCANTI MATA et al., 2006). Exemplos de modelos empíricos são os modelos de Thompson e de Wang-Sing (MOHAPATRA e RAO, 2005; ABALONE et al., 2006; CIHAN et al.,

2007; KASHANINEJAD et al., 2007). Os modelos empíricos, por não refletirem a física do problema de migração interna de água e de vapor (FORTES e OKOS, 1980; SANDER, 2007), ou seja, por não serem acoplados, somente podem ser usados, com possíveis restrições, para interpolações dentro das condições experimentais para as quais foram desenvolvidos. Há outro problema associado ao uso de modelos empíricos em processos de tratamento térmico: os parâmetros dos modelos ditos empíricos ou teóricos simplificados são, geralmente, obtidos sob condições constantes de secagem. Como é bem conhecido (CRANK, 1979), se as condições iniciais ou de contorno se modificarem, não haverá garantias para o comportamento do modelo, pois, ele se aplica adequadamente apenas às condições para as quais foi desenvolvido.

De particular importância para este trabalho, FORTES (1978) e FORTES et al. (1981) propuseram uma teoria de secagem de produtos higroscópicos capilares porosos, baseada na termodinâmica de processos irreversíveis e na abordagem mecanística. O modelo tem por base o teorema de Onsager e prescinde de especificação de mecanismos de secagem. A força motriz de secagem, obtida dos conceitos termodinâmicos envolvidos é o gradiente de teor de água de equilíbrio local. O modelo resultante foi aplicado à análise de secagem de grãos de milho e trigo (considerados esféricos) (FORTES et al., 1981; FORTES e OKOS 1981b) e a cilindros de milho extrudado (FORTES e OKOS, 1981a). Oliveira e Lima (2009) fizeram uma análise numérica do transporte simultâneo de calor e massa (líquido e vapor) em corpos de formato elipsoidal, mais precisamente, esferoidal prolato, como o grão de trigo. Os autores utilizaram o modelo de Fortes e Okos (FORTES et al., 1981) e consideraram condições de contorno do terceiro tipo e propriedades termofísicas variáveis com as condições do ar de secagem e ou, teor de água do sólido.

Os modelos utilizados na análise de secagem de grãos consistem em um conjunto de equações diferenciais parciais (EDP) não-lineares. Muitas vezes, utilizam-se os métodos numéricos tradicionais como elementos finitos, diferenças finitas e volumes finitos para resolver esses problemas (HAGHIGHI e AGUIRRE, 1999; JIA et al., 2000; OLIVEIRA e LIMA, 2009). Esses métodos utilizam esquemas de interpolação local e requerem um complexo procedimento de

subdivisão de malhas, principalmente quando aplicados a problemas bi e tridimensionais e com geometrias complexas (FRANÇA et al., 1994; KANSA e HON, 2000; DEHGHAN e TATARI, 2006).

Mais recentemente, o método de funções de base radial (FBR) começou a ganhar a preferência de muitos pesquisadores, uma vez que é um método sem malha e pode ser facilmente estendido a problemas multidimensionais (SARRA, 2005; ZHANG, 2006; DRISCOLL e HERYUDONO, 2007; SANTOS et al, 2009). O método de FBR tem sido utilizado para solucionar problemas de interpolações complexas, bem como para resolver numericamente equações diferenciais parciais (BROWN et al., 2005). A técnica teve uma rápida expansão devido à sua alta acurácia quando comparada com outras técnicas numéricas (SARRA, 2005). No entanto, na literatura revisada, não há qualquer trabalho sobre a aplicação do método de FBR para resolver o sistema de equações diferenciais parciais não-lineares do tipo associado aos modelos teóricos de secagem de grãos ou alimentos.

Este trabalho aborda aspectos fundamentais da simulação de secagem, não disponíveis na literatura anterior. De fato, ele se justifica pelos seguintes motivos:

1. Fortes et al. (1981) aplicaram o seu modelo presumindo condições de contorno de Dirichlet devido à suposição de que a superfície dos grãos de trigo atingia o teor de água de equilíbrio dentro de 3 a 5 min após o início da secagem. Esta hipótese pode ter causado uma super ou subestimação da condutividade do líquido e do vapor e perfil de temperatura e de teor de água com declividades mais elevadas.
2. A solução numérica de Oliveira e Lima (2009), utilizando coordenadas esféricas prolatas e o método de volumes finitos, foi coerente quando aplicada a uma condição de secagem. No entanto, os autores não verificaram a validade do seu método quando aplicado a toda a faixa de dados de secagem apresentados por Fortes et al. (1981). Além disso, efetuaram simulações levando em conta apenas uma dimensão fixa do grão de trigo, ou seja, apenas um conjunto de valores dos eixos; falta avaliar o efeito da excentricidade sobre os valores estimados das propriedades do grão de trigo.

3. Como mencionado, o trabalho de Ghosh et al. (2008a) apresentou um modelo simples e aplicou-o a apenas uma condição de secagem.

Com base na análise exposta, os principais objetivos deste trabalho são:

1. Reavaliar o modelo do processo de secagem de camada fina utilizando a abordagem proposta por Fortes e Okos (1981).
2. Modelar e estudar por meio de soluções numéricas, em coordenadas esféricas e cilíndricas, o processo de secagem em camada fina, fazendo uso do método de Funções de Base Radial (FBR) Cúbica.
3. Implementar um método simples e eficiente de solução adaptativa temporal de equações diferenciais parciais, aplicado junto com a técnica de FBR para a solução dos problemas não lineares.
4. Comparar os resultados obtidos com os testes experimentais apresentados por Fortes et al. (1981) para validar os resultados da modelagem e técnicas de solução propostas.

2.2. METODOLOGIA

2.2.1. Modelo Físico-Matemático de Secagem em Camada Fina

Analisou-se o problema de transferência simultânea de calor e massa no interior de um grão de trigo com suposto formato esférico considerando coordenadas esféricas e cilíndricas a fim de simular o processo de secagem em camada fina.

O modelo proposto por Fortes (1978) e Fortes et al. (1981) tem por base a termodinâmica de processos irreversíveis e conceitos mecanísticos. As seguintes equações de transferência de calor e massa aplicáveis a meios higroscópicos capilares-porosos descrevem o modelo proposto pelos autores:

- Fluxo de líquido:

$$\bar{J}_l = -\rho_l K_l R_v \ln H \cdot \nabla T - \rho_l K_l \frac{R_v T}{H} \frac{\partial H}{\partial M} \nabla M \quad (1)$$

- Fluxo de vapor:

$$\vec{J}_v = -K_v \left(\rho_{v0} \frac{\partial H}{\partial T} + H \frac{d\rho_{v0}}{dT} \right) \cdot \nabla T - K_v \rho_{v0} \frac{\partial H}{\partial M} \nabla M \quad (2)$$

- Fluxo de calor:

$$\vec{J}_q = -K_T \cdot \nabla T - \left[\rho_l K_l R_v \ln H + K_v \left(\rho_{v0} \frac{\partial H}{\partial T} + H \frac{d\rho_{v0}}{dT} \right) \right] \frac{R_v T^2}{H} \frac{\partial H}{\partial M} \nabla M \quad (3)$$

em que M é o teor de água (base seca), T é a temperatura absoluta [K], H é a umidade relativa (decimal), K_l é a condutividade líquida [s], K_v é a condutividade de vapor [$m^2 \cdot s^{-1}$], K_T é condutividade térmica [$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$], R_v é a constante universal do gás aplicada ao vapor [$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$], ρ_l é a massa específica do líquido [$kg \cdot m^{-3}$], ρ_{v0} é a massa específica de vapor de saturação [$kg \cdot m^{-3}$].

- Conservação de massa:

$$\rho_s \frac{\partial M}{\partial t} = -\nabla \cdot (\vec{J}_l + \vec{J}_v) \quad (4)$$

em que ρ_s é a massa específica do sólido (produto seco) [$kg \cdot m^{-3}$] e t é o tempo [s].

- Conservação de energia:

$$\rho_s c_b \frac{\partial T}{\partial t} - \rho_s L_w \frac{\partial M}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_q - L_v \nabla \cdot \vec{J}_v \quad (5)$$

em que c_b é o calor específico do produto [$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$], L_w é o calor diferencial específico da água no grão [$J \cdot kg^{-1}$], L_v é o calor específico de vaporização da água no grão [$J \cdot kg^{-1}$].

De acordo com Fortes et al. (1981):

1. As equações acima não necessitam de mecanismos específicos para a migração de água.
2. A força motriz isotérmica para ambos os movimentos de líquido e de vapor no interior do grão é tomada como gradiente do teor de água de equilíbrio, como definido por uma isoterma. Assim, a água pode migrar de regiões de menor para regiões de maior teor de água, desde que o efeito do

gradiente do teor de água de equilíbrio seja dominante e favoreça este movimento.

3. Conforme expresso pela Equação (1), a umidade na fase líquida pode mover-se de regiões mais frias para mais quentes.
4. O calor de adsorção e o calor latente de vaporização ou condensação da água dentro do meio poroso são considerados na Equação (5).
5. Presume-se que o meio é isotrópico, contínuo e que o encolhimento é negligenciável; estuda-se, portanto, uma esfera com propriedades médias iguais à de um grão de trigo.
6. Despreza-se o movimento convectivo (global) de água dentro do meio.

No presente trabalho presume-se, também, que não haja um caminho preferencial para a migração de água.

As condições iniciais e de contorno para secagem convectiva são apresentadas a seguir.

Em $t = 0$, tem-se:

$$M(r,0) = M_0 \text{ e } T(r,0) = T_0 \quad (6)$$

Em $r = 0$, não há fluxo de massa e calor e, portanto, tem-se:

$$J_l + J_v = 0 \quad (7)$$

$$J_q = 0 \quad (8)$$

Em $r = R$, tem-se:

$$J_l + J_v = h_m(M - M_e) \quad (9)$$

$$J_q - L_v J_l = h_T(T_s - T_a) \quad (10)$$

em que h_m é o coeficiente de transferência de massa convectivo [$s.m^{-1}$], M é o teor de água (base seca) e M_e é o teor de água de equilíbrio (decimal), h_T é o coeficiente de transferência de calor convectivo [$W.m^2.K^{-1}$], T_s é a temperatura na superfície [K] e T_a é a temperatura do ar ambiente [K].

No caso de condições de contorno fixas (Dirichlet), basta fornecer os valores locais de M e T , substituindo-se, assim, as Equações (9) e (10).

Cabe ressaltar que a condição de contorno na superfície do grão para a equação de conservação de massa, Equação (9), utilizada no presente trabalho é diferente da utilizada por Fortes et al. (1981). No trabalho de Fortes et al. (1981), a condição de contorno na superfície do grão dependia da diferença entre pressão de vapor na superfície do grão e da pressão de vapor da água no ar ambiente, enquanto que neste trabalho ela depende da diferença entre o teor de água na superfície do grão e o teor de água de equilíbrio.

Propriedades Físicas do Grão de Trigo

Trigo é colhido geralmente com teor de água entre 18 e 20% b.u. (base úmida) e seco até 14% b.u., para armazenamento de curto prazo (6 a 12 meses) e 13% b.u., ou menos, para armazenamento de longo prazo (mais de 1 ano) (BROOKER et al., 1992). A fim de garantir a qualidade de um determinado tipo de grão, deve-se manter a temperatura de secagem abaixo de um valor máximo que varia de acordo com o seu uso final. No caso específico de trigo utilizado como semente, comercialmente ou para alimentação de animais, as temperaturas de secagem máximas são de 43°C, 60°C e 82°C, respectivamente (JAYAS e GHOSH, 2006).

A Tabela 2.1 contém as propriedades físicas de grãos de trigo, usadas para obter a solução numérica das Equações (1) a (10). Com referência a essa tabela, K_{ar} é a condutividade térmica do ar, D_p é o diâmetro equivalente; D_{atm} é o coeficiente de difusão molecular do vapor d'água no ar; Re , Pr e Sc são os números de Reynolds, Prandtl e Schmidt, respectivamente.

Tabela 2.1. Propriedades Físicas dos Grãos de Trigo

Propriedade	Expressão ou Valor	Unidade	Referência
Calor de vaporização da água no grão de trigo	$L_v = L_0 + L_w$	J.kg ⁻¹	Fortes (1978)
Calor diferencial específico da água no grão	$L_w = \frac{R_v T^2}{H} \frac{\partial H}{\partial T}$	J.kg ⁻¹	Fortes (1978), Fortes et al. (1981)
Calor de vaporização da água livre	$L_0 = (3,11.10^6) - (2,38.10^3)T$	J.kg ⁻¹	Brooker (1967)
Massa específica do vapor de saturação	$\rho_{v0} = \frac{2,54.10^8}{T} e^{-5200/T}$	kg.m ⁻³	Baladi (1975)
Equação de Isotermas – Equação de Henderson Modificada	$H = 1 - \exp(-5869.T^{-0,7750}.M^{5203.T^{1,363}})$	decimal	Fortes et al. (1981)
Massa específica do sólido (produto seco)	$\rho_s = 1265$	kg.m ⁻³	Fortes et al. (1981)
Calor específico do produto	$C_b = (1396 + 2688.M)/(1 - M)$	J.kg ⁻¹ K ⁻¹	Kazarian e Hall (1965)
Raio do grão de trigo suposto esférico	$R = 0,181$	cm	Fortes et al. (1981)
Condutividade Térmica	$K_T = (0,1170 - 0,003808.M)/(1 - M)$	W.m ⁻¹ .K ⁻¹	Kazarian e Hall (1965)
Condutividade de Líquido	$K_l = k_1^*.H^3 \cdot \exp(-1331/T)$	s	*
Condutividade de Vapor	$K_v = k_v^*(T - 273,15)^{0,4100} \cdot (H^{0,1715} - H^{1,1715})$	m ² .s ⁻¹	*
Coefficiente de transferência de calor	$h_T = \frac{K_{ar}}{D_p} (2,0 + 0,6.Re^{1/2} \cdot Pr^{1/3})$	W.m ⁻² .K ⁻¹	Ranz e Marshall (1952a e b)
Coefficiente de transferência de massa	$h_m = h_m^* \frac{D_{atm}}{R_v \cdot T \cdot D_p} (2,0 + 0,6.Re^{1/2} \cdot Sc^{1/3})$	s/m	*

* Este trabalho: Equações de Fortes et al. (1981) modificadas

Este trabalho requer obter as expressões para as condutividades de líquido e de vapor e o coeficiente de transferência de massa; elas foram obtidas a partir de ajustes entre os valores experimentais e os numéricos do teor de água. As expressões tiveram por base as expressões reportadas por Fortes et al. (1981). Os coeficientes k_l^* , k_v^* e h_m^* são parâmetros de secagem dependentes, em princípio, dos valores iniciais de teor de água e velocidade e umidade relativa do ar de secagem.

A Tabela 2.2 contém as condições experimentais de secagem utilizadas nas simulações.

Tabela 2.2. Condições experimentais de Secagem

Temperatura de bulbo seco (°C)	Umidade Relativa (%)	Teor de Água Inicial (decimal)	Velocidade do Ar (m/s)
26,7	41,2	0,2	1,4
47,0	33,8	0,211	1,5
67,5	13,3	0,256	1,61
87,8	5,6	0,211	1,71

Fonte: Fortes et al. (1981)

Equações de Secagem

Podem-se escrever os balanços de massa, Equação (4), e de energia, Equação (5) em coordenadas esféricas e coordenadas cilíndricas, considerando simetria axial.

Equação de balanço de massa em coordenadas esféricas:

$$\rho_s \frac{\partial M}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{IVT} \cdot r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{IVM} \cdot r^2 \frac{\partial M}{\partial r} \right) \quad (11)$$

Equação de balanço de energia em coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned} \rho_s c_b \frac{\partial T}{\partial t} = & \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{qT} \cdot r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + L_v \cdot \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{vT} \cdot r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{qM} \cdot r^2 \frac{\partial M}{\partial r} \right) + \\ & + L_v \cdot \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{vM} \cdot r^2 \frac{\partial M}{\partial r} \right) + \rho_s L_w \frac{\partial M}{\partial t} \end{aligned} \quad (12)$$

Equação de balanço de massa em coordenadas cilíndricas:

$$\rho_s \frac{\partial M}{\partial t} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{IVT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + K_{IVM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{IVT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + K_{IVM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right) \quad (13)$$

Equação de balanço de energia em coordenadas cilíndricas:

$$\begin{aligned} \rho_s c_b \frac{\partial T}{\partial t} = & \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{qT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{vT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{qM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right) + \\ & + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{vM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{qT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) + L_v \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{vT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{qM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right) + \\ & + L_v \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{vM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right) + \rho_s L_w \frac{\partial M}{\partial t} \end{aligned} \quad (14)$$

2.2.2. Metodologia Numérica

Resolveu-se o conjunto de equações (1) a (10) por meio do método de funções de base radial modificado. Os resultados foram obtidos utilizando o programa computacional Mathcad, uma linguagem de programação matemática simbólica.

Em todos os esquemas numéricos apresentados a seguir, aplicou-se a regra de L'Hospital no caso das singularidades em $r = 0$.

2.2.2.1. Método de Funções de Base Radial Clássico

Ao usar o método FBR utilizam-se combinações lineares de uma função de base $\phi(r)$ ¹ de uma variável, expandida sobre um dado centro de dados dispersos $x_i \in \mathfrak{R}^d, i = 1, \dots, N$ para aproximar uma função desconhecida $M(x, t)$ por

$$M(x, t) = \sum_{j=1}^N \lambda_j(t) \phi(r_j) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \phi(\|x - x_j\|) \quad (15)$$

¹ Neste trabalho, r refere-se à coordenada radial e à norma euclidiana, sem prejuízo de compreensão.

em que $r_j = \|x - x_j\|$ é a norma euclidiana e λ_j são os coeficientes a serem determinados.

As funções de base radial, mais usuais, são (SARRA,2005; FASSHAUER, 2007):

$$\textit{Thin plate spline} - \textit{TPS}: \quad \phi(r_j) = r_j^4 \log(r_j) \quad (16)$$

$$\textit{Multiquádrica} - \textit{MQ}: \quad \phi(r_j) = \sqrt{c^2 + r_j^2} \quad (17)$$

$$\textit{Cúbica}: \quad \phi(r_j) = r_j^3 \quad (18)$$

$$\textit{Gaussiana}: \quad \phi(r_j) = e^{-c^2 r_j^2} \quad (19)$$

Deve-se notar que os pontos de malha, aqui definidos por r_j , não requerem qualquer regra formal, exceto a definição dos contornos. O método, então, não requer malhas, ou seja, é “sem malha”. Adicionalmente, no caso da extensão óbvia para várias dimensões, o método só requer a colocação de pontos em contornos importantes.

Neste trabalho, utilizou-se apenas a FBR Cúbica, devido à sua simplicidade e acurácia comprovada para outros tipos de problemas e devido à dificuldade associada à escolha de bons valores para o parâmetro de forma c , que depende do tipo de problema (GOTO et al., 2007, FASSHAUER, 2007).

Aplicação do Método de Funções de Base Radial Clássico à Equação de Balanço de Massa em Coordenadas Esféricas

Como se mostra a seguir, a metodologia de FBR para obter a solução numérica da equação de balanço de massa dada por Fortes e Okos (1981) requer discretização da equação original, Equação (15). Desse modo, a equação de balanço de massa em coordenadas esféricas, considerando simetria esférica, mostrada acima, Equação (11), pode ser discretizada usando o teorema do valor médio (HOFFMAN, 1992; SANTOS et al., 2009):

$$\frac{\partial M(r, t)}{\partial t} = f(r, t) \approx (1 - \Theta) \cdot f(r_t, t) + \Theta \cdot f(r_{t+\Delta t}, t + \Delta t) \quad \text{para } 0 \leq \Theta \leq 1 \quad (20)$$

Na Equação (20), valores de Θ iguais a 0, 0,5 ou 1 correspondem aos esquemas de Euler explícito, Crank-Nicholson e Euler implícito, respectivamente.

Assim, a forma discretizada da Equação (11) torna-se:

$$\begin{aligned} M(r, t^n) - M(r, t^n + \Delta t) + \Delta t(1 - \Theta) \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \nabla [K_{LVT} \cdot r^2 \cdot \nabla T] + \frac{1}{r^2} \nabla [K_{LVM} \cdot r^2 \cdot \nabla M(r, t)] \right]^{t^n} + \\ + \Delta t \Theta \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \nabla [K_{LVT} \cdot r^2 \cdot \nabla T] + \frac{1}{r^2} \nabla [K_{LVM} \cdot r^2 \cdot \nabla M(r, t)] \right]^{t^n + \Delta t} = 0 \end{aligned} \quad (21)$$

Nesta equação, n indica o enésimo plano de tempo e $\nabla = \frac{\partial}{\partial r}$. Definindo

$M(r, t^n) = M^n$ e $M(r, t^n + \Delta t) = M^{n+1}$ pode-se escrever a Equação (21) na forma:

$$\begin{aligned} \left[M^{n+1} - \alpha \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \nabla [K_{LVT} \cdot r^2 \cdot \nabla T] + \frac{1}{r^2} \nabla [K_{LVM} \cdot r^2 \cdot \nabla M^{n+1}] \right] \right] = \\ = \left[M^n + \beta \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \nabla [K_{LVT} \cdot r^2 \cdot \nabla T] + \frac{1}{r^2} \nabla [K_{LVM} \cdot r^2 \cdot \nabla M^n] \right] \right] \end{aligned} \quad (22)$$

em que $\alpha = \Theta \cdot \Delta t$ e $\beta = (1 - \Theta) \Delta t$. Por aproximação, neste trabalho, na Equação (22) e nas seguintes, a não explicitação do tempo implica em cálculo dos parâmetros ou expressões no tempo n ou t^n (ou seja, efetua-se uma avaliação explícita). Definindo os dois novos operadores, H_{left} e H_{right} por:

$$\begin{aligned} H_{\text{left}} &= \left[M^{n+1} - \alpha \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \nabla [K_{LVT} \cdot r^2 \cdot \nabla T] + \frac{1}{r^2} \nabla [K_{LVM} \cdot r^2 \cdot \nabla M^{n+1}] \right] \right], \\ H_{\text{right}} &= \left[M^n + \beta \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \nabla [K_{LVT} \cdot r^2 \cdot \nabla T] + \frac{1}{r^2} \nabla [K_{LVM} \cdot r^2 \cdot \nabla M^n] \right] \right] \end{aligned} \quad (23)$$

a Equação (22) se torna:

$$\sum_{j=1}^N \lambda_j^{n+1} H_{\text{left}} \phi(r_{ij}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j^n H_{\text{right}} \phi(r_{ij}) \quad \text{para } i = 1 \dots N \quad (24)$$

A Equação (24) é um sistema de equações lineares, cuja solução permite obter os coeficientes desconhecidos, λ_j^{n+1} , a partir dos valores conhecidos de λ_j^n no passo de tempo anterior. A partir destes coeficientes, pode-se obter $M(r,t)$ por meio da Equação (15).

Similarmente, pode-se obter a forma discretizada da equação de balanço de massa em coordenadas cilíndricas e, assim, obter os novos operadores H_{left} e H_{right} . Os novos operadores quando aplicados à Equação (24), geram outro sistema de equações lineares de FBR equivalente à forma discretizada da Equação (13).

Aplicação do Método de Funções de Base Radial Clássico à Equação de Balanço de Energia em Coordenadas Esféricas

Após manipulações algébricas, a equação de balanço de energia dada por Fortes e Okos (1981) em coordenadas esféricas, Equação (12), desenvolvida por meio do teorema do valor médio, leva a:

$$\begin{aligned} T^{n+1} - \alpha \cdot \frac{1}{\rho_s \cdot c_b} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \nabla [K_{qT} \cdot r^2 \cdot \nabla T^{n+1}] + L_v \cdot \frac{1}{r^2} \nabla [K_{vT} \cdot r^2 \cdot \nabla T^{n+1}] + \frac{1}{r^2} \nabla [K_{qM} \cdot r^2 \cdot \nabla M] + \right. \\ \left. + L_v \cdot \frac{1}{r^2} \nabla [K_{vM} \cdot r^2 \cdot \nabla M] + \rho_s \cdot L_w \cdot \frac{\partial M}{\partial t} \right] = \\ = T^n + \beta \cdot \frac{1}{\rho_s \cdot c_b} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \nabla [K_{qT} \cdot r^2 \cdot \nabla T^n] + L_v \cdot \frac{1}{r^2} \nabla [K_{vT} \cdot r^2 \cdot \nabla T^n] + \frac{1}{r^2} \nabla [K_{qM} \cdot r^2 \cdot \nabla M] + \right. \\ \left. + L_v \cdot \frac{1}{r^2} \nabla [K_{vM} \cdot r^2 \cdot \nabla M] + \rho_s \cdot L_w \cdot \frac{\partial M}{\partial t} \right] \end{aligned} \quad (25)$$

Os operadores H_{left} e H_{right} são, agora, definidos por:

$$\begin{aligned}
 H_{\text{left}} &= T^{n+1} - \alpha \cdot \frac{1}{\rho_s \cdot c_b} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \nabla [K_{qT} \cdot r^2 \cdot \nabla T^{n+1}] + L_v \cdot \frac{1}{r^2} \nabla [K_{vT} \cdot r^2 \cdot \nabla T^{n+1}] + \frac{1}{r^2} \nabla [K_{qM} \cdot r^2 \cdot \nabla M] + \right. \\
 &\quad \left. + L_v \cdot \frac{1}{r^2} \nabla [K_{vM} \cdot r^2 \cdot \nabla M] + \rho_s \cdot L_w \cdot \frac{\partial M}{\partial t} \right] \\
 H_{\text{right}} &= T^n + \beta \cdot \frac{1}{\rho_s \cdot c_b} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \nabla [K_{qT} \cdot r^2 \cdot \nabla T^n] + L_v \cdot \frac{1}{r^2} \nabla [K_{vT} \cdot r^2 \cdot \nabla T^n] + \frac{1}{r^2} \nabla [K_{qM} \cdot r^2 \cdot \nabla M] + \right. \\
 &\quad \left. + L_v \cdot \frac{1}{r^2} \nabla [K_{vM} \cdot r^2 \cdot \nabla M] + \rho_s \cdot L_w \cdot \frac{\partial M}{\partial t} \right] \quad (26)
 \end{aligned}$$

Finalmente, os novos operadores H_{left} e H_{right} , quando aplicados à Equação (24), geram outro sistema de equações lineares de FBR equivalente à forma discretizada da Equação (12).

Similarmente, pode-se obter a forma discretizada da equação de balanço de energia em coordenadas cilíndricas e, assim, obter os novos operadores H_{left} e H_{right} . Os novos operadores quando aplicados à Equação (24), geram outro sistema de equações lineares de FBR equivalente à forma discretizada da Equação (14).

2.2.2.2. Método de Funções de Base Radial Modificado

Aplicação do Método de FBR Modificado à Equação de Balanço de Massa em Coordenadas Esféricas

A modificação relevante no método de FBR clássico proposta em trabalho anterior (SANTOS et al., 2011) permitiu resolver as equações de balanço de massa e de energia de maneira muito mais eficiente que a abordagem tradicional.

O algoritmo proposto para obter, pelo método de FBR, os diversos termos e, assim, uma aproximação numérica para a solução da equação de balanço de massa, consiste em avaliar ou obter sequencialmente:

1. $\nabla M = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_2$ e $\nabla T = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_1$ (27)

$$2. \quad \text{KM} = (\mathbf{K}_{\text{LVM}} \cdot r^2 \cdot \nabla M) \text{ e } \text{KT} = (\mathbf{K}_{\text{LVT}} \cdot r^2 \cdot \nabla M) \quad (28)$$

duas funções de interpolação λ_{kM} e λ_{kT} , a partir da relação de

$$3. \quad \text{interpolação entre } \phi \text{ e KM e } \phi \text{ e KT, respectivamente:} \\ \text{KM} = \phi \cdot \lambda_{\text{kM}} \text{ e } \text{KT} = \phi \cdot \lambda_{\text{kT}} \quad (29)$$

$$4. \quad \text{Pr ov1} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{\text{kM}} \text{ e } \text{Pr ov2} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{\text{kT}} \quad (30)$$

$$5. \quad \text{H}_{\text{left}} = \left[M^{n+1} - \alpha \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \text{Pr ov2} + \frac{1}{r^2} \text{Pr ov1}^{n+1} \right] \right] = \\ = \text{H}_{\text{right}} = \left[M^n + \beta \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \text{Pr ov2} + \frac{1}{r^2} \text{Pr ov1}^n \right] \right] \quad (31)$$

Finalmente, os novos operadores, H_{left} e H_{right} , são aplicados à Equação (24),

6. gerando outro sistema de equações lineares FBR que é a forma discretizada proposta para a Equação (11).

Deve-se notar que:

$$dMdt = \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \text{Pr ov2} + \frac{1}{r^2} \text{Pr ov1}^n \right] \quad (32)$$

Aplicação do Método de FBR Modificado à Equação de Balanço de Energia em Coordenadas Esféricas

No caso da equação relativa ao transporte de energia, o algoritmo proposto para obter os diversos termos e, assim, uma aproximação numérica para a solução da equação de balanço de energia, consiste em avaliar ou obter seqüencialmente:

$$1. \quad \nabla T = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_1 \text{ e } \nabla M = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_2 \quad (33)$$

$$2. \quad \text{KT1} = (\mathbf{K}_{\text{qT}} \cdot r^2 \cdot \nabla T), \text{KT2} = (\mathbf{K}_{\text{vT}} \cdot r^2 \cdot \nabla T), \text{KM1} = (\mathbf{K}_{\text{qM}} \cdot r^2 \cdot \nabla M) \text{ e} \\ \text{KM2} = (\mathbf{K}_{\text{vM}} \cdot r^2 \cdot \nabla M) \quad (34)$$

quatro funções de interpolação λ_{kT1} , λ_{kT2} , λ_{kM1} e λ_{kM2} , a partir da relação

3. de interpolação entre ϕ e KT1, ϕ e KT2, ϕ e KM1 e ϕ e KM2, respectivamente:

$$KT1 = \phi \cdot \lambda_{kT1}, KT2 = \phi \cdot \lambda_{kT2}, KM1 = \phi \cdot \lambda_{kM1} \text{ e } KM2 = \phi \cdot \lambda_{kM2} \quad (35)$$

$$4. \quad \text{Pr ovT1} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kT1}, \text{ Pr ovT2} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kT2}, \text{ Pr ovM1} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kM1} \text{ e} \quad (36)$$

$$\text{Pr ovM2} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kM2}$$

$$5. \quad H_{\text{left}} = T^{n+1} - \alpha \cdot \frac{1}{\rho_s \cdot c_b} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \text{Pr ovT1}^{n+1} + L_v \cdot \frac{1}{r^2} \text{Pr ovT2}^{n+1} + \frac{1}{r^2} \text{Pr ovM1} + \right. \\ \left. + L_v \cdot \frac{1}{r^2} \text{Pr ovM2} + \rho_s \cdot L_w \cdot \frac{\partial M}{\partial t} \right] = \quad (37)$$

$$= H_{\text{right}} = T^n + \beta \cdot \frac{1}{\rho_s \cdot c_b} \cdot \left[\frac{1}{r^2} \text{Pr ovT1}^n + L_v \cdot \frac{1}{r^2} \text{Pr ovT2}^n + \frac{1}{r^2} \text{Pr ovM1} + \right. \\ \left. + L_v \cdot \frac{1}{r^2} \text{Pr ovM2} + \rho_s \cdot L_w \cdot \frac{\partial M}{\partial t} \right]$$

em que $\frac{\partial M}{\partial t}$ é obtido por meio da Equação (32).

Por último, os novos operadores, H_{left} e H_{right} , são aplicados à Equação (24), gerando outro sistema de equações lineares FBR que é a forma discretizada proposta para a Equação (12).

Aplicação do Método de FBR Modificado à Equação de Balanço de Massa em Coordenadas Cilíndricas

Considerando, agora, coordenadas cilíndricas, o algoritmo proposto para obter os diversos termos e, assim, uma aproximação numérica para a solução da equação de balanço de massa, consiste em avaliar ou obter seqüencialmente:

$$1. \quad \frac{\partial M}{\partial r} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_2, \frac{\partial M}{\partial z} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_2 \text{ e } \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_1, \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_1 \quad (38)$$

$$2. \quad KMr = \left(K_{IVM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right), KMz = \left(K_{IVM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right) \text{ e } KTr = \left(K_{IVT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right), KTz = \left(K_{IVT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (39)$$

quatro funções de interpolação λ_{kMr} , λ_{kMz} , λ_{kTr} e λ_{kTz} , a partir da relação de interpolação entre ϕ e KMr , ϕ e KMz , ϕ e KTr e ϕ e KTz ,

$$KMr = \phi \cdot \lambda_{kMr}, KMz = \phi \cdot \lambda_{kMz}, KTr = \phi \cdot \lambda_{kTr} \text{ e } KTz = \phi \cdot \lambda_{kTz} \quad (40)$$

$$4. \quad \text{Pr ovMr} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kMr}, \quad \text{Pr ovMz} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_{kMz}, \quad \text{Pr ovTr} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kTr} \quad e \quad (41)$$

$$\text{Pr ovTz} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_{kTz}$$

$$5. \quad \begin{aligned} H_{\text{left}} &= \left[M^{n+1} - \alpha \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovMr}^{n+1} + \text{Pr ovMz}^{n+1} + \frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovTr} + \text{Pr ovTz} \right] \right] = \\ &= H_{\text{right}} = \left[M^n + \beta \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovMr}^n + \text{Pr ovMz}^n + \frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovTr} + \text{Pr ovTz} \right] \right] \end{aligned} \quad (42)$$

Finalmente, os novos operadores, H_{left} e H_{right} , são aplicados à Equação (24), gerando outro sistema de equações lineares FBR que é a forma discretizada proposta para a Equação (13).

Deve-se notar que, no caso de coordenadas cilíndricas:

$$dMdt = \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovMr}^n + \text{Pr ovMz}^n + \frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovTr} + \text{Pr ovTz} \right] \quad (43)$$

Aplicação do Método de FBR Modificado à Equação de Balanço de Energia em Coordenadas Cilíndricas

No caso da equação relativa ao transporte de energia considerando coordenadas cilíndricas, o algoritmo proposto para obter, pelo método de FBR, os diversos termos e, assim, uma aproximação numérica para a solução da equação de balanço de energia, consiste em avaliar ou obter seqüencialmente:

$$1. \quad \frac{\partial M}{\partial r} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_2, \quad \frac{\partial M}{\partial z} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_2 \quad e \quad \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_1, \quad \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_1 \quad (44)$$

$$KTr1 = \left(K_{qT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad KTz1 = \left(K_{qT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad KTr2 = \left(K_{vT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad KTz2 = \left(K_{vT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right),$$

$$2. \quad KMr1 = \left(K_{qM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right), \quad KMz1 = \left(K_{qM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right), \quad KMr2 = \left(K_{vM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right) \quad e \quad (45)$$

$$KMz2 = \left(K_{vM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right)$$

oito funções de interpolação λ_{kTr1} , λ_{kTz1} , λ_{kTr2} , λ_{kTz2} , λ_{kMr1} , λ_{kMz1} , λ_{kMr2} e λ_{kMz2} , a partir da relação de interpolação entre φ e $KTr1$, φ e $KTz1$, φ e $KTr2$, φ e $KTz2$, φ e $KMr1$, φ e $KMz1$, φ e $KMr2$ e φ e $KMz2$,

3. respectivamente:

$$\begin{aligned} KTr1 &= \phi \cdot \lambda_{kTr1}, & KTz1 &= \phi \cdot \lambda_{kTz1}, & KTr2 &= \phi \cdot \lambda_{kTr2}, & KTz2 &= \phi \cdot \lambda_{kTz2}, \\ KMr1 &= \phi \cdot \lambda_{kMr1}, & KMz1 &= \phi \cdot \lambda_{kMz1}, & KMr2 &= \phi \cdot \lambda_{kMr2} & e & KMz2 &= \phi \cdot \lambda_{kMz2} \end{aligned} \quad (46)$$

$$Pr ovTr1 = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kTr1}, \quad Pr ovTz1 = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_{kTz1}, \quad Pr ovTr2 = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kTr2},$$

$$4. \quad Pr ovTz2 = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_{kTz2}, \quad Pr ovMr1 = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kMr1}, \quad Pr ovMz1 = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_{kMz1}, \quad (47)$$

$$Pr ovMr2 = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kMr2} \quad e \quad Pr ovMz2 = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_{kMz2}$$

$$\begin{aligned} H_{left} &= T^{n+1} - \alpha \cdot \frac{1}{\rho_s \cdot c_b} \cdot \left[\begin{aligned} &\frac{1}{r} \cdot Pr ovTr1^{n+1} + Pr ovTz1^{n+1} + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot Pr ovTr2^{n+1} + \\ &+ L_v \cdot Pr ovTz2^{n+1} + \frac{1}{r} \cdot Pr ovMr1 + \\ &+ Pr ovMz1 + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot Pr ovMr2 + L_v \cdot Pr ovMz2 + \rho_s \cdot L_w \cdot \frac{\partial M}{\partial t} \end{aligned} \right] = \\ 5. \quad H_{right} &= T^n + \beta \cdot \frac{1}{\rho_s \cdot c_b} \cdot \left[\begin{aligned} &\frac{1}{r} \cdot Pr ovTr1^n + Pr ovTz1^n + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot Pr ovTr2^n + \\ &+ L_v \cdot Pr ovTz2^n + \frac{1}{r} \cdot Pr ovMr1 + \\ &+ Pr ovMz1 + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot Pr ovMr2 + L_v \cdot Pr ovMz2 + \rho_s \cdot L_w \cdot \frac{\partial M}{\partial t} \end{aligned} \right] \end{aligned} \quad (48)$$

em que $\frac{\partial M}{\partial t}$ é obtido por meio da Equação (43).

Por último, os novos operadores, H_{left} e H_{right} , são aplicados à Equação (24),

6. gerando outro sistema de equações lineares FBR que é a forma discretizada proposta para a Equação (14).

2.2.2.3. O Método adaptativo no tempo para solução de equações diferenciais parciais (EDP) e ordinárias (EDO)

Esquema de Bixler adaptativo no tempo para integração de EDO

Como mencionado anteriormente, utiliza-se, no presente trabalho, uma modificação do esquema de Bixler (esquema GLS) de forma a melhorar a acurácia e estabilidade do método. Considere a equação diferencial de primeira ordem (prontamente expansível para um sistema de equações diferenciais ordinárias):

$$y' = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0 \quad (49)$$

em que t é a variável independente (muitas vezes, t refere-se ao tempo) e y é a variável dependente; o subscrito 0 refere-se a valores iniciais. O Esquema de Bixler (1989) consiste basicamente em:

1. Utilizar o preditor de Adams-Bashforth, de acurácia de segunda ordem:

$$y_{n+1}^p = y_n + \frac{\Delta t_n}{2} \left[\left(2 + \frac{\Delta t_n}{\Delta t_{n-1}} \right) \dot{y}_n - \frac{\Delta t_n}{\Delta t_{n-1}} \dot{y}_{n-1} \right] \quad (50)$$

em que o sobrescrito p refere-se ao valor predito e as derivadas (taxas de variação), \dot{y}_{n-1} e \dot{y}_n , no plano temporal $n-1$ e n são aproximadas respectivamente por:

$$\dot{y}_{n-1} = \frac{\Delta t_{n-2}}{\Delta t_{n-1} + \Delta t_{n-2}} \left(\frac{y_n - y_{n-1}}{\Delta t_{n-1}} \right) + \frac{\Delta t_{n-1}}{\Delta t_{n-1} + \Delta t_{n-2}} \left(\frac{y_{n-1} - y_{n-2}}{\Delta t_{n-2}} \right) \quad (51)$$

e a regra do trapézio:

$$\dot{y}_n = \frac{2}{\Delta t_{n-1}} (y_n - y_{n-1}) - \dot{y}_{n-1} \quad (52)$$

2. Utilizar, como corretor, a regra dos gêmeos de uma perna só:

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t_n} = f \left(\frac{y_{n+1} + y_n}{2}, \frac{t_{n+1} + t_n}{2} \right) \quad (53)$$

3. Predizer o tamanho do avanço no tempo por meio da expressão:

$$\Delta t_{n+1} = \Delta t_n \left(\frac{\varepsilon}{|d_{n+1}|} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (54)$$

em que ε é o erro de truncamento temporal local e d_{n+1} , proporcional à diferença entre a solução correta e a exata, é definida por:

$$d_{n+1} = \frac{\beta}{2 + \beta + 3\Delta t_{n-1} / \Delta t_n} (y_{n+1} - y_{n+1}^p) \quad (55)$$

Deve-se mencionar que ε é o erro de truncamento local no tempo desejado, mas não é o erro de truncamento real que ocorre em problemas altamente não-lineares como os discutidos neste trabalho. No entanto, devido à sua base matemática intrínseca, ele refletirá uma diminuição no erro real conforme seu valor é reduzido, dentro dos limites de um procedimento de segunda ordem. Nas equações acima n , $n-1$, $n-2$ e $n+1$ níveis referem-se a níveis de tempo. Sugere-se o valor de $\beta = 0,25$, sendo que, em princípio, $0 \leq \beta \leq 1$. Se o esquema GLS (GRESHO et al. 1980) for utilizado, então $\beta = 1$; esta foi a escolha neste trabalho. Fazendo o sobrescrito E se referir à solução exata, o erro de truncamento temporal local estimado relativo à equação diferencial ordinária, Equação (49), pode ser obtido por meio da expansão em série de Taylor como (GRESHO et al., 1980):

$$y_{n+1} - y_{n+1}^E = \frac{1}{12} \Delta t_n^3 \ddot{f}(y, t) + O(\Delta t^4) \quad (56)$$

Similarmente, o erro de truncamento local para a Equação (53) é dado por Bixler (1989):

$$y_{n+1} - y_{n+1}^E = \frac{0,25}{12} \Delta t_n^3 \ddot{f}(y, t) + O(\Delta t^4) \quad (57)$$

A combinação das duas Equações (54) e (55) permite obter o tamanho do avanço no tempo pela Equação (54).

Deve-se enfatizar que o esquema de Bixler requer soluções em três passos de tempo precedentes. O passo de tempo adaptativo inicia-se no quarto passo de tempo. Além disso, uma norma como o erro médio quadrático (RMS) deve substituir a norma absoluta nas Equações (54) e (55), ao se resolver um sistema de equações.

Mostra-se a seguir a modificação feita por Fortes e Ferreira (1999) no esquema acima.

Esquema de integração de EDP adaptativo no tempo

A técnica proposta por Fortes e Ferreira (1999) é baseada em uma modificação

do esquema de Bixler (1989), com a inclusão da forma linearizada do método de Newton-Raphson. Este trabalho propõe uma técnica que incorpora funções de base radial, que envolve os seguintes passos:

1. Discretizar as equações de balanço de massa e energia usando FBR, para obter, o sistema de equações:

$$\sum_{j=1}^N \lambda_j^{n+1} H_{\text{left}} \phi(r_{ij}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j^n H_{\text{right}} \phi(r_{ij}) \quad \text{para } i = 1 \dots N \quad (58)$$

2. Usar o método de Euler ($\theta = 0$) para obter as duas primeiras soluções não adaptativas, por meio da equação anterior.
3. Obter os valores preditos usando as Equações (50) a (52) e as soluções nos tempos anteriores.
4. Ao invés de usar a equação de Bixler ou de GLS, Equação (53), resolver a Equação (58) como corretora; Fortes e Ferreira (1999) mostraram que esta aproximação é totalmente adequada à solução de problemas convectivos-difusivos.
5. Usar as Equações (54) e (55) para definir o novo passo de tempo, dentro do erro de truncamento estabelecido.
6. Iterar, a partir do item 3, até o tempo final de simulação desejado.

Cabe destacar que, além do método de Bixler modificado, utilizou-se neste trabalho o método de Runge-Kutta Fehlberg em conjunto com o método de FBR para resolver o modelo de secagem proposto por Fortes et al. (1981). Os resultados obtidos por meio dos dois métodos foram equivalentes. Entretanto, o tempo computacional do método de Runge-Kutta Fehlberg foi quatro vezes maior que o do método de Bixler modificado. Ainda assim, o método de Bixler modificado não se

mostrou eficiente em relação aos métodos de passo constante, ao se resolverem as equações de secagem de camada fina. Portanto, mostrar-se-ão apenas os resultados obtidos por meio de passos de tempo constantes.

2.3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados de simulação sugeriram ajuste dos coeficientes das condutividades de líquido e de vapor e o coeficiente de transferência de massa, k_l^* , k_v^* e h_m^* , respectivamente, por meio do modelo:

$$Z = a + b.M_0 + c.v + d.rh \quad (59)$$

em que M_0 , v e rh referem-se aos valores iniciais do teor de água do grão, e velocidade e umidade relativa do ar de secagem; a , b , c e d são parâmetros de ajuste, que dependem das condições de contorno.

A Tabela 2.3 mostra os coeficientes obtidos nos casos de simulações de processos de secagem com condições de contorno de Dirichlet e coordenadas esféricas. Utilizaram-se coordenadas esféricas e cilíndricas na solução dos processos de secagem com condições de contorno convectivas. A Tabela 2.4 mostra os coeficientes obtidos.

Tabela 2.3. Coeficientes obtidos a partir de simulações com condição de contorno de Dirichlet e coordenadas esféricas

Coefficientes	a	b	c	d
k_l^*	-1,045E-13	4,490E-14	6,223E-14	2,862E-16
k_v^*	2,357E-07	1,652E-07	-1,549E-07	-8,346E-10
h_m^*	0,1740	0,7037	-0,1783	-1,363E-03

Tabela 2.4. Coeficientes obtidos a partir das simulações com condições de contorno de convecção e coordenadas esféricas e cilíndricas

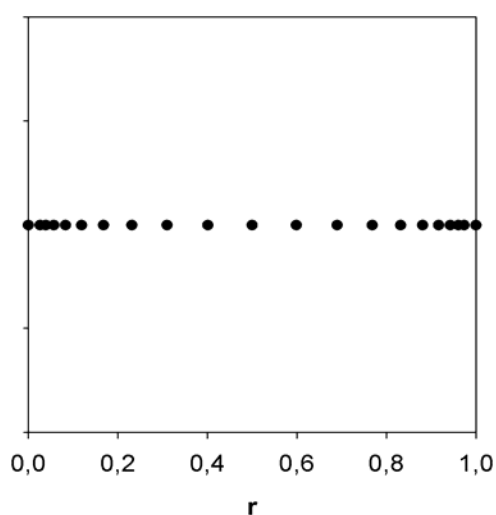
Coefficientes	a	b	c	d
k_l^*	-1,747E-13	-3,508E-14	1,164E-13	5,474E-16
k_v^*	2,813E-07	5,955E-08	-1,641E-07	-1,116E-09
h_m^*	0,1674	0,7213	-0,1767	-1,3162E-03

Define-se aqui **acurácia** como sendo o grau de aproximação da solução numérica em relação aos valores experimentais considerados como valores de referência exatos. O esquema explícito, $\Theta=0$, apresentou maior acurácia que os esquemas implícitos e foi adotado neste trabalho. As soluções das equações de conservação de massa e energia, Equações (4) e (5), respectivamente, foram comparadas com os resultados experimentais de secagem de grão de trigo com formato esférico de Fortes et al. (1981).

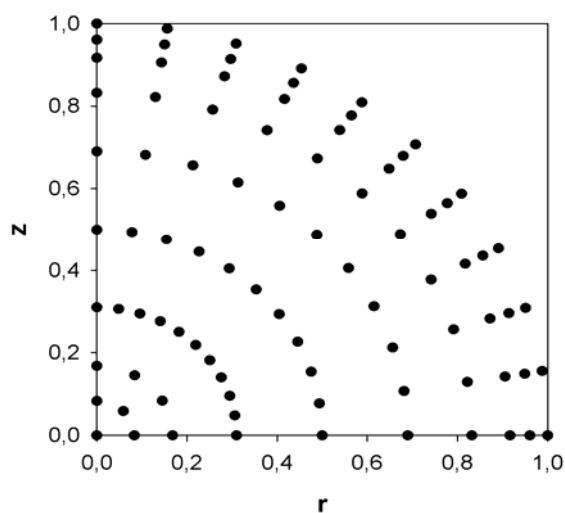
Após muitos testes de avaliação de acurácia e simplicidade (número mínimo de pontos necessários para atingir a acurácia desejada), o número de pontos nodais e os passos de tempo, Δt , usados nas simulações foram:

- No caso de coordenadas esféricas: 20 pontos nodais e $\Delta t = 0,01$;
- No caso de coordenadas cilíndricas: 85 pontos nodais, $\Delta t = 0,1$.

As Figuras 2.1 (a e b) mostram as distribuições normalizadas dos pontos nodais utilizadas neste trabalho. Os pontos nodais ficaram mais concentrados nos contornos, para maior acurácia dos resultados, conforme mostraram testes efetuados previamente e comparações de soluções.



a) Coordenadas esféricas



b) Coordenadas cilíndricas

Figura 2.1. Distribuição normalizada dos pontos nodais utilizados para discretização do grão de trigo com formato esférico.

2.3.1. Simulação de secagem de grãos de trigo utilizando coordenadas esféricas e condição de contorno de Dirichlet

Os dados e discussão desta seção referem-se a soluções numéricas associadas a coordenadas esféricas. A Figura 2.2 mostra os resultados das simulações de secagem efetuadas com condições de contorno de Dirichlet e os pontos experimentais associados (FORTES et al., 1981) na faixa de temperaturas de bulbo seco entre 26,7 e 87,8°C (condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2). O método de FBR modificado com função cúbica, aqui proposto, mostrou-se adequado para simular o processo de secagem em camada fina.

As Figuras 2.3 e 2.4 mostram os fluxos de líquido e de vapor preditos na superfície do grão de trigo para as temperaturas de secagem de 26,7°C e 67,5°C, respectivamente. Essas duas figuras merecem uma análise em conjunto. Quando a temperatura de secagem é baixa (26,7°C), a movimentação de água no interior do grão ocorre basicamente na fase líquida; o líquido, ao chegar à fronteira, evapora-se. Nota-se, pela Figura 2.3 que o fluxo de líquido na fronteira é, aproximadamente, igual ao fluxo de vapor. Por outro lado, em altas temperaturas de secagem (67,5°C), a taxa de evaporação na superfície é alta, ocasionando altos fluxos de vapor. A água movimenta-se, então, tanto em forma de vapor (predominante, sendo $J_v/J_l > 15$ na superfície) quanto na fase líquida, em direção à superfície. Uma frente de evaporação forte se estabelece, com regiões cada vez mais secas no interior do sólido. No primeiro caso (26,7°C), as tensões hídricas e térmicas são pequenas. Embora não se efetue uma análise quantitativa sobre tensões hídricas e térmicas, podem-se inferir vários argumentos. No caso de secagem em altas temperaturas, tensões térmicas se impõem inicialmente e uma vez estabelecido o perfil de temperatura, as tensões hídricas atuam de forma a comprimir o grão, devido à perda de água. O comportamento de flutuação do perfil temporal de fluxos de vapor em altas temperaturas deve-se ao caráter profundamente não linear do processo de secagem em que os perfis de temperatura se impõem de forma abrupta, ocasionando altos fluxos de vapor.

Em relação aos fluxos de massa obtidos por Fortes et al. (1981), os fluxos tanto de líquido quanto de vapor obtidos no presente trabalho são menores. A

diferença pode ser justificada pela nova técnica utilizada (FBR), a condição de contorno de Dirichlet e o nível de discretização, mais refinado neste trabalho que no original, que levaram a novos valores das condutividades de líquido e de vapor e do coeficiente de convecção de massa.

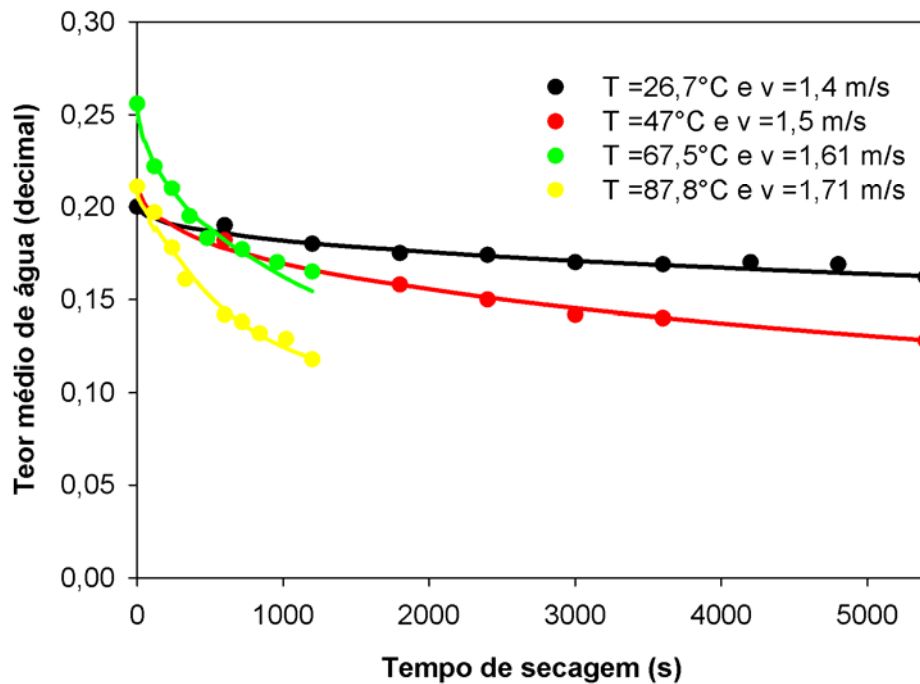


Figura 2.2. Comparação entre as curvas de secagem preditas (linhas contínuas) e respectivos dados experimentais (em pontos discretos): Soluções numéricas com condição de contorno de Dirichlet e coordenadas esféricas. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

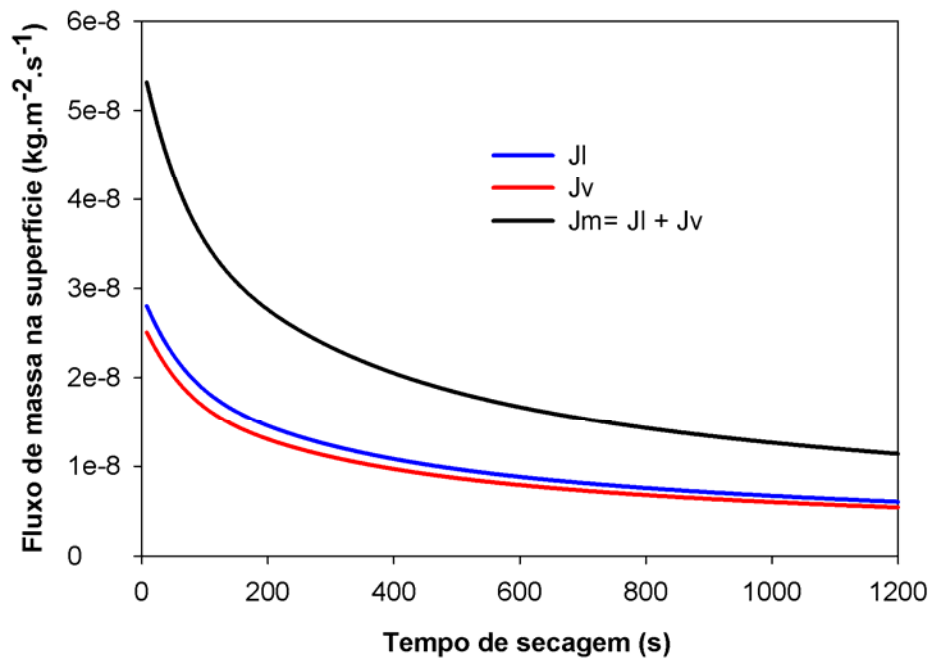


Figura 2.3. Fluxos de massa preditos na superfície do grão à temperatura de secagem de 26,7°C: Soluções numéricas com condição de contorno de Dirichlet e coordenadas esféricas. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

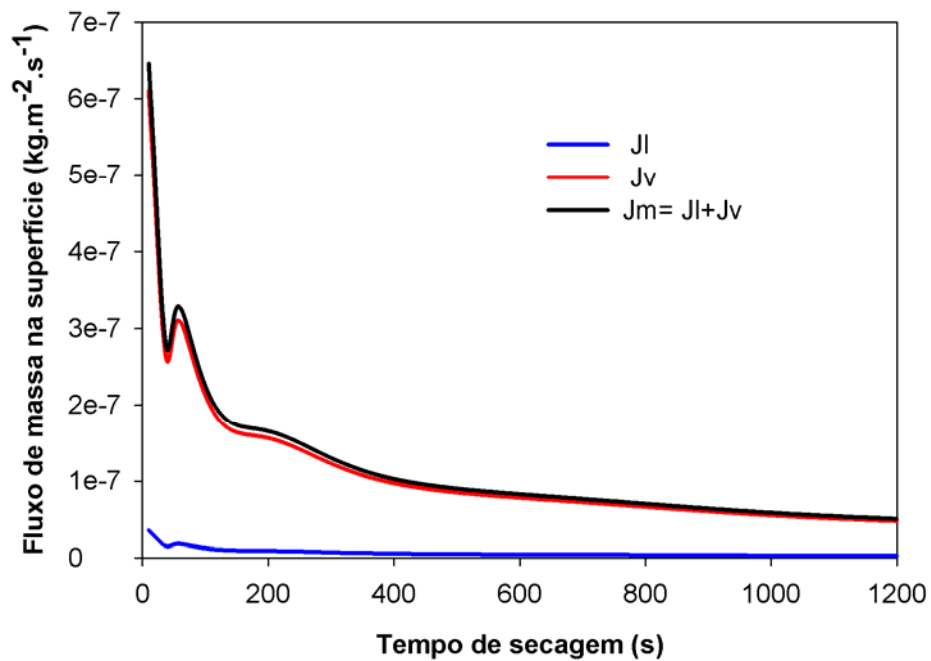


Figura 2.4. Fluxos de massa preditos na superfície do grão à temperatura de secagem de 67,5°C: Soluções numéricas com condição de contorno de Dirichlet e coordenadas esféricas. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

2.3.2. Simulação de secagem de grãos de trigo, utilizando coordenadas esféricas e condição de contorno de convecção

Os dados e discussão desta seção referem-se a soluções numéricas associadas a coordenadas esféricas. A Figura 2.5 mostra as curvas preditas de secagem, com condição de contorno de convecção, em comparação com os pontos experimentais de Fortes et al. (1981), para as mesmas condições de simulação do exemplo anterior. Observa-se que o método de FBR cúbico modificado também é adequado para simular o processo de secagem em camada fina com condição de contorno de convecção na superfície do grão.

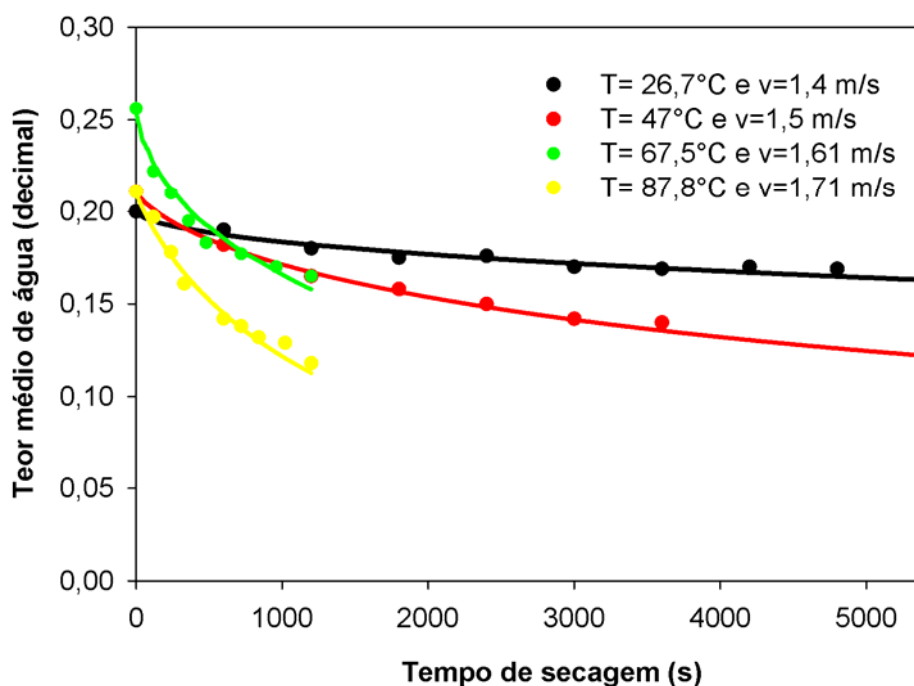


Figura 2.5. Comparação entre as curvas de secagem preditas (linhas contínuas) e respectivos dados experimentais (em pontos discretos): Soluções numéricas com condição de contorno de convecção e coordenadas esféricas. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

A fim de avaliar as diferenças entre as curvas de secagem do trigo preditas por meio do método de FBR cúbico modificado ao se usarem coordenadas esféricas e condição de contorno de convecção e as curvas preditas com condição de contorno de Dirichlet para diferentes condições, utilizaram-se dois tipos de normas.

Considerando que se tenham efetuado N avaliações do valor do teor de água do grão, em que $i = 0$ é o início e $i = N$ é o ponto que representa o fim da secagem, a diferença máxima ($E_{\text{máx}}$) é definida por:

$$E^{\infty} = \max_{0 \leq i \leq N} \left| \overline{M}_{\text{preditoConvec}_i} - \overline{M}_{\text{preditoDirich}_i} \right| \quad (60)$$

A diferença média quadrática RMS é definida por:

$$E^2 = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \overline{M}_{\text{preditoConvec}_i} - \overline{M}_{\text{preditoDirich}_i} \right|^2} \quad (61)$$

A Tabela 2.5 mostra as diferenças entre os modelos de secagem com condições de contorno de Dirichlet e convectivas na simulação do processo de secagem para as condições deste trabalho, ambas associadas ao uso de coordenadas esféricas.

Tabela 2.5. Diferenças entre modelos de secagem ao se usarem coordenadas esféricas e condições de contorno de Convecção e de Dirichlet

Coordenada s	26,7°C		47°C		67,5°C		87,8°C	
	RMS	Emáx	RMS	Emáx	RMS	Emáx	RMS	Emáx
Esféricas	0,001	0,001	0,004	0,006	0,003	0,004	0,002	0,005

Observa-se que os resultados obtidos por meio da simulação do processo de secagem em camada fina com condição de contorno de Dirichlet na superfície do trigo são similares aos resultados obtidos com condição de contorno de convecção já que a norma RMS é menor que 0,45% para todas as condições simuladas e a maior diferença ($E_{\text{máx}}$) encontrada, durante o tempo de secagem simulado, é cerca de 0,6% para as temperaturas de 47°C e de 87,8°C.

A Figura 2.6 mostra a temperatura no centro do grão de trigo durante o processo de secagem para as diferentes condições simuladas. Verifica-se que o centro do grão de trigo atinge a temperatura de equilíbrio em aproximadamente 100 s, em concordância com os dados experimentais de Fortes (1981).

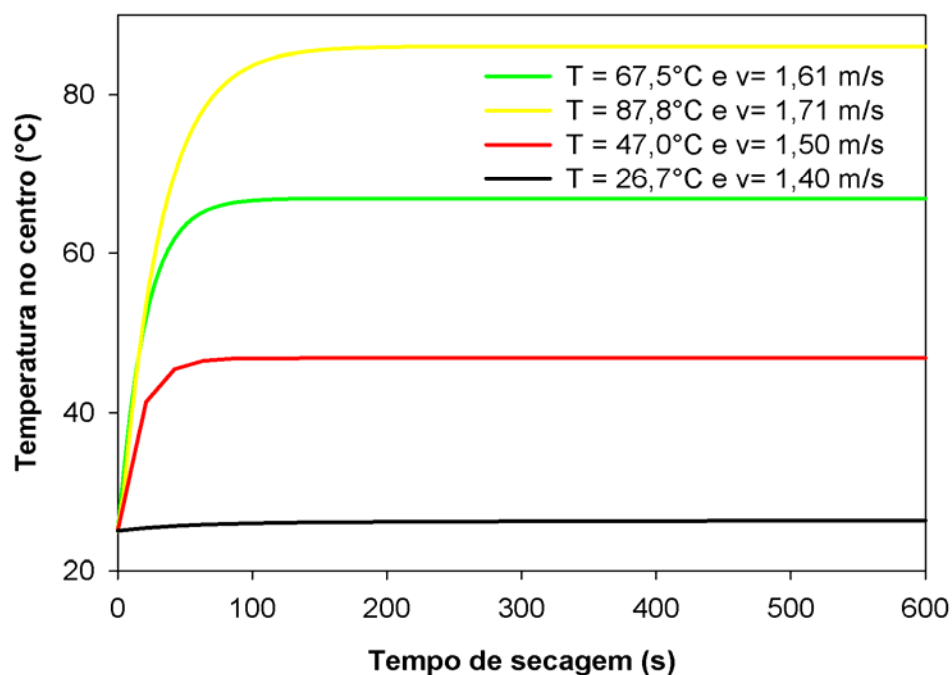


Figura 2.6. Temperatura predita no centro do grão de trigo considerando condição de contorno de convecção. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

As Figuras 2.7 a 2.10 mostram a distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo em quatro diferentes temperaturas de secagem. Constata-se que a frente móvel de evaporação se torna mais evidente a uma temperatura de secagem de, aproximadamente, 67,0°C. A distribuição do teor de água dentro do grão permite analisar a evolução das tensões hídricas que podem causar fissuras no produto devido aos altos gradientes de água (HAGHIGHI e AGUIRRE, 1999).

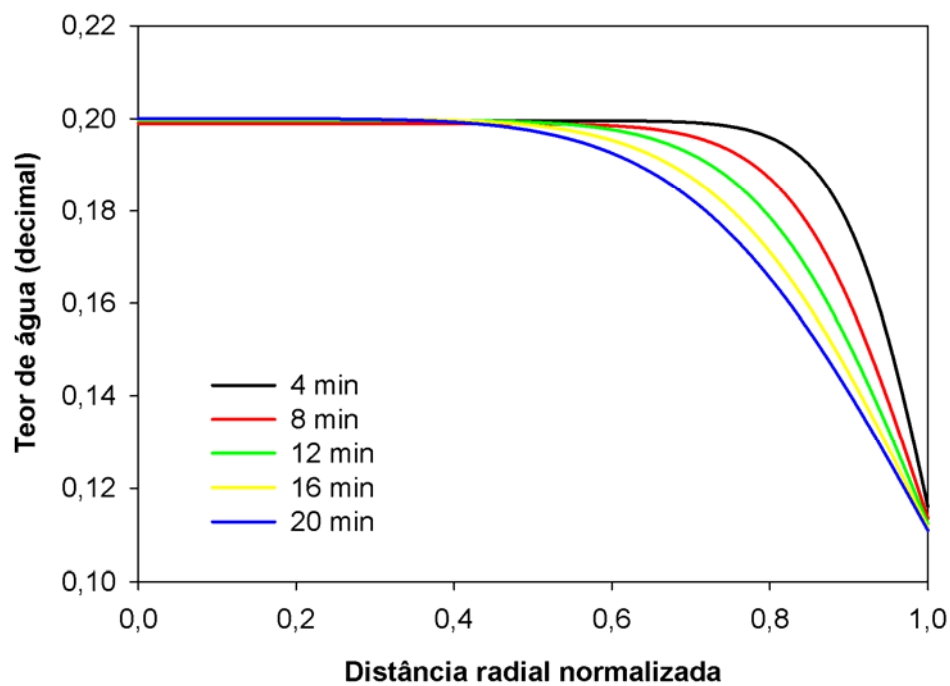


Figura 2.7. Distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo a 26,7°C. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

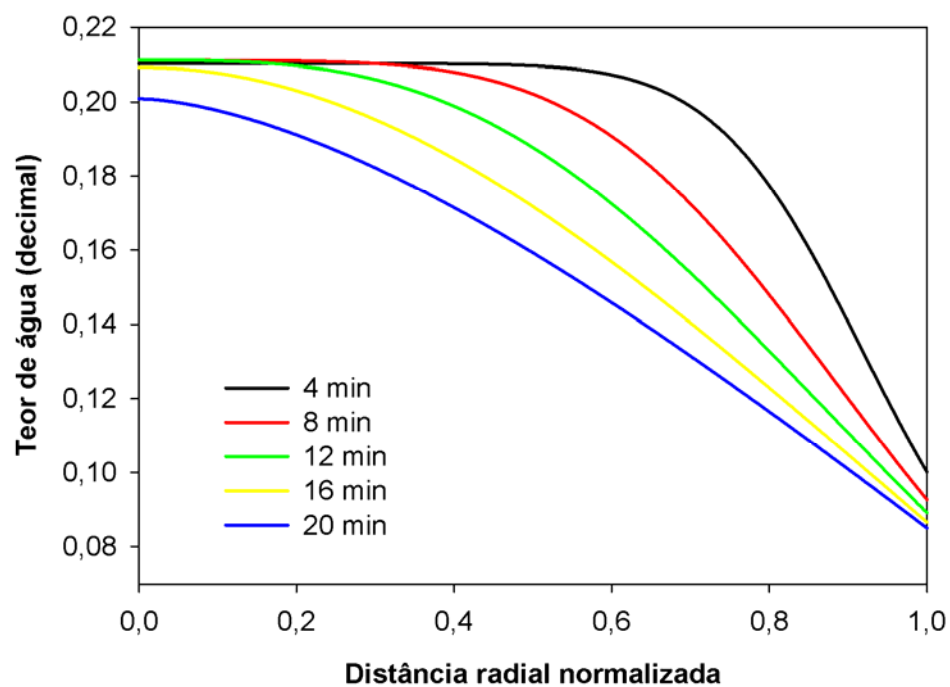


Figura 2.8. Distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo a 47°C. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

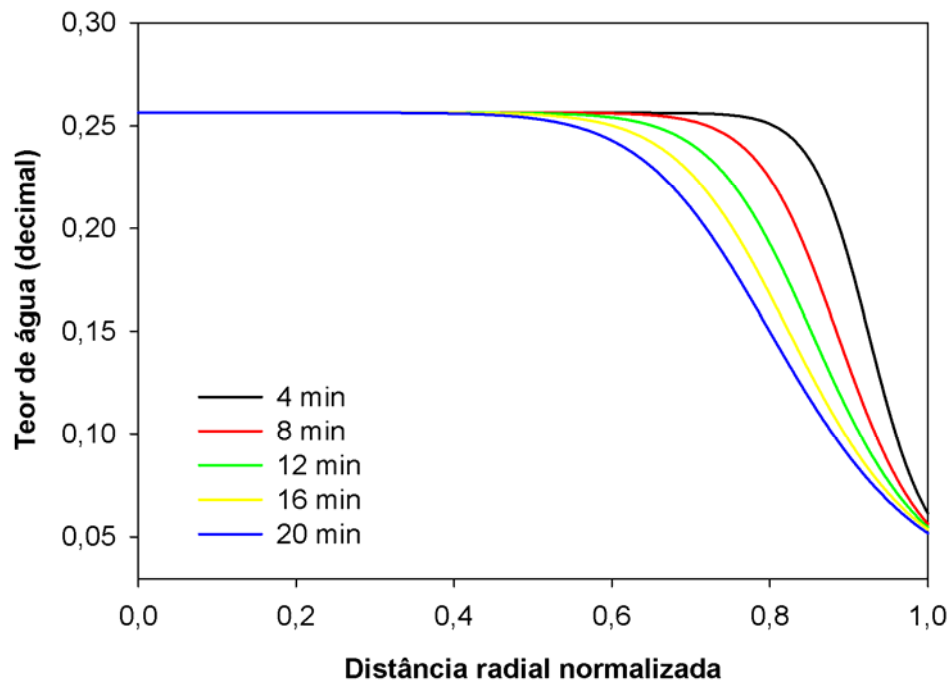


Figura 2.9. Distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo a 67,5°C. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

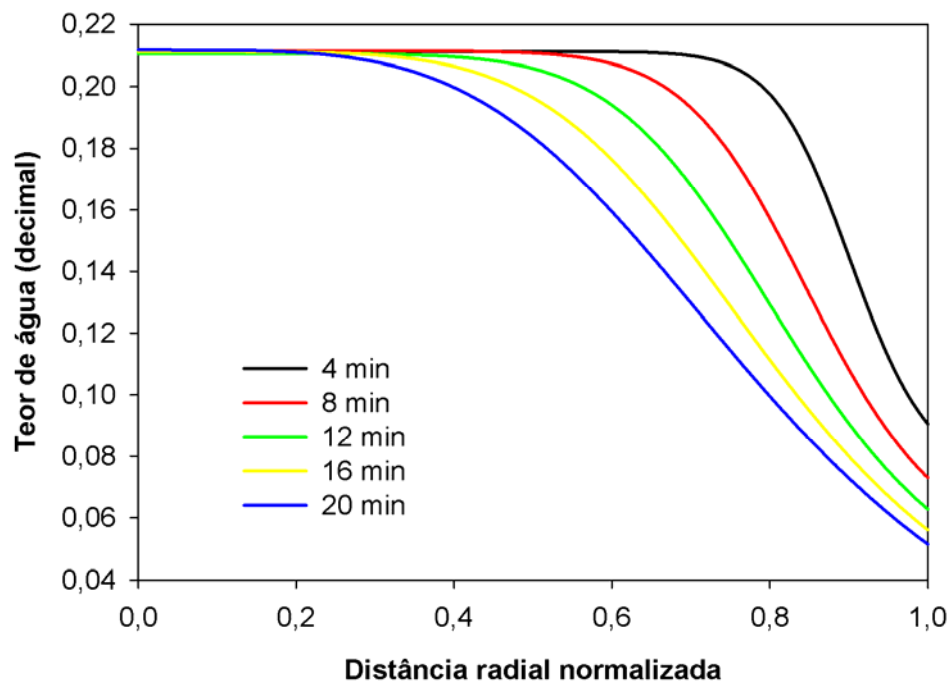


Figura 2.10. Distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo a 87,8°C. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

A imposição das condições de contorno de Dirichlet levam a estimativas de altos fluxos (Figuras 2.3 e 2.4), pois os gradientes iniciais de teor de água e temperatura na superfície tornam-se os máximos possíveis. As Figuras 2.11 e 2.12 mostram os fluxos de líquido e de vapor preditos na superfície do grão de trigo, obtidos a partir de simulações com condição de contorno de convecção, para as temperaturas de secagem de 26,7°C e 67,5°C, respectivamente. Observa-se, na Figura 2.11, predomínio do fluxo de líquido em relação ao fluxo de vapor na superfície do grão, em nível superior ao predito na Figura 2.3. Pode-se inferir dessa figura que, pela presença dominante de água, há pouco stress hídrico. Os fluxos são menores que os obtidos com a condição de Dirichlet, até aproximadamente 250s de secagem. Também, há pouca possibilidade de stress térmico sob esta condição de baixa temperatura. Entretanto, na Figura 2.12, nota-se que o fluxo de vapor passa a ser dominante devido à alta temperatura de secagem, 67,5°C, mas, menos dominante que no caso de condição de Dirichlet. Na Figura 2.12, a partir do tempo de secagem inicial até aproximadamente 100s também podem-se observar flutuações dos fluxos de massa que são justificados pela ocorrência de vaporização tanto na superfície do grão quanto em sua parte interna e ao estabelecimento rápido do perfil de temperatura no interior do grão, que leva a altos gradientes de temperatura e de teor de água. O comportamento de flutuação do perfil temporal de fluxos de vapor em altas temperaturas deve-se, portanto, como no caso de condições de contorno de Dirichlet, ao caráter profundamente não linear do processo de secagem. O fluxo de vapor é superior ao de líquido, mas não tão dominante como no caso de condição de Dirichlet (Figura 2.4). Pode-se inferir, também, que o stress térmico deve ser calculado tendo por base a condição convectiva, pois as condições de Dirichlet levam a gradientes muito pronunciados.

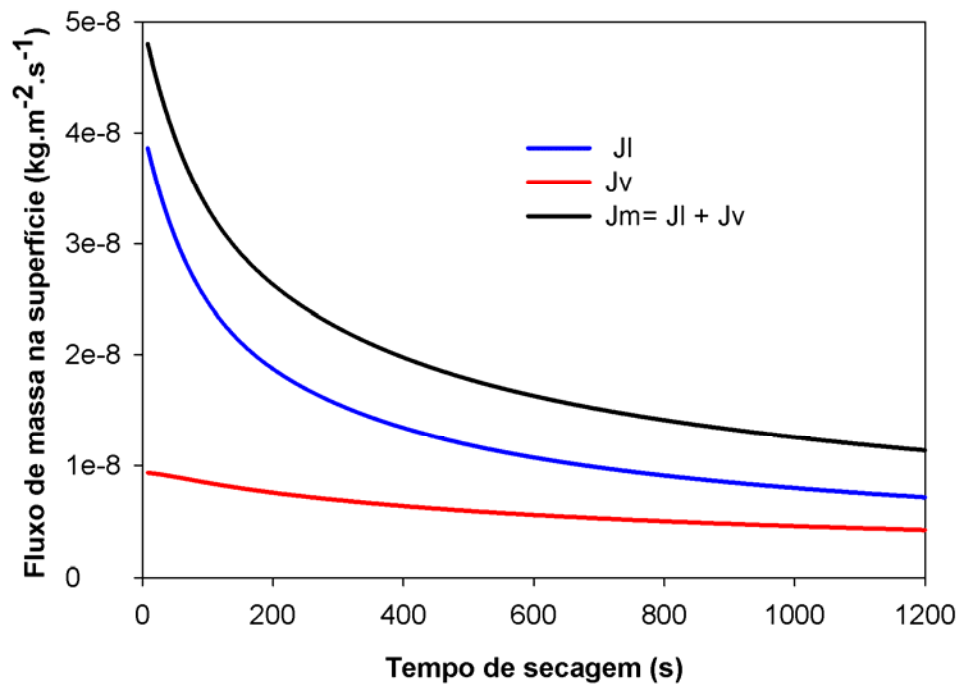


Figura 2.11. Fluxos de massa preditos na superfície do grão à temperatura de secagem de 26,7°C e condição de contorno de convecção. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

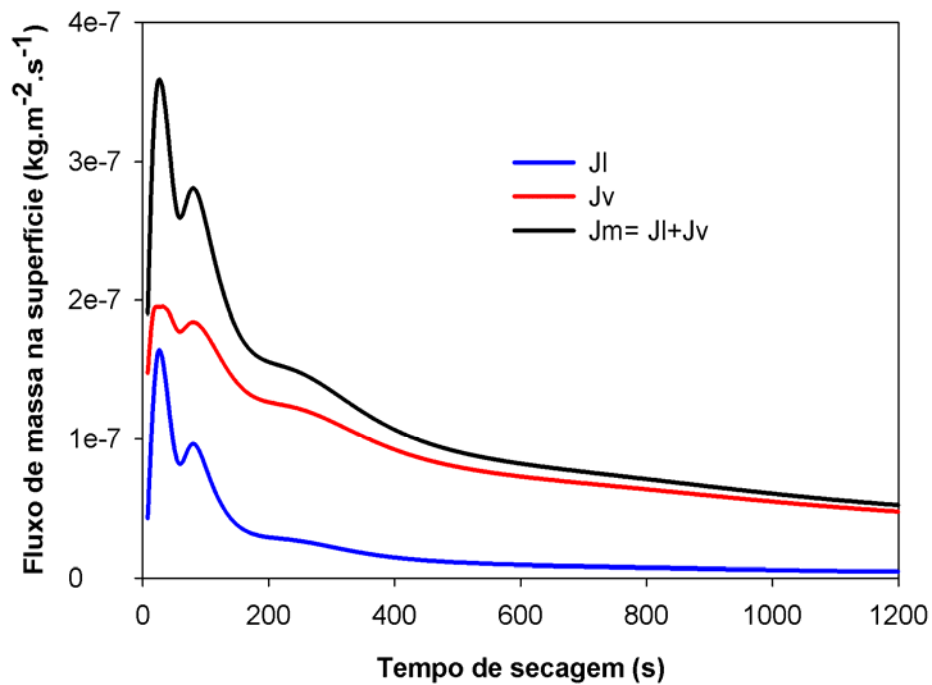


Figura 2.12. Fluxos de massa preditos na superfície do grão à temperatura de secagem de 67,5°C e condição de contorno de convecção. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

2.3.3. Simulação de secagem de grãos de trigo, utilizando coordenadas cilíndricas e condição de contorno de convecção

Os dados e discussão desta seção referem-se a soluções numéricas associadas a coordenadas cilíndricas. A Figura 2.13 mostra as curvas de secagem preditas, com condição de contorno de convecção na superfície do grão, em comparação com as experimentais reportadas por Fortes et al. (1981) para as mesmas condições das simulações anteriores. Observa-se que o método de FBR cúbica modificado é adequado para simular o processo de secagem em camada fina com condição de contorno de convecção na superfície do grão. Os resultados do processo de secagem em camada fina com condição de contorno de convecção são similares aos resultados obtidos por meio da simulação do processo de secagem em camada fina com coordenadas esféricas e condição de contorno de Dirichlet e convecção na superfície do grão.

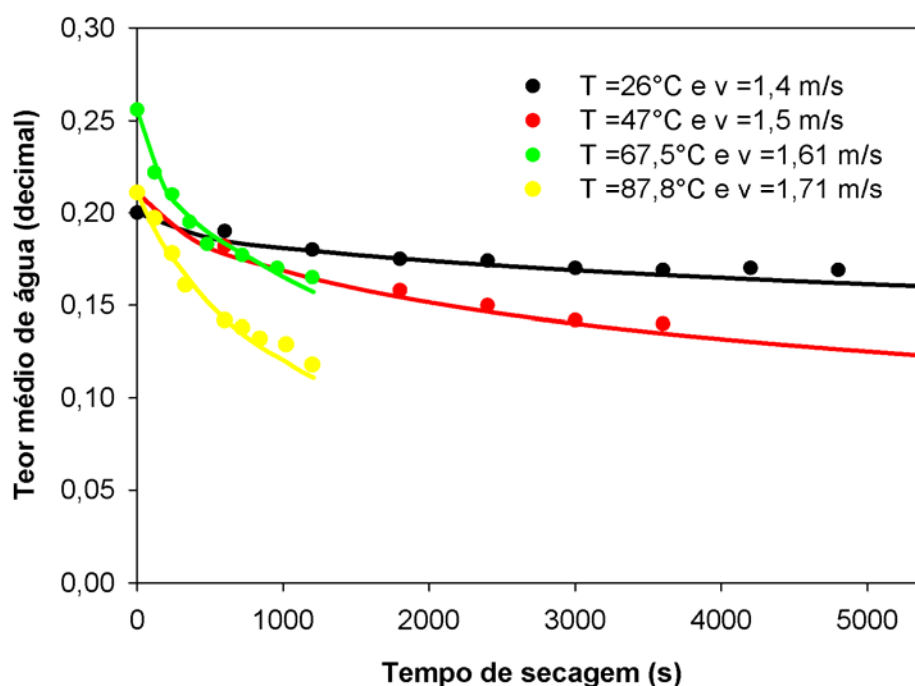


Figura 2.13. Comparação entre as curvas de secagem preditas (linhas contínuas) e respectivos dados experimentais (em pontos discretos): Soluções numéricas com condição de contorno de convecção e coordenadas cilíndricas. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

As Figuras 2.14a-c mostram a distribuição do teor de água dentro do grão de trigo à temperatura de secagem de $26,7^{\circ}\text{C}$ e três diferentes tempos de secagem (50s, 2700s e 5400s). Observa-se que a secagem ocorre a partir da superfície em direção ao centro do grão com o aumento do tempo de secagem. A Figura 2.15 mostra a distribuição de temperatura no interior do grão de trigo à temperatura de secagem de $26,7^{\circ}\text{C}$ e tempo de secagem de 50s. Assim como na simulação do processo de secagem de camada fina com coordenadas esféricas, a simulação do processo de secagem com coordenadas cilíndricas mostrou que a temperatura do grão atingiu a temperatura de equilíbrio em, aproximadamente, 100s.

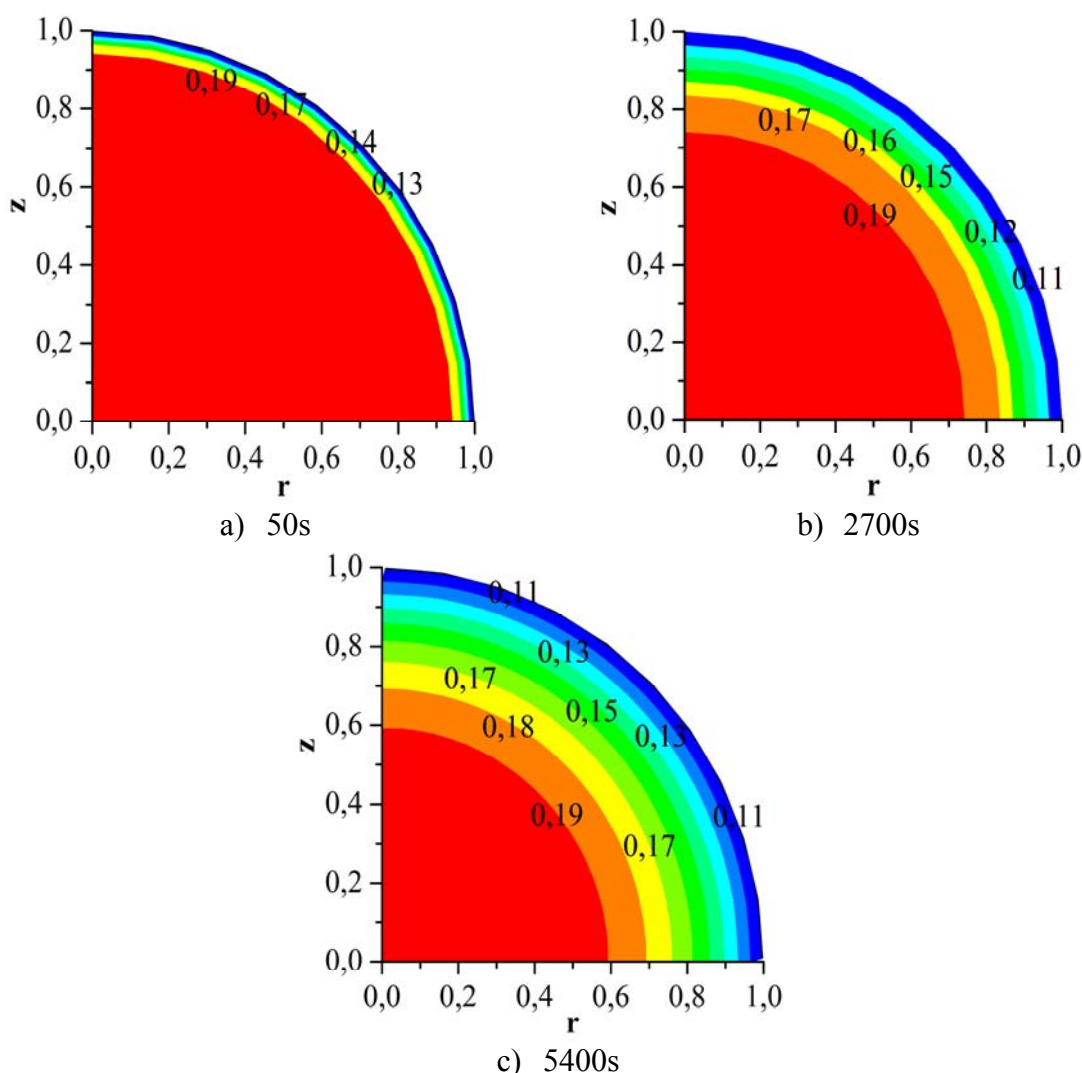


Figura 2.14. Distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo a $26,7^{\circ}\text{C}$. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

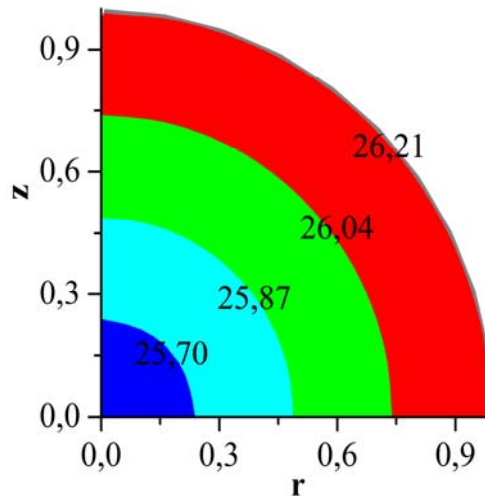


Figura 2.15. Distribuição da temperatura ($^{\circ}\text{C}$) predita dentro do grão de trigo a $26,7^{\circ}\text{C}$ e tempo de secagem de 50s. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

As Figuras 2.16a-c mostram a distribuição do teor de água dentro do grão de trigo para a temperatura de secagem de $87,8^{\circ}\text{C}$ e três diferentes tempos de secagem (50s, 600s e 1200s). Novamente, nota-se que a secagem ocorre da superfície para o centro do grão com o aumento do tempo de secagem.

A Figura 2.17 mostra a distribuição de temperaturas no interior do grão de trigo para temperatura de secagem de $87,8^{\circ}\text{C}$ e tempo de secagem de 50s. Como visto anteriormente nas simulações do processo de secagem de camada fina com coordenadas esféricas e cilíndricas (temperatura de $26,7^{\circ}\text{C}$), na simulação com coordenadas cilíndricas a $87,8^{\circ}\text{C}$ a temperatura do grão atinge a temperatura de equilíbrio em aproximadamente 100s.

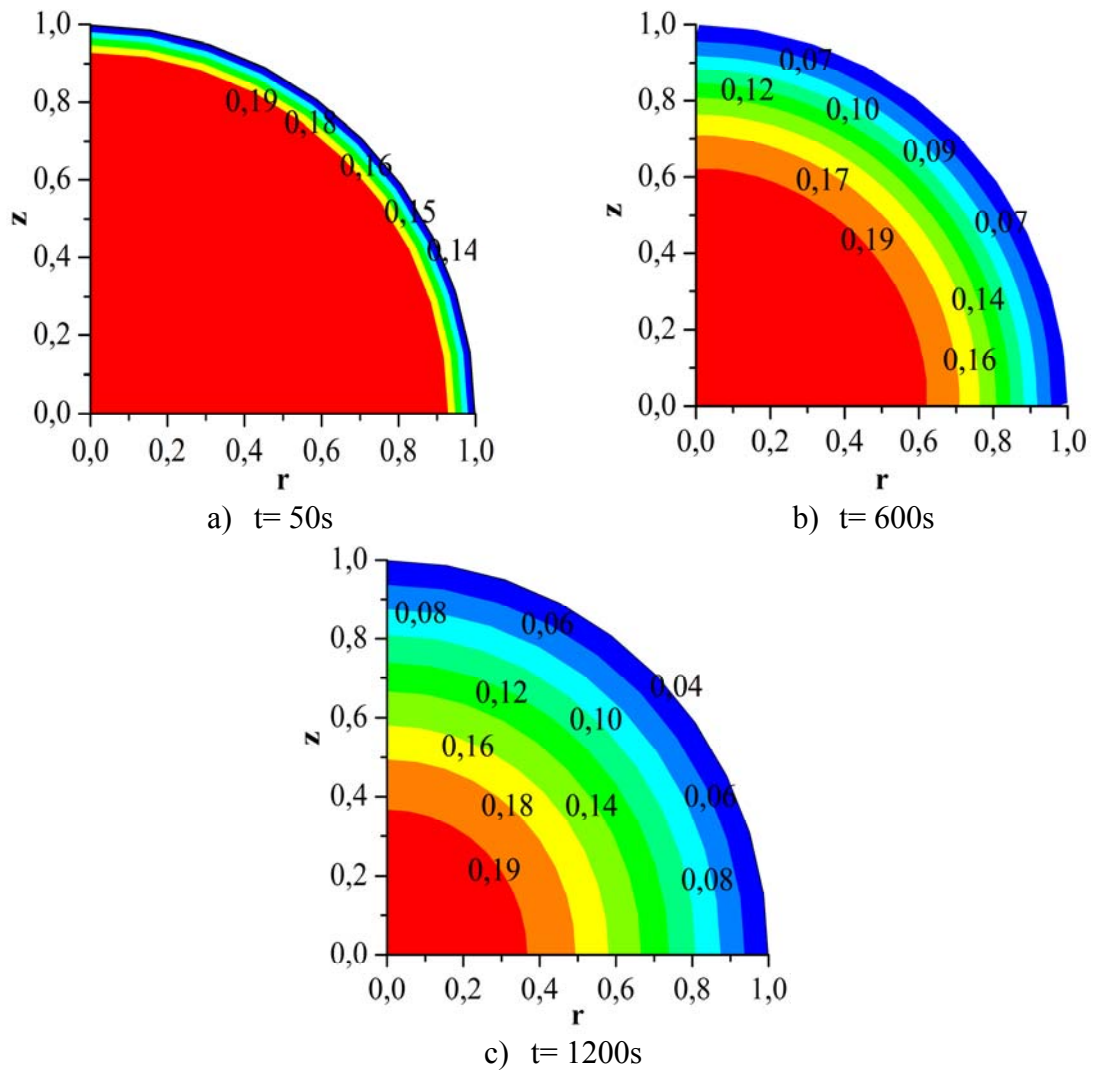


Figura 2.16. Distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo a $87,8^{\circ}C$. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

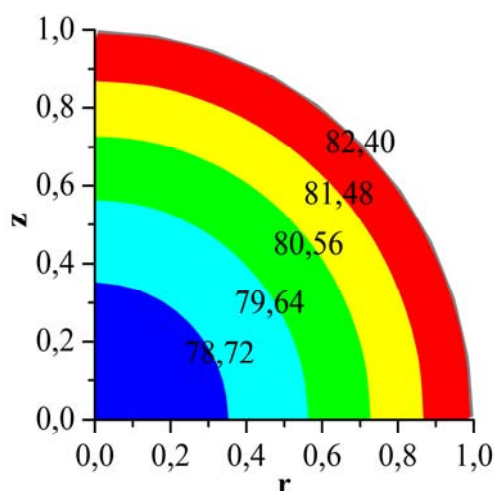


Figura 2.17. Distribuição da temperatura (°C) predita dentro do grão de trigo a 87,8°C e tempo de secagem de 50s. Condições de secagem de acordo com a Tabela 2.2.

2.3.4. Discussão sobre o quadro global da modelagem teórica do processo de secagem

Os dados apresentados e outras informações da literatura (citadas a seguir, quando necessárias) permitem afirmar que:

- a. *Faz sentido o uso de um modelo aparentemente complexo para analisar o processo de secagem de corpos higroscópicos capilares porosos.*

As justificativas para esta afirmativa têm por base os seguintes fatos:

- O produto a ser seco pode apresentar uma infinidade de características particulares tais como anisotropia, formato irregular, composição variável, dentre outras. Modelos simplificados não poderiam, em princípio, refletir, mesmo que de maneira simplista, tais particularidades e, portanto, não passariam de tentativas de ajuste estatístico dos dados de secagem.
- O modelo utilizado tem por base e é coerente com os princípios da termodinâmica de processos irreversíveis; a complexidade do modelo surge devido ao caráter igualmente complexo do produto a ser seco, caráter este expresso pelas propriedades físicas.

- Modelos de igual nível de complexidade já foram apresentados tanto na própria literatura de secagem (LUIKOV, 1966; PHILIP e DE VRIES, 1957, dentre outros) quanto na literatura pertinente de escoamento de água ou poluentes em solos (ŠIMŮNEK et al., 2008)
 - Uma vez resolvidos, modelos complexos podem ser rapidamente utilizados por uma vasta gama de interessados; exemplos fáceis de citar incluem inúmeros pacotes de programas com base em elementos, volumes e diferenças finitas, utilizados para uma infinidade de problemas de engenharia e o programa Hydrus, de alta complexidade, que permite a análise de problemas de infiltração de água em solos.
 - Este trabalho mostrou toda a técnica necessária para resolver o problema de secagem de produtos agrícolas por meio de funções de base radial. O caráter inovador apresentado consistiu na técnica de resolver o sistema de duas equações diferenciais parciais com características hiperbólicas e lidar com o termo difusivo com coeficiente altamente não linear.
 - O motivo fundamental para o uso de coordenadas cilíndricas foi garantir a possibilidade de, eventualmente, se resolverem, com o modelo proposto, uma série de problemas de secagem envolvendo produtos com geometrias axissimétricas. As soluções aqui apresentadas também serviram para assegurar a solução do problema de secagem em coordenadas esféricas.
- b. Faz sentido o uso de uma geometria esférica para modelar um grão como o de trigo.*

De fato:

- Existem analogias que utilizam a esfericidade de corpos para determinar valores dos coeficientes de transferência de calor e massa (por exemplo, as expressões de Chilton-Colburn, 1934). Deve-se notar que, uma vez conhecidos os coeficientes convectivos, pode-se determinar a taxa de secagem.
- A característica anisotrópica do trigo e a presença de três componentes principais, endosperma, fibra e gérmen, Figura 2.18, é amortizada pela suposição de simetria e isotropia. Deve-se notar que o endosperma e a

parte fibrosa são responsáveis por, aproximadamente, 82-85% e 13-15% do peso do trigo (valor obviamente dependente da variedade) (BROOKER et al., 1992). Modelos mais complexos poderão incluir todos os componentes, mas, tal abordagem ainda não foi feita. No modelo proposto neste trabalho, a presença dos componentes endosperma e fibra aparecem por meio da variação dos coeficientes fenomenológicos com o teor de água e temperatura e os valores dos coeficientes convectivos.

- A pressuposição de formato esférico leva a um modelo que reduz o efeito de ponta (região de menor diâmetro ou mais delgada) no perfil de teor de água e temperatura do grão de trigo. Em outras palavras, os fluxos de calor e de massa são amenizados nas regiões com formatos mais delgados. Entretanto, o valor médio dos diversos coeficientes e perfis deve refletir as condições reais de fluxos e perfis de temperatura e de massa, em termos de ordem de grandeza, pois as curvas de secagem e de temperatura média dos grãos foram obedecidas, como mostrados anteriormente e discutido à frente.

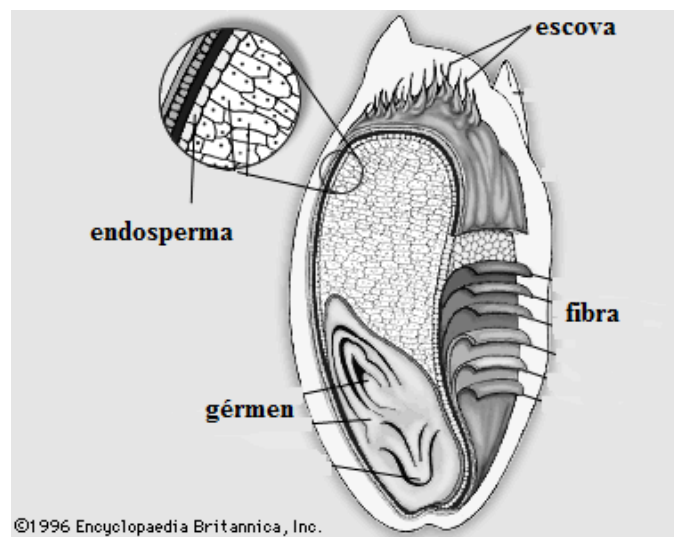


Figura 2.18. Grão de trigo (Fonte:Encyclopaedia Britannica, <http://www.britannica.com>)

c. *Acurácia dos modelos de secagem: O efeito de condições de contorno*

Novamente, os dois tipos de erros definidos anteriormente foram modificados para avaliar os diferentes modelos quanto ao seu grau de aproximação em relação aos dados experimentais. O erro máximo (Emáx) é definido por:

$$E^{\infty} = \max_{0 \leq i \leq N} \left| \overline{M}_{\text{predito}_i} - \overline{M}_{\text{experimental}_i} \right| \quad (62)$$

O erro médio quadrático RMS é definido por:

$$E^2 = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \overline{M}_{\text{predito}_i} - \overline{M}_{\text{experimental}_i} \right|^2} \quad (63)$$

A Tabela 2.6 mostra os erros associados ao uso de coordenadas esféricas e cilíndricas e condições de contorno de Dirichlet e convectivas na simulação do processo de secagem para as condições deste trabalho.

Tabela 2.6. Acurácia dos modelos de secagem deste trabalho

Coordenadas	Condição de Contorno	26,7°C		47°C		67,5°C		87,8°C	
		RMS	Emáx	RMS	Emáx	RMS	Emáx	RMS	Emáx
Esféricas	Dirichlet	0,0025	0,0045	0,0021	0,0045	0,0050	0,0105	0,0038	0,0096
	Convecção	0,0023	0,0041	0,0028	0,0059	0,0052	0,0098	0,0035	0,0066
Cilíndricas	Convecção	0,0039	0,0073	0,0036	0,0052	0,0053	0,0100	0,0040	0,0065

A Tabela 2.6 permite inferir que:

- O modelo proposto, em qualquer uma de suas formas satisfaz plenamente a condição de acurácia dos processos de secagem, com erro RMS inferior a 0,0053 e erro máximo inferior a 0,0105, para todas as condições de secagem, que envolveram 4 temperaturas de bulbo seco, 4 valores de umidade relativa do ar de secagem, 3 teores iniciais de água e 4 velocidade do ar.
- Ao todo, foram ajustados 3 dados de k_1^* , k_v^* e h_m^* para cada condição experimental, ou seja, um total de 6 dados, já que os coeficientes variaram apenas com a condição de contorno (Dirichlet e convecção), para todas as condições experimentais. O modelo, portanto, é eficiente, no sentido de

minimizar o número de coeficientes necessário para definir a secagem em faixa tão ampla de condições de secagem.

- O modelo de Dirichlet é apropriado para simular a secagem. Entretanto, no caso de interesse em secagem de sementes, o perfil mais íngreme de temperatura e teor de água pode levar a valores mais elevados de tensões hídricas e térmicas do que era de se esperar, apesar de os perfis de temperatura no centro ser aproximadamente idênticos.

2.4. CONCLUSÕES

Este trabalho apresenta uma ampliação considerável do método de análise de secagem proposto por Fortes et al. (1981), por expor as diferenças entre as soluções com condições de contorno de Dirichlet e convectivas e uso de dois sistemas de coordenadas para garantia de acurácia numérica. Adicionalmente, neste trabalho apresenta-se o método de FBR cúbica modificado para resolver o problema de transferência simultânea de calor e massa em um único grão de trigo com formato esférico em coordenadas esféricas e cilíndricas. O método de FBR modificado, proposto neste trabalho, mostrou-se adequado para resolver problemas de secagem de camada fina sob condições de contorno de Dirichlet ou de convecção na superfície do grão. Apesar do modelo em coordenadas esféricas e condição de contorno de Dirichlet fornecer bons resultados quando comparado aos dados experimentais, o modelo com condição de contorno convectiva é, fisicamente, mais próximo da realidade.

Pôde-se observar que a secagem se processa por meio de uma frente móvel de evaporação sendo essa mais evidente em temperaturas maiores que $67,0^{\circ}\text{C}$. O esquema FBR levou a soluções sem falsas difusões e ou, dispersão numérica para temperatura de secagem variando entre $26,7^{\circ}\text{C}$ e $87,8^{\circ}\text{C}$.

Apresentam-se soluções do problema de secagem para dois tipos de condição de contorno: Dirichlet e convectivas. A imposição das condições de contorno de Dirichlet leva a fluxos de massa e de calor inicialmente elevados. No caso de secagem em baixa temperatura ($26,7^{\circ}\text{C}$), os resultados numéricos mostram predomínio do fluxo de líquido em relação ao fluxo de vapor na superfície do grão,

em nível superior ao predito pelas condições de Dirichlet, que forçaram a rápida evaporação na superfície. Pode-se inferir dessa afirmativa que, pela presença dominante de água, há pequeno stress hídrico. Constatou-se, numericamente, que o fluxo de vapor passa a ser dominante em alta temperatura de secagem, 67,5°C, mas, menos dominante que no caso de condição de Dirichlet. Discutem-se flutuações dos fluxos de massa que ocorrem tanto na superfície do grão quanto em sua parte interna e conclui-se que são devidas ao caráter profundamente não linear do processo de secagem.

As comparações entre o desempenho do método de FBR modificado e os dados experimentais de Fortes et al. (1981) mostraram que a metodologia proposta é acurada e competitiva para resolver problemas de secagem de um único grão esférico utilizando coordenadas esféricas e cilíndricas tanto com condição de contorno de Dirichlet quanto convectiva na superfície do grão.

Apresentou-se, também, uma breve discussão sobre os efeitos de forma, composição do grão e anisotropia, sobre os resultados de simulação e, conseqüentemente, sobre a validade do modelo.

2.5. REFERÊNCIAS

ABALONE, R.; GASTÓN, A.; CASSINERA, A.; LARA, M. A. Thin layer drying of amaranth seeds. *Biosystems Engineering*, v. 93, n.2, pp. 179–188, 2006.

BALADI, J. Y. *Transient heat and mass transfer in soils*. Tese de Doutorado, Purdue University, 1975.

BASUNIA, M. A.; ABE, T. Thin-layer solar drying characteristics of rough rice under natural convection. *Journal of Food Engineering*, v. 47, n. 4, pp. 295-301, 2001.

BENNAMOUN; L.; BELHAMRI, A. Numerical simulation of drying under variable external conditions: Application to solar drying of seedless grapes. *Journal of Food Engineering*, v. 76, n .2, pp. 179–187, 2006.

- BIXLER, N. An improved time integrator for finite element analysis. *Communications in Applied Numerical Methods*, v.5, pp. 69-78, 1989.
- BROOKER, D. B. *Mathematical model of the psychrometric chart*. Trans. ASAE, v.10, pp. 558-560, 1967.
- BROOKER, D.B.; BAKER-ARKEMA, F.W.; HALL, C.W. *Drying and Storage of Grains and Oilseeds*. New York: The AVI Publishing Company, 1992.
- BROWN, D., LING, L., KANSA, E. e LEVESLEY, J. On approximate cardinal preconditioning methods for solving PDEs with radial basis functions. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 29, n. 4, pp. 343–353, 2005.
- CAVALCANTI MATA, M.E.R.M.; ALMEIDA, F.A.C.; DUARTE, M.E.M. *Secagem de sementes*. In: ALMEIDA, F.A.C; DUARTE, M.E.M.; CAVALCANTI MATA, M.E.R.M. (Eds.). *Tecnologia de armazenagem em sementes*. Campina Grande: Universidade Federal de Campina Grande, 2006.
- CHILTON, T. H.; COLBURN, A. P. Mass transfer (absorption) coefficients, prediction from data on heat transfer and fluid friction. *Id-EC*, v. 26, pp. 1183, 1934.
- CIHAN, A.; KAHVECI, K., HACIHAFIZOĞLU, O. Modelling of intermittent drying of thin layer rough Rice. *Journal of Food Engineering*, v. 79, n.1, pp. 293–298, 2007.
- CRANK, J. *Mathematics of Diffusion*. Oxford: Oxford University Press, 1979.
- DEHGHAN, M.; TATARI, M. Determination of a control parameter in a one-dimensional parabolic equation using the method of radial basis functions. *Mathematical and Computer Modelling*, v. 44, n. 11-12, pp. 1160–1168, 2006.
- DRISCOLL, T. A.; HERYUDONO, A. R. H. Adaptive residual subsampling methods for radial basis function interpolation and collocation problems. *Computers and Mathematics with Applications*, v. 53, n. 6, pp. 927–939, 2007.
- FASSHAUER, G. E.) *Meshfree approximation methods with matlab*, World Scientific Publishers, Singapore, 2007.

FORTES, M. *A non-equilibrium thermodynamics approach to transport phenomena in capillary porous media with special reference to drying of grains and foods*. Tese de Doutorado em Engenharia Agrícola e Biológica, Purdue University, 1978.

FORTES, M.; OKOS, M. R. *Drying theories: their bases and limitations as applied to food and grain*. In A. Mujamdar (Ed.). *Advances in Drying* (Vol. 1, pp. 119-154). Washington: Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

FORTES, M.; OKOS, M. R. Heat and Mass Transfer in Hygroscopic Capillary Extruded Products. *AIChE Journal*, v. 27, n. 2, pp. 255-262, 1981a.

FORTES, M.; OKOS, M. R. *Non-equilibrium thermodynamics approach to heat and mass transfer in corn kernels*. *Trans. ASAE*, v. 24, pp. 761-769, 1981b.

FORTES, M.; OKOS, M. R.; BARRETT JR., J. R. Heat and Mass Transfer analysis of intra-kernel wheat drying and rewetting. *Journal of Agricultural Engineering Research*, v.26, pp. 109-125, 1981.

FORTES, M.; FERREIRA, W.R. The one-dimensional transient diffusional method: finite element adaptive solutions to convection-diffusion problems. *International Journal of Thermal Sciences*, v. 38, pp. 780-796, 1999.

FRANÇA, A. S.; FORTES, M.; HAGHIGHI, K.. Numerical simulation of intermittent and continuous deep-bed drying of biological materials. *Drying Technology*, v.12, n. 7, pp. 1537-1560, 1994.

GASTÓN, A. L.; ABALONE, R. M.; GINER, S. A. Wheat drying kinetics. Diffusivities for sphere and ellipsoid by finite elements. *Journal of Food Engineering*, v. 52, n. 4, pp. 313-322, 2002.

GHOSH, P. K.; JAYAS, D. S.; SMITH, E. A.; GRUWEL, M. L. H.; WHITE, N. D. G. Mathematical modelling of wheat kernel drying with input from moisture movement studies using magnetic resonance imaging (MRI), Part I: Model development and comparison with MRI observations. *Biosystems Engineering*, v. 100, n. 3, pp. 389 - 400, 2008a.

GHOSH, P. K.; JAYAS, D. S.; SMITH, E. A.; GRUWEL, M. L. H.; WHITE, N. D. G. Mathematical modelling of wheat kernel drying with input from moisture movement studies using magnetic resonance imaging (MRI), Part II: Model comparison with published studies. *Biosystems Engineering*, v. 100, n. 4, pp. 547–554, 2008b.

GOTO, Y.; FE, Z.; KAN, S.; KITA, E. Options valuation by using radial basis function approximation. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 31, n. 10, pp. 836-843, 2007.

GRESHO, P.M.; LEE, R.L.; SANI, R.L. *On the time dependent solution of the incompressible Navier-Stokes equation in two and three dimensions*. In: RECENT ADVANCES IN NUMERICAL METHODS IN FLUIDS, v. 1, Swansea: Pineridge Press, pp. 27-79, 1980.

HAGHIGHI, K.; IRUDAYARAJ, J.; STROSHINE, R. L.; SOKHANSANJ, S. *Grain kernel drying simulation using the finite element method*. Trans. ASAE, v. 33, pp. 1957–1965, 1990.

HAGHIGHI, K.; AGUIRRE, C. G. Adaptive and stochastic finite element analysis in drying. *Drying Technology*. v.17, n. 10, pp. 2037-2053, 1999.

HOFFMAN, J.D. *Numerical Methods for Engineers and Scientists*. McGraw-Hill, New York, 1992.

IRUDAYARAJ, J.; HAGHIGHI, K.; STROSHINE, R. L. Finite element analysis of drying with application to cereal grains. *J. Agric. Eng. Research*, v. 53, n. 4, pp. 209–229, 1992.

JAYAS, D. S.; GHOSH, P. K. Preserving quality during grain drying and techniques for measuring grain quality. In: Proceedings of the 9th International Working Conference on Stored Product Protection (Lorini I; Bacaltchuk B; Beckel H; Deckers D; Sunfeld E; dos Santos J P; Biagi J D; Celaro J C; Faroni L R D A; Bortolini L de O F; Sartori M R; Elias M C; Guedes R N C; da Fonseca R G; Scussel V M, eds), pp 969–981. Brazilian Post-harvest Association, Campinas, Brazil, 2006.

JIA, C.; SUN, D.; CAO, C. Mathematical simulation of temperature and moisture fields within a grain kernel during drying. *Drying Technology*, v. 18, n. 6, pp. 1305 - 1325, 2000.

KANSA, E. J., HON, Y. C. Circumventing the ill-conditioning problem with multiquadric radial basis functions: applications to elliptic partial differential equations. *Computers and Mathematics with Applications*, v. 39, n. 7-8, pp. 123-137, 2000.

KASHANINEJAD M.; MORTAZAVI, A.; SAFEKORDI, A.; TABIL, L. G. Thin-layer drying characteristics and modeling of pistachio nuts. *Journal of Food Engineering*, v. 78, n. 1, pp. 98–108, 2007.

KAZARIAN, E. A.; HALL, C. W. *Thermal properties of grains*. Trans. ASAE, v.8, pp. 33-37, 1965.

KOC, M. B.; BOZTOSUN, I.; BOZTOSUN, D. *On the Numerical Solution of Black-Scholes Equation*. In: *International Workshop On Meshfree Methods, 2003*, Lisbon. Anais..., (2003), CD-ROM, pp. 6, 2003.

KULASIRI, D.; SAMARASINGHE, S. Modelling heat and mass transfer in drying of biological materials: a simplified approach to materials with small dimensions. *Ecological Modelling*, v. 86, n. 2-3, pp. 163-167, 1996.

LÓPEZ, I. I. R.; SÁNCHEZ, C. E. M.; VIVALDO, R. C.; LARA, E. H. Mathematical modeling and simulation of batch drying of foods in fixed beds with airflow reversal. *Journal of Food Engineering*, v. 89, n.3, pp. 310–318, 2008.

LUIKOV, A. V. *Heat and Mass Transfer in Capillary Bodies*. Oxford: Pergamon Press, 523p., 1966.

MOHAPATRA, D.; RAO, P. S. A thin layer drying model of parboiled wheat. *Journal of Food Engineering*, v. 66, n.4, pp. 513–518, 2005.

MUJUMDAR, A. S. An overview of innovation in industrial drying: current status and R&D needs. *Transp. Porous Med.*, v. 66, n. 1-2, pp. 3–18, 2007.

MUJUMDAR, A. S.; LAW, C. L. Drying Technology: Trends and Applications in Postharvest Processing. *Food Bioprocess Technol*, v. 3, n. 6, pp. 843–852, 2010.

NAWIRSKA, A.; FIGIEL, A.; KUCHARSKA, A. Z.; SOKÓŁ-LEĆTOWSKA, A.; BIESIADA, A. Drying kinetics and quality parameters of pumpkin slices dehydrated using different methods. *Journal of Food Engineering*, v. 94, n. 1, pp. 14–20, 2009.

OLIVEIRA, V. A. B.; LIMA, A. G. B. Drying of wheat based on the non-equilibrium thermodynamics: A numerical study. *Drying Technology*, v. 27, n. 2, pp. 306–313, 2009.

PABIS, S.; JAYAS, D. S.; CENKOWSKI, S. *Grain drying: theory and practice*. John Wiley & Sons Inc., 1998.

PARTI, M. Selection of mathematical models for drying grain in thin-layers. *Journal of Agricultural Engineering Research*, v. 54, n. 4, pp. 339-352, 1993.

PHILIP, J. R.; DE VRIES, D. A. Moisture movement in porous materials under temperature gradients. *Trans. Amer. Geophys. Unin.*, v. 38, n. 2, pp. 222-232, 1957.

RANZ, W. E.; MARSHALL, W. R., Jr. *Evaporation from drops. Part I*. Chem. Engng Prog., v.48, n. 3, pp. 141-146, 1952a.

RANZ, W. E.; MARSHALL, W. R., Jr. *Evaporation from drops. Part II*. Chem. Engng Prog., v.48, n. 4, pp. 173-180, 1952b.

SARRA, S. A. Adaptive radial basis function methods for time dependent partial differential equations. *Applied Numerical Mathematics*, v. 54, n. 1, pp. 79–94, 2005.

SANDER, A. Thin-layer drying of porous materials: Selection of the appropriate mathematical model and relationships between thin-layer models parameters. *Chemical Engineering and Processing*, v. 46, n. 12, pp. 1324–1331, 2007.

SANTOS, G. T.; SOUZA, M. C.; FORTES, M. Use of radial basis functions for meshless numerical solutions applied to financial engineering barrier options. *Pesquisa Operacional*, v. 29, n. 2, pp. 419-437, 2009.

SANTOS, G. T.; FORTES, M.; MARTINS, J. H. *Aplicação do método de função de base radial a problemas unidimensionais de dispersão de contaminante em solo não*

saturado. In: VI Congresso Ibérico de Agro-Engenharia, 2011, Évora, Portugal. Comunicações finais do VI Congresso Ibérico de Agro-Engenharia, Évora, Portugal, 2011, CD-ROM, ISBN: 978-972-778-113-3.

ŠIMŮNEK, J.; ŠEJNA, M.; SAITO, H.; SAKAI, M.; van GENUCHTEN, M. T. The HYDRUS-1D software package for simulating the movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated media, Version 4.08, *HYDRUS Software Series 3*, Department of Environmental Sciences, University of California Riverside, Riverside, California, USA, pp. 330, 2008.

SINICIO, R.; MUIR, W. E.; JAYAS, D. S.; CENKOWSKI, S. Thin-layer drying and wetting of wheat. *Postharvest Biology and Technology*, v. 5, n. 3, pp. 261-275, 1995.

YANG, W.; JIA, C.-C.; SIEBENMORGEN, T. J.; HOWELL, T. A.; CNOSSEN, A. G. *Intra-kernel moisture responses of rice to drying and tempering treatments by finite element simulation*. Transactions of the ASAE, v. 45, pp. 1037–1044, 2002.

WONGWISES, S.; THONGPRASERT, M. Thin layer and deep bed drying of long grain rough rice. *Drying Technology*, v. 18, n. 7, pp. 1583- 1599, 2000.

WU, B.; YANG, W.; JIA, C. A three-dimensional numerical simulation of transient heat and mass transfer inside a single rice kernel during the drying process. *Biosystems Engineering*, v. 87, n. 2, pp.191–200, 2004.

ZHANG, Y. Solve partial differential equations by two or more radial basis functions. *Applied Mathematics and Computation*, v. 181, n. 1, pp. 793–801, 2006.

CAPÍTULO 3

EFEITO DA FORMA DO GRÃO DE TRIGO NA AVALIAÇÃO DAS PROPRIEDADES FENOMENOLÓGICAS RELACIONADAS À SECAGEM: UMA ABORDAGEM DA TERMODINÂMICA DE PROCESSOS IRREVERSÍVEIS

RESUMO

Grãos cereais são anisotrópicos, termo-sensíveis e biologicamente degradáveis sob variações psicrométricas adversas. Portanto, a análise da transferência de calor e massa, que ocorre sob condições de secagem, é complexa. Há várias variáveis que afetam a secagem e qualidade final do produto; as mais importantes incluem a forma geométrica e composição biológica do grão, as propriedades termofísicas e o grau de anisotropia. Além das propriedades do grão, a definição das condições de secagem do ar requer a especificação do uso final do produto seco e o custo associado. Este estudo teve como objetivo analisar a secagem de um grão de trigo com formatos de elipsóide prolato e de esfera a fim de melhor definir o modelo apropriado para simular o processo de secagem e permitir eventual projeto de secadores com minimização de danos causados pelos stresses hídrico e térmico. Utilizou-se neste trabalho, para simular a secagem de trigo, um modelo embasado na termodinâmica de processos irreversíveis composto de um sistema de duas equações diferenciais parciais não lineares, que permitem definir os perfis de temperatura e de teor de água durante o processamento. O esquema de solução numérica consistiu de uma forma modificada do método de funções de base radial cúbica, utilizado para resolver o modelo em coordenadas cilíndricas, com condições de contorno convectivas. Os coeficientes obtidos incluem os coeficientes de transporte de líquido, vapor e de convecção de massa. Os resultados compararam-se, favoravelmente, com os resultados simulados e com os dados experimentais de Fortes et al. (1981). Apresentou-se uma breve discussão a respeito do efeito de forma e anisotropia na modelagem de secagem. Apresentaram-se os resultados para a condição de secagem especificada pela temperatura de bulbo seco de 47,0°C, umidade relativa de 33,8%, teor de água inicial do grão de trigo de 0,211 (base seca) e velocidade do ar de 1,5 m/s.

PALAVRAS-CHAVE: termodinâmica irreversível, modelagem de secagem, secagem de um único grão de trigo, formato do grão de trigo

EFFECT OF WHEAT KERNEL SHAPE ON THE EVALUATION OF DRYING-RELATED PHENOMENOLOGICAL PROPERTIES: AN IRREVERSIBLE THERMODYNAMICS APPROACH

ABSTRACT

Cereal grains are anisotropic, thermo-sensitive and biologically degradable under variations of psychrometric conditions. Therefore, analysis of mass and heat transfer, occurring under drying conditions, is complex. There are several variables that affect drying and the final product quality; the most important include the kernel geometric shape and biological composition, thermophysical properties and degree of anisotropy. Besides kernel properties, definition of the drying air conditions requires the specification of the final use of the dry product and the associated cost. This study aimed to analyze drying of a wheat kernel with prolate ellipsoidal and spherical shapes in order to better define the appropriate model to simulate the drying process and allow eventual dryer project with minimization of thermal and hydro stress damage. This work uses a model grounded on thermodynamics of irreversible processes consisting of a system of two nonlinear partial differential equations, which allows defining the profiles of temperature and moisture content during processing. The numerical solution scheme consisted of a modified form of the cubic radial basis functions, used to solve the model in cylindrical coordinates, with convective boundary conditions. The obtained coefficients included the transport coefficients of liquid, vapor and mass convection. The results compared favorably with experimental data and simulated results from Fortes et al. (1981). We present a brief discussion on the effect of shape and anisotropy on drying modeling. Results are presented for the drying condition specified by the air dry bulb temperature of 47.0 ° C, relative humidity of 33.8%, wheat kernel initial moisture content of 0.211 (dry basis) and air velocity of 1.5 m/s.

KEYWORDS: irreversible thermodynamics, drying modeling, single wheat kernel drying, wheat kernel shape

3.1.INTRODUÇÃO

Processos de secagem são operações unitárias importantes em diversas indústrias tais como indústrias química, metalúrgica, de papel, de madeira, de alimentos, de produtos agrícolas, de tratamento de resíduos, têxtil, dentre outras. Os processos de secagem têm sido amplamente estudados por consumir muita energia e ter um efeito decisivo na qualidade dos produtos secos (MUJUMDAR, 2007; MUJUMDAR e LAW, 2010).

Nas indústrias químicas e de produtos agrícolas, de particular importância para o presente trabalho, a secagem é um dos processos mais importantes e é utilizada no processamento de alimentos e armazenagem de grãos. O objetivo básico da secagem de alimentos é reduzir o teor de água do produto a níveis considerados seguros, adequados para o armazenamento. As principais vantagens do processo de secagem são minimizar o desenvolvimento de microorganismos, de insetos e de reações indesejáveis que, normalmente, causam a deterioração dos produtos. O processo de secagem também ajuda a manter a estabilidade mecânica (resistência) do produto e diminuir o seu peso e custo de transporte (BROOKER et al. 1992; JAYAS e GHOSH, 2006; LÓPEZ et al., 2008; GHOSH et al., 2008b; NAWIRSKA et al., 2009).

Sob o ponto de vista físico, secagem é um processo que retira parte da umidade contida no produto por meio de transferência simultânea de calor e massa entre o produto e o ar de secagem. As taxas às quais estas transferências ocorrem dependem principalmente da estrutura e composição do produto a ser seco e das condições externas do meio de secagem tais como temperatura, umidade e velocidade do ar. A análise da transferência de calor e massa é complexa no caso de materiais biológicos e, mais especificamente, de grãos cereais. Os grãos são produtos higroscópicos capilares porosos cujos poros são preenchidos com água e ar. A variedade, maturidade fisiológica durante a colheita, secagem e reumidecimento enquanto no campo, geometrias complexas e anisotropia estão entre os fatores que aumentam a complexidade da análise da transferência de calor e massa nos grãos (FORTES et al., 1981; BROOKER et al., 1992; CAVALCANTI MATA et al., 2006).

A simulação e posterior análise de secagem de grãos em camada espessa têm por base, em geral, equações de secagem de camada fina de grãos. Portanto, a acurácia do modelo de camada espessa depende da exatidão do modelo de secagem de camada fina utilizado. O conceito de camada fina é ainda mais necessário, uma vez que é usado na avaliação de tensões hídricas e térmicas que podem originar fissuras e eventual comprometimento da qualidade de grãos durante o processo de secagem. Portanto, é de suma importância que o processo de secagem de camada fina seja bem compreendido e que o modelo matemático utilizado seja acurado (WONGWISES e THONGPRASERT, 2000; BASUNIA e ABE, 2001; YANG et al., 2002).

A partir de uma revisão de literatura, encontram-se vários modelos matemáticos para descrever a cinética de secagem de grãos em camada fina. Em geral, estes modelos são classificados como teóricos, semi-teóricos ou semi-empíricos e empíricos.

Os modelos teóricos têm por base mecanismos de transporte de água no interior do produto e/ou a termodinâmica de processos irreversíveis (BROOKER et al., 1992; PABIS, 1998; CAVALCANTI MATA et al., 2006; SANDER, 2007). Esses modelos refletem mais adequadamente a física do processo de migração de água e da distribuição de temperatura no interior de materiais higroscópicos capilares porosos e incluem a possibilidade de se aplicarem condições de contorno e de se usarem propriedades variáveis. Entretanto, seu uso requer o emprego de técnicas computacionais envolvendo análise numérica complexa, pois não há soluções analíticas para a maioria dos modelos matemáticos resultantes.

Dentre os principais modelos teóricos de camada simples, observa-se uma preferência dentre os pesquisadores pelos modelos mecanísticos como os modelos de difusão líquida e/ou de difusão de vapor (PHILIP e De VRIES, 1957; PARTI, 1993; JIA et al., 2000; GASTÓN et al., 2002; YANG et al., 2002; WU et al., 2004; BENNAMOUN e BELHAMRI, 2006; GHOSH et al., 2008a e 2008b). Estes modelos, em geral, são utilizados com condições de contorno especificadas e propriedades termofísicas constantes (OLIVEIRA e LIMA, 2009).

Ghosh et al. (2008a, b) propuseram um modelo simplificado, embora tridimensional, para analisar o processo de secagem de um grão de trigo, com uma

série de aproximações incluindo isotropia, ausência de fibra, mas, presença de germen e propriedades físicas sem variação espacial explícita; os dados dos autores mostram que o uso do modelo não permitiu prever adequadamente os dados experimentais.

Encontram-se também na literatura modelos teóricos mais sofisticados como os originados da termodinâmica de processos irreversíveis e/ou modelos mistos (LUIKOV, 1966; FORTES et al., 1981; HAGHIGHI et al., 1990; IRUDAYARAJ et al., 1992; KULASIRI e SAMARASINGHE, 1996; OLIVEIRA e LIMA, 2009).

Os modelos semi-teóricos têm geralmente por base a lei de resfriamento de Newton aplicada à transferência de massa. Eles tentam fazer um compromisso entre a teoria e a facilidade de uso do modelo. Os exemplos mais clássicos de modelos semi-teóricos são os modelos de Page e de Lewis (PARTI, 1993; SINÍCIO et al., 1995; WONGWISES e THONGPRASERT, 2000; BASUNIA e ABE, 2001; ABALONE et al., 2006; CIHAN et al., 2007; KASHANINEJAD et al., 2007). Mohapatra e Rao (2005), usaram vários modelos semi-teóricos e empíricos para estudar as características de secagem do trigo parboilizado.

Já os modelos empíricos se ajustam bem aos dados de secagem, mas, como todos os modelos estatísticos, não devem ser usados fora de sua faixa de medidas experimentais. Assim, não acompanham a evolução interna dos teores de água e da temperatura e, portanto, podem levar a sérios problemas de erros ao serem utilizados em simulação de secagem em camada espessa, quando as condições de contorno mudam continuamente. Estes modelos não levam em consideração os fundamentos da termodinâmica pertinentes aos processos de secagem. Esses modelos fornecem uma relação direta entre o tempo de secagem e o teor de água médio do produto (PARTI, 1993; CAVALCANTI MATA et al., 2006). Exemplos de modelos empíricos são os modelos de Thompson e de Wang-Sing (MOHAPATRA e RAO, 2005; ABALONE et al., 2006; CIHAN et al., 2007; KASHANINEJAD et al., 2007). De forma análoga à explicação acima, os modelos empíricos por não refletirem a física do problema de migração interna de água e vapor (FORTES e OKOS, 1980; SANDER, 2007), ou seja, por não serem acoplados, somente podem ser usados, com possíveis restrições, para interpolações sob as condições experimentais para as quais foram desenvolvidos. Há outro problema associado ao uso de modelos empíricos em

processos de tratamento térmico: os parâmetros dos modelos ditos empíricos ou teóricos simplificados são, geralmente, obtidos para condições constantes de secagem.

Há vários trabalhos recentes sobre modelagem discretizada do processo de secagem em camada fina de grãos de diferentes formatos (GHOSH et al., 2008a). No entanto, a escolha do formato adequado e do sistema de coordenadas apropriado para a análise dos fenômenos de transporte não é óbvia (FORTES et al., 1981). Além disso, a escolha do modelo de geometria do grão utilizado para simplificar a simulação do processo de secagem é importante devido à grande influência na determinação dos coeficientes de condutividade de líquido e vapor e, conseqüentemente, na predição das taxas de transferência de calor e massa (GONG et al., 1997). De fato, vários pesquisadores supuseram em seus estudos de secagem que os grãos tivessem formato simples, tais como cilindros (FORTES e OKOS, 1981a; GONG et al., 1997), esferas (FORTES et al., 1981; FORTES e OKOS 1981b; PARTI, 1993; GASTÓN et al., 2002); e corpos esferoidais prolato e oblato (GONG et al., 1997; JIA et al., 2000; GASTÓN et al., 2002; LI et al., 2004; OLIVEIRA e LIMA, 2009). Assim, por exemplo, sabe-se que grãos de trigo e de arroz têm formato aproximado de elipsóide prolato. Entretanto, não se sabe a cerca do efeito da excentricidade dos grãos sobre a definição dos coeficientes de transporte de calor e massa.

De particular importância para este trabalho, FORTES (1978) e FORTES et al. (1981) propuseram uma teoria de secagem de produtos higroscópicos capilares porosos, baseada na termodinâmica de processos irreversíveis e na abordagem mecanística. O modelo teve por base o teorema de Onsager e prescinde de especificação de mecanismos de secagem. A força motriz de secagem, obtida dos conceitos termodinâmicos envolvidos é o gradiente de teor de água de equilíbrio local. O modelo resultante foi aplicado à análise de secagem de grãos de milho e trigo considerados esféricos (FORTES et al., 1981; FORTES e OKOS 1981b) e a cilindros de milho extrudado (FORTES e OKOS, 1981a). Oliveira e Lima (2009) aplicaram o modelo de Fortes e Okos (FORTES et al., 1981) para analisar numericamente o transporte simultâneo de calor e massa (líquido e vapor) em grãos de trigo, supostos de formato elipsoidal prolato.

Os modelos utilizados na análise de secagem de grãos consistem em um conjunto de equações diferenciais parciais (EDP) não lineares. Muitas vezes, utilizam-se os métodos numéricos tradicionais como elementos finitos, diferenças finitas e volumes finitos para resolver esses problemas (HAGHIGHI e AGUIRRE, 1999; JIA et al., 2000; OLIVEIRA e LIMA, 2009). Esses autores utilizam esquemas de interpolação local que requerem um complexo procedimento de subdivisão de malhas, principalmente quando aplicados a problemas bi e tridimensionais e geometrias complexas (FRANÇA et al., 1994; KANSA e HON, 2000; DEHGHAN e TATARI, 2006).

Mais recentemente, o método de funções de base radial (FBR) começou a ganhar a preferência de muitos pesquisadores, uma vez que é um método sem malha e pode ser facilmente aplicável a problemas multidimensionais (SARRA, 2005; ZHANG, 2006; DRISCOLL e HERYUDONO, 2007; SANTOS et al., 2009). O método de FBR tem sido utilizado para solucionar problemas de interpolações complexas, bem como para resolver numericamente equações diferenciais parciais (BROWN et al., 2005). A técnica teve uma rápida expansão, devido à sua alta precisão, quando comparada com outras técnicas numéricas (SARRA, 2005). No entanto, na literatura revisada, não há qualquer trabalho sobre a aplicação do método de FBR para resolver o sistema de equações diferenciais parciais não-lineares do tipo associado aos modelos teóricos de secagem de grãos ou alimentos.

Este trabalho aborda aspectos fundamentais da simulação de secagem, não disponíveis na literatura anterior. De fato, ele se justifica pelos seguintes motivos:

1. Fortes et al. (1981) aplicaram o seu modelo presumindo condições de contorno de Dirichlet devido à suposição de que a superfície dos grãos de trigo atingiu o teor de umidade de equilíbrio dentro de 3 a 5 min após o início da secagem. Esta hipótese pode ter levado a uma super ou subestimação da condutividade do líquido e do vapor e perfil de temperatura e teor de água com declividades mais elevadas. Além disso, Fortes et al. (1981) consideraram o grão apenas com formato esférico.
2. A solução numérica de Oliveira e Lima (2009), utilizando coordenadas esferoidais prolatas e o método de volumes finitos, foi coerente quando aplicada a uma condição de secagem. No entanto, no que diz respeito ao formato do trigo,

os autores efetuaram simulações levando em conta apenas uma dimensão fixa do grão de trigo, ou seja, apenas um conjunto de valores dos eixos; falta, portanto, avaliar o efeito da excentricidade sobre os valores estimados das propriedades do grão de trigo.

3. Como mencionado, o trabalho de Ghosh et al. (2008a) apresentaram um modelo simples que foi aplicado a apenas uma condição de secagem. Pode-se, também, afirmar que o método de Ghosh et al. (2008a e b) apresenta uma série de simplificações que merecem análise:

- Os autores supuseram um modelo com apenas dois componentes: endosperma e gérmen. Entretanto, sabe-se que o grão de trigo contém 2-3% de gérmen, 13-17% de película fibrosa (bran) e 80-85% de endosperma (todos os constituintes convertidos para a base seca) (BELDEROK et al., 2000).
- O modelo de secagem proposto não discerne entre fluxos de líquido e vapor, funcionando, portanto, como um modelo simples de difusão líquida, com equações de conservação de massa e energia oriundas das equações de fluxo de Fick e Fourier; simultaneamente, os autores desprezaram o efeito dos termos de gradiente de condutividade térmica ou de massa (ou coeficiente de difusão).
- Os coeficientes convectivos de massa e energia foram obtidos por meio de equações empíricas aplicáveis a escoamentos em torno de cilindros.

Com base na análise exposta, os principais objetivos deste trabalho são:

1. Reavaliar o modelo do processo de secagem de camada fina utilizando a abordagem proposta por Fortes e Okos (1981).
2. Modelar e estudar por meio de soluções numéricas, em coordenadas cilíndricas, o processo de secagem em camada fina, fazendo uso do método de Funções de Base Radial (FBR) Cúbica, considerando o grão de trigo com formato esférico e esferoidal prolato. Obter, assim, os coeficientes de transporte de líquido, vapor e coeficientes de convecção de massa.

3. Investigar, por simulação, o efeito da excentricidade dos grãos de trigo sobre o seu comportamento durante a secagem. Para tal, analisar-se-ão processos de secagem de grãos com formato de elipsóide (excentricidades de 2 e 2,5) e seu efeito sobre as estimativas das propriedades do grão de trigo. Simultaneamente comparar-se-ão os resultados obtidos com resultados análogos referentes a grãos esféricos.
4. Comparar os resultados obtidos por meio das simulações com os testes experimentais apresentados por Fortes et al. (1981) e, assim, validar os resultados da modelagem e as técnicas de solução propostas considerando a condição experimental de secagem com temperatura de bulbo seco de 47,0°C, umidade relativa 33,8%, teor de umidade inicial 0,211 (decimal) e velocidade do ar 1,5 m/s.

3.2. METODOLOGIA

3.2.1. Modelo Físico-Matemático de Secagem em Camada Fina

O modelo proposto por Fortes (1978) e Fortes et al. (1981) tem por base a termodinâmica de processos irreversíveis e conceitos mecanísticos e consistem nas seguintes equações de transferência de calor e massa, aplicáveis a meios higroscópicos capilares-porosos:

- Fluxo de líquido:

$$\vec{J}_l = -\rho_l K_l R_v \ln H \cdot \nabla T - \rho_l K_l \frac{R_v T}{H} \frac{\partial H}{\partial M} \nabla M \quad (1)$$

- Fluxo de vapor:

$$\vec{J}_v = -K_v \left(\rho_{v0} \frac{\partial H}{\partial T} + H \frac{d\rho_{v0}}{dT} \right) \cdot \nabla T - K_v \rho_{v0} \frac{\partial H}{\partial M} \nabla M \quad (2)$$

- Fluxo de calor:

$$\vec{J}_q = -K_T \cdot \nabla T - \left[\rho_l K_l R_v \ln H + K_v \left(\rho_{v0} \frac{\partial H}{\partial T} + H \frac{d\rho_{v0}}{dT} \right) \right] \frac{R_v T^2}{H} \frac{\partial H}{\partial M} \nabla M \quad (3)$$

em que M é o teor de água (base seca), T é a temperatura absoluta [K], H é a umidade relativa (decimal), K_l é a condutividade líquida [s], K_v é a condutividade de vapor [$m^2 \cdot s^{-1}$], K_T é condutividade térmica [$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$], R_v é a constante universal do gás aplicada ao vapor [$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$], ρ_l é a massa específica do líquido [$kg \cdot m^{-3}$], ρ_{v0} é a massa específica de vapor de saturação [$kg \cdot m^{-3}$].

- Conservação de massa:

$$\rho_s \frac{\partial M}{\partial t} = -\nabla \cdot (\vec{J}_l + \vec{J}_v) \quad (4)$$

em que ρ_s é a massa específica do sólido (produto seco) e t é o tempo.

- Conservação de energia:

$$\rho_s c_b \frac{\partial T}{\partial t} - \rho_s L_w \frac{\partial M}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_q - L_v \nabla \cdot \vec{J}_v \quad (5)$$

em que c_b é o calor específico do produto [$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$], L_w é o calor diferencial específico da água no grão [$J \cdot kg^{-1}$], L_v é o calor específico de vaporização da água no grão [$J \cdot kg^{-1}$].

De acordo com Fortes et al. (1981):

1. As equações acima não necessitam de mecanismos específicos para a migração de água.
2. A força motriz isotérmica para ambos os movimentos de líquido e de vapor no interior do grão é tomada como o gradiente do teor de umidade de equilíbrio, como definido por uma isoterma. Assim, a água pode migrar de regiões de menor para regiões de maior teor de água, desde que o efeito do gradiente do teor de água de equilíbrio seja dominante e favoreça este movimento.
3. Conforme expresso pela Equação (1), a umidade na fase líquida pode mover-se de regiões mais frias para mais quentes.
4. O calor de adsorção e o calor latente de vaporização ou condensação da água dentro do meio poroso são considerados na Equação (5).

5. Presume-se que o meio é isotrópico, contínuo e que o encolhimento é negligenciável; estuda-se, portanto, um elipsóide prolato com propriedades médias iguais à de um grão de trigo.

Neste trabalho presume-se também que não há um caminho preferencial para a migração de água.

As condições iniciais e de contorno para secagem convectiva são:

em $t = 0$

$$M(r,0) = M_0 \text{ e } T(r,0) = T_0 \quad (6)$$

em $r = 0$, não há fluxo de massa e calor e, portanto,

$$J_l + J_v = 0 \quad (7)$$

$$J_q = 0 \quad (8)$$

na superfície:

$$J_l + J_v = h_m(M - M_e) \quad (9)$$

$$J_q - L_v J_l = h_T(T_s - T_a) \quad (10)$$

em que h_m é o coeficiente de transferência de massa convectivo [$s.m^{-1}$], M é o teor de água (base seca) e M_e é o teor de água de equilíbrio, h_T é o coeficiente de transferência de calor convectivo [$W.m^2.K^{-1}$], T_s é a temperatura na superfície [K] e T_a é temperatura do ar ambiente [K].

Cabe ressaltar que a condição de contorno na superfície do grão para a equação de conservação de massa, Equação (9), utilizada no presente trabalho é diferente da utilizada por Fortes et al. (1981). No trabalho de Fortes et al. (1981), a condição de contorno na superfície do grão depende da diferença entre pressão de vapor na superfície do grão e a pressão vapor da água no ar ambiente, enquanto que neste trabalho ela depende da diferença entre o teor de água na superfície do grão e o teor de água no meio ambiente.

Propriedades Físicas do Grão de Trigo

A Tabela 3.1 mostra as propriedades físicas de grãos de trigo, usadas para obter a solução numérica das Equações (1) – (10). Com referência essa tabela, K_{ar} é a

condutividade térmica do ar, D_p é o diâmetro equivalente; D_{atm} é o coeficiente de difusão molecular do vapor d'água no ar; Re , Pr e Sc são os números de Reynolds, Prandtl e Schmidt, respectivamente.

Este trabalho requer obter as expressões para as condutividades de líquido e de vapor e o coeficiente de transferência de massa; elas foram obtidas a partir de ajustes entre os valores experimentais e os numéricos do teor de água. As expressões tiveram por base as expressões reportadas por Fortes et al. (1981). Os coeficientes k_l^* , k_v^* e h_m^* são parâmetros de secagem dependentes, em princípio, dos valores iniciais de teor de água e velocidade e umidade relativa do ar de secagem.

Utilizaram-se, nas simulações, a seguinte condição experimental de secagem (FORTES et al., 1981): temperatura de bulbo seco $47,0^\circ\text{C}$, umidade relativa 33,8%, teor de umidade inicial 0,211 (decimal) e velocidade do ar 1,5 m/s.

Tabela 3.1. Propriedades Físicas dos Grãos de Trigo

Propriedade	Expressão ou Valor	Unidade	Referência
Calor de vaporização da água no grão de trigo	$L_v = L_0 + L_w$	J.kg ⁻¹	Fortes (1978)
Calor diferencial específico da água no grão	$L_w = \frac{R_v T^2}{H} \frac{\partial H}{\partial T}$	J.kg ⁻¹	Fortes (1978), Fortes et al. (1981)
Calor de vaporização da água livre	$L_0 = (3,11.10^6) - (2,38.10^3)T$	J.kg ⁻¹	Brooker (1967)
Massa específica do vapor de saturação	$\rho_{v0} = \frac{2,54.10^8}{T} e^{-5200/T}$	kg.m ⁻³	Baladi (1975)
Equação de Isotermas – Equação de Henderson Modificada	$H = 1 - \exp(-5869.T^{-0,7750}.M^{5203.T^{1,363}})$	decimal	Fortes et al. (1981)
Massa específica do sólido (produto seco)	$\rho_s = 1265$	kg.m ⁻³	Fortes et al. (1981)
Calor específico do produto	$C_b = (1396 + 2688.M)/(1 - M)$	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹	Kazarian e Hall (1965)
Dimensões do grão de trigo de mesmo volume	esférico: $R = 1,81.10^{-3}$ elipsóide 1: $a = 1,086.10^{-3}, b = 2,3367.10^{-3}$ elipsóide 2: $a = 9,955.10^{-4}, b = 2,4405.10^{-3}$	m	Fortes et al. (1981)
Condutividade Térmica	$K_T = (0,1170 - 0,003808.M)/(1 - M)$	W.m ⁻¹ .K ⁻¹	Kazarian e Hall (1965)
Condutividade de Líquido	$K_l = k_l^*.H^3.\exp(-1331/T)$	s	*
Condutividade de Vapor	$K_v = k_v^*(T - 273,15)^{0,4100}.(H^{0,1715} - H^{1,1715})$	m ² .s ⁻¹	*
Coefficiente de transferência de calor	$h_T = \frac{K_{ar}}{D_p} (2,0 + 0,6.Re^{1/2}.Pr^{1/3})$	W.m ⁻² .K ⁻¹	Ranz e Marshall (1952a e b)
Coefficiente de transferência de massa	$h_m = h_m^* \frac{D_{atm}}{R_v.T.D_p} (2,0 + 0,6.Re^{1/2}.Sc^{1/3})$	s/m	*

* Este trabalho: Equações de Fortes et al. (1981) modificadas

Equações de Secagem

Apresentam-se as equações de continuidade, Equação (4), e de energia, Equação (5) em coordenadas cilíndricas, considerando simetria axial.

Equação de balanço de massa em coordenadas cilíndricas:

$$\rho_s \frac{\partial M}{\partial t} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{IVT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + K_{IVM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{IVT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + K_{IVM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right) \quad (11)$$

Equação de balanço de energia em coordenadas cilíndricas:

$$\begin{aligned} \rho_s c_b \frac{\partial T}{\partial t} = & \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{qT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{vT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{qM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right) + \\ & + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{vM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{qT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) + L_v \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{vT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{qM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right) + \\ & + L_v \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{vM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right) + \rho_s L_w \frac{\partial M}{\partial t} \end{aligned} \quad (12)$$

3.2.2. Metodologia Numérica

Resolveu-se o conjunto de equações (1)-(10) por meio do método de funções de base radial modificado. Os resultados foram obtidos utilizando o programa computacional Mathcad, uma linguagem de programação matemática simbólica.

Em todos os esquemas numéricos apresentados a seguir, aplicou-se a regra de L'Hospital no caso das singularidades em $r = 0$.

3.2.2.1. Método de Funções de Base Radial Clássico

Ao usar o método de FBR utilizam-se combinações lineares de uma função de base $\phi(x)$ de duas variáveis, expandidas sobre um dado centro de dados dispersos $r_i \in \mathfrak{R}^d, i=1, \dots, N$ e $z_j \in \mathfrak{R}^d, j=1, \dots, N$ para aproximar uma função desconhecida $M(r, z, t)$ por

$$M(r, z, t) = \sum_{j=1}^N \lambda_j(t) \phi(x_j) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \phi \left(\sqrt{(r - r_j)^2 + (z - z_j)^2} \right) \quad (13)$$

em que $x_j = \sqrt{(r-r_j)^2 + (z-z_j)^2}$ é a norma euclidiana e λ_j são os coeficientes a serem determinados.

As funções de base radial mais usuais são (SARRA,2005; FASSHAUER, 2007):

$$\text{Thin plate spline - TPS: } \phi(x_j) = x_j^4 \log(x_j) \quad (14)$$

$$\text{Multiquádrica - MQ: } \phi(x_j) = \sqrt{c^2 + x_j^2} \quad (15)$$

$$\text{Cúbica: } \phi(x_j) = x_j^3 \quad (16)$$

$$\text{Gaussiana: } \phi(x_j) = e^{-c^2 x_j^2} \quad (17)$$

Deve-se notar que os pontos de malha, aqui definidos por x_j , não requerem qualquer regra formal, exceto a definição dos contornos. O método, então, não requer malhas, ou seja, é “sem malha”. Adicionalmente, no caso da extensão óbvia para várias dimensões, o método só requer a colocação de pontos em contornos importantes.

Neste trabalho, utiliza-se apenas a FBR Cúbica, devido à sua simplicidade e acurácia comprovada para outros tipos de problemas e devido à dificuldade associada à escolha de bons valores para o parâmetro de forma c , que depende do tipo de problema (GOTO et al., 2007, FASSHAUER, 2007).

Aplicação do Método de Funções de Base Radial Clássico à Equação de Balanço de Massa

Como se mostra abaixo, a metodologia de FBR para obter a solução numérica da equação de balanço de massa dada por Fortes e Okos (1981) requer discretização da Equação original (13). Desse modo, a equação de balanço de massa em coordenadas cilíndricas, considerando simetria axial, mostrada acima, Equação (11), pode ser discretizada usando o teorema do valor médio (HOFFMAN, 1992; SANTOS et al., 2009):

$$\frac{\partial M(r, z, t)}{\partial t} = f(r, z, t) \approx (1 - \Theta) \cdot f(r_t, z_t, t) + \Theta \cdot f(r_{t+\Delta t}, z_{t+\Delta t}, t + \Delta t) \quad \text{para } 0 \leq \Theta \leq 1 \quad (18)$$

Na Equação acima (18), valores de Θ iguais a 0, 0,5 ou 1 correspondem aos esquemas de Euler explícito, Crank-Nicholson e Euler implícito, respectivamente.

Assim, a forma discretizada da Equação (11) torna-se:

$$\begin{aligned}
& M(r, z, t^n) - M(r, z, t^n + \Delta t) + \Delta t(1 - \Theta) \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{IVT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + K_{IVM} \cdot r \cdot \frac{\partial M(r, z, t)}{\partial r} \right) + \right. \\
& \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{IVT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + K_{IVM} \cdot \frac{\partial M(r, z, t)}{\partial z} \right) \right]^{t^n} + \Delta t \Theta \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{IVT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + K_{IVM} \cdot r \cdot \frac{\partial M(r, z, t)}{\partial r} \right) + \right. \\
& \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{IVT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + K_{IVM} \cdot \frac{\partial M(r, z, t)}{\partial z} \right) \right]^{t^n + \Delta t} = 0
\end{aligned} \tag{19}$$

Nesta equação, n indica o enésimo plano de tempo. Definindo $M(r, z, t^n) = M^n$ e $M(r, z, t^n + \Delta t) = M^{n+1}$, assim, pode-se escrever a equação anterior na forma:

$$\begin{aligned}
& M^{n+1} - \alpha \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{IVT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + K_{IVM} \cdot r \cdot \frac{\partial M^{n+1}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{IVT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + K_{IVM} \cdot \frac{\partial M^{n+1}}{\partial z} \right) \right] = \\
& = M^n + \beta \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{IVT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + K_{IVM} \cdot r \cdot \frac{\partial M^n}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{IVT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + K_{IVM} \cdot \frac{\partial M^n}{\partial z} \right) \right]
\end{aligned} \tag{20}$$

em que $\alpha = \Theta \Delta t$ e $\beta = (1 - \Theta) \Delta t$. Por aproximação, neste trabalho, na Equação (20) e nas seguintes, a não explicitação do tempo implica em cálculo dos parâmetros ou expressões no tempo n ou t^n (ou seja, efetua-se uma avaliação explícita). Definindo os dois novos operadores, H_{left} e H_{right} por:

$$\begin{aligned}
H_{\text{left}} &= M^{n+1} - \alpha \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{\text{IVT}} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + K_{\text{IVM}} \cdot r \cdot \frac{\partial M^{n+1}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{\text{IVT}} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + K_{\text{IVM}} \cdot \frac{\partial M^{n+1}}{\partial z} \right) \right], \\
H_{\text{right}} &= M^n + \beta \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(K_{\text{IVT}} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + K_{\text{IVM}} \cdot r \cdot \frac{\partial M^n}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{\text{IVT}} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} + K_{\text{IVM}} \cdot \frac{\partial M^n}{\partial z} \right) \right]
\end{aligned} \tag{21}$$

a Equação (20) se torna:

$$\sum_{j=1}^N \lambda_j^{n+1} H_{\text{left}} \phi(x_{ij}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j^n H_{\text{right}} \phi(x_{ij}) \quad \text{para } i = 1 \dots N \tag{22}$$

A Equação (22) é um sistema de equações lineares, cuja solução permite obter os coeficientes desconhecidos, λ_j^{n+1} , a partir dos valores conhecidos de λ_j^n no passo de tempo anterior. A partir destes coeficientes, pode-se obter $M(r,z,t)$ por meio da Equação (13).

Aplicação do Método de Funções de Base Radial Clássico à Equação de Balanço de Energia

Após manipulações algébricas, a equação de balanço de energia dada por Fortes e Okos (1981) em coordenadas cilíndricas, a Equação (12), desenvolvida por meio do teorema do valor médio, leva a:

$$\begin{aligned}
& T^{n+1} - \alpha \cdot \frac{1}{\rho_s \cdot c_b} \cdot \left[\begin{aligned} & \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{qT} \cdot r \cdot \frac{\partial T^{n+1}}{\partial r} \right] + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{vT} \cdot r \cdot \frac{\partial T^{n+1}}{\partial r} \right] + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{qM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right] + \\ & + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{vM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{qT} \cdot \frac{\partial T^{n+1}}{\partial z} \right] + L_v \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{vT} \cdot \frac{\partial T^{n+1}}{\partial z} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{qM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right] + L_v \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{vM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right] + \rho_s \cdot L_w \cdot \frac{\partial M}{\partial t} \end{aligned} \right] = \\
& = T^n + \beta \cdot \frac{1}{\rho_s \cdot c_b} \cdot \left[\begin{aligned} & \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{qT} \cdot r \cdot \frac{\partial T^n}{\partial r} \right] + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{vT} \cdot r \cdot \frac{\partial T^n}{\partial r} \right] + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{qM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right] + \\ & + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{vM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{qT} \cdot \frac{\partial T^n}{\partial z} \right] + L_v \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{vT} \cdot \frac{\partial T^n}{\partial z} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{qM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right] + L_v \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{vM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right] + \rho_s \cdot L_w \cdot \frac{\partial M}{\partial t} \end{aligned} \right] =
\end{aligned} \tag{23}$$

Os operadores H_{left} e H_{right} são, agora, definidos por:

$$\begin{aligned}
H_{\text{left}} &= T^{n+1} - \alpha \cdot \frac{1}{\rho_s \cdot c_b} \cdot \left[\begin{aligned} & \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{qT} \cdot r \cdot \frac{\partial T^{n+1}}{\partial r} \right] + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{vT} \cdot r \cdot \frac{\partial T^{n+1}}{\partial r} \right] + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{qM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right] + \\ & + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{vM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{qT} \cdot \frac{\partial T^{n+1}}{\partial z} \right] + L_v \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{vT} \cdot \frac{\partial T^{n+1}}{\partial z} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{qM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right] + L_v \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{vM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right] + \rho_s \cdot L_w \cdot \frac{\partial M}{\partial t} \end{aligned} \right] \\
, \\
H_{\text{right}} &= T^n + \beta \cdot \frac{1}{\rho_s \cdot c_b} \cdot \left[\begin{aligned} & \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{qT} \cdot r \cdot \frac{\partial T^n}{\partial r} \right] + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{vT} \cdot r \cdot \frac{\partial T^n}{\partial r} \right] + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{qM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right] + \\ & + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left[K_{vM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{qT} \cdot \frac{\partial T^n}{\partial z} \right] + L_v \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{vT} \cdot \frac{\partial T^n}{\partial z} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{qM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right] + L_v \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{vM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right] + \rho_s \cdot L_w \cdot \frac{\partial M}{\partial t} \end{aligned} \right] =
\end{aligned} \tag{24}$$

Finalmente, os novos operadores H_{left} e H_{right} , quando aplicados a Equação (22), geram outro sistema de equações lineares de FBR equivalente à forma discretizada da Equação (12).

3.2.2.2. Método de Funções de Base Radial Modificado

Aplicação do Método de FBR Modificado à Equação de Balanço de Massa

A modificação relevante no método de FBR clássico proposta em trabalho anterior (SANTOS et al., 2011) permitiu resolver as equações de balanço de massa e de energia de maneira muito mais eficiente que a abordagem tradicional.

Considerando, coordenadas cilíndricas, o algoritmo proposto para obter, por meio do método de FBR, os diversos termos e, assim, uma aproximação numérica para a solução da equação de balanço de massa, consiste em avaliar ou obter seqüencialmente:

$$1. \quad \frac{\partial M}{\partial r} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_2, \quad \frac{\partial M}{\partial z} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_2 \quad \text{e} \quad \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_1, \quad \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_1 \quad (25)$$

$$2. \quad KMr = \left(K_{IVM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right), \quad KMz = \left(K_{IVM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right) \quad \text{e} \quad KTr = \left(K_{IVT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad KTz = \left(K_{IVT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (26)$$

3. quatro funções de interpolação λ_{kMr} , λ_{kMz} , λ_{kTr} e λ_{kTz} , a partir da relação de interpolação entre ϕ e KMr , ϕ e KMz , ϕ e KTr e ϕ e KTz , respectivamente:

$$KMr = \phi \cdot \lambda_{kMr}, \quad KMz = \phi \cdot \lambda_{kMz}, \quad KTr = \phi \cdot \lambda_{kTr} \quad \text{e} \quad KTz = \phi \cdot \lambda_{kTz} \quad (27)$$

$$4. \quad \text{Pr ovMr} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kMr}, \quad \text{Pr ovMz} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_{kMz}, \quad \text{Pr ovTr} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kTr} \quad \text{e} \quad (28)$$

$$\text{Pr ovTz} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_{kTz}$$

$$5. \quad H_{\text{left}} = \left[M^{n+1} - \alpha \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovMr}^{n+1} + \text{Pr ovMz}^{n+1} + \frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovTr} + \text{Pr ovTz} \right] \right] = \\ = H_{\text{right}} = \left[M^n + \beta \cdot \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovMr}^n + \text{Pr ovMz}^n + \frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovTr} + \text{Pr ovTz} \right] \right] \quad (29)$$

6. Finalmente, os novos operadores, H_{left} e H_{right} , são aplicados à Equação (22), gerando outro sistema de equações lineares FBR que é a forma discretizada proposta para a Equação (11).

Deve-se notar que, no caso de coordenadas cilíndricas:

$$dMdt = \frac{1}{\rho_s} \cdot \left[\frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovMr}^n + \text{Pr ovMz}^n + \frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovTr} + \text{Pr ovTz} \right] \quad (30)$$

Aplicação do Método de FBR Modificado à Equação de Balanço de Energia

No caso da equação relativa ao transporte de energia em coordenadas cilíndricas, o algoritmo proposto para obter, pelo método de FBR, os diversos termos e, assim, uma aproximação numérica para a solução da equação de balanço de energia, consiste em avaliar ou obter seqüencialmente:

$$1. \quad \frac{\partial M}{\partial r} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_2, \quad \frac{\partial M}{\partial z} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_2 \quad \text{e} \quad \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_1, \quad \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_1 \quad (31)$$

$$2. \quad K_{Tr1} = \left(K_{qT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad K_{Tz1} = \left(K_{qT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad K_{Tr2} = \left(K_{vT} \cdot r \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad K_{Tz2} = \left(K_{vT} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right),$$

$$K_{Mr1} = \left(K_{qM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right), \quad K_{Mz1} = \left(K_{qM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right), \quad K_{Mr2} = \left(K_{vM} \cdot r \cdot \frac{\partial M}{\partial r} \right) \quad \text{e} \quad (32)$$

$$K_{Mz2} = \left(K_{vM} \cdot \frac{\partial M}{\partial z} \right)$$

3. oito funções de interpolação λ_{kTr1} , λ_{kTz1} , λ_{kTr2} , λ_{kTz2} , λ_{kMr1} , λ_{kMz1} , λ_{kMr2} e λ_{kMz2} , a partir da relação de interpolação entre ϕ e K_{Tr1} , ϕ e K_{Tz1} , ϕ e K_{Tr2} , ϕ e K_{Tz2} , ϕ e K_{Mr1} , ϕ e K_{Mz1} , ϕ e K_{Mr2} e ϕ e K_{Mz2} , respectivamente:

$$K_{Tr1} = \phi \cdot \lambda_{kTr1}, \quad K_{Tz1} = \phi \cdot \lambda_{kTz1}, \quad K_{Tr2} = \phi \cdot \lambda_{kTr2}, \quad K_{Tz2} = \phi \cdot \lambda_{kTz2},$$

$$K_{Mr1} = \phi \cdot \lambda_{kMr1}, \quad K_{Mz1} = \phi \cdot \lambda_{kMz1}, \quad K_{Mr2} = \phi \cdot \lambda_{kMr2} \quad \text{e} \quad K_{Mz2} = \phi \cdot \lambda_{kMz2} \quad (33)$$

$$4. \quad \text{ProvTr1} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kTr1}, \quad \text{ProvTz1} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_{kTz1}, \quad \text{ProvTr2} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kTr2},$$

$$\text{ProvTz2} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_{kTz2}, \quad \text{ProvMr1} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kMr1}, \quad \text{ProvMz1} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_{kMz1},$$

$$\text{ProvMr2} = \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \lambda_{kMr2} \quad \text{e} \quad \text{ProvMz2} = \frac{\partial \phi}{\partial z} \cdot \lambda_{kMz2} \quad (34)$$

$$\begin{aligned}
5. \quad H_{\text{left}} &= T^{n+1} - \alpha \cdot \frac{1}{\rho_s \cdot c_b} \cdot \left[\begin{aligned} &\frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovTr}1^{n+1} + \text{Pr ovTz}1^{n+1} + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovTr}2^{n+1} + \\ &+ L_v \cdot \text{Pr ovTz}2^{n+1} + \frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovMr}1 + \\ &+ \text{Pr ovMz}1 + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovMr}2 + L_v \cdot \text{Pr ovMz}2 + \rho_s \cdot L_w \cdot \frac{\partial M}{\partial t} \end{aligned} \right] = \\
H_{\text{right}} &= T^n + \beta \cdot \frac{1}{\rho_s \cdot c_b} \cdot \left[\begin{aligned} &\frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovTr}1^n + \text{Pr ovTz}1^n + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovTr}2^n + \\ &+ L_v \cdot \text{Pr ovTz}2^n + \frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovMr}1 + \\ &+ \text{Pr ovMz}1 + L_v \cdot \frac{1}{r} \cdot \text{Pr ovMr}2 + L_v \cdot \text{Pr ovMz}2 + \rho_s \cdot L_w \cdot \frac{\partial M}{\partial t} \end{aligned} \right] \quad (35)
\end{aligned}$$

em que $\frac{\partial M}{\partial t}$ é obtido por meio da Equação (30).

6. Por último, os novos operadores, H_{left} e H_{right} , são aplicados à Equação (22), gerando outro sistema de equações lineares FBR que é a forma discretizada proposta para a Equação (12).

3.3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A Tabela 3.2 mostra os coeficientes obtidos nos casos de simulações de processos de secagem com condições de contorno de convecção e coordenadas cilíndricas para o trigo com formato esférico e de elipsóide com duas diferentes excentricidades.

O efeito da excentricidade sobre o valor de h_m^* mostrou-se ser linear. A expressão obtida para o coeficiente de transferência de massa, h_m^* , com acurácia de cinco dígitos é:

$$h_m^* = -0,0025 * E + 0,0125 \quad (36)$$

em que E refere-se à excentricidade suposta para o grão de trigo, ou seja, a relação entre o semieixo maior (b) e o semieixo menor (a).

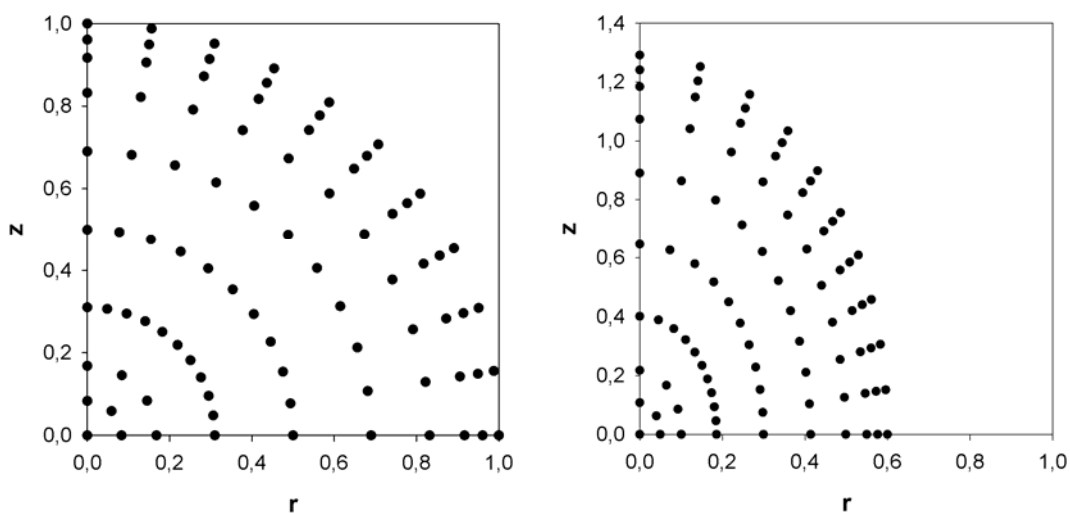
Tabela 3.2. Coeficientes obtidos a partir de simulações com condição de contorno de convecção e coordenadas cilíndricas

Coeficientes	Esfera	Elipsóide	
		Excentricidade 2	Excentricidade 2,5
k_l^*	$1,1 \times 10^{-14}$	$1,1 \times 10^{-14}$	$1,1 \times 10^{-14}$
k_v^*	1×10^{-8}	1×10^{-8}	1×10^{-8}
h_m^*	0,01	7,5E-03	6,3E-03
h_T^*	1	1	1

Define-se aqui **acurácia** como sendo o grau de aproximação da solução numérica em relação aos valores experimentais considerados como valores de referência exatos. O esquema explícito, $\Theta=0$, apresentou maior acurácia que os esquemas implícitos e foi adotado neste trabalho. As soluções das equações de conservação de massa e energia, Equações (4) e (5), respectivamente, foram comparadas com os resultados experimentais de secagem de grão de trigo com formato esférico de Fortes et al. (1981) e com os resultados da simulação do processo de secagem de trigo com formato esférico, obtidos por meio do método de FBR modificado.

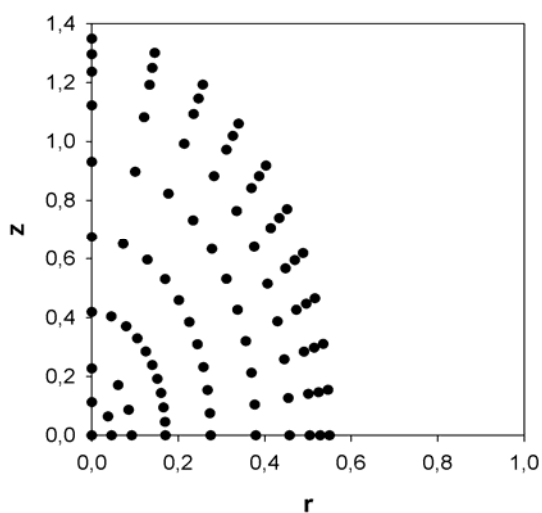
Após muitos testes de avaliação de acurácia e simplicidade (número mínimo de pontos necessários para atingir a acurácia desejada), o número de pontos nodais e os passos de tempo, Δt , usados nas simulações foram: 85 pontos nodais e $\Delta t = 0,1$.

As Figuras 3.1a-c mostram as distribuições normalizadas em R dos pontos nodais utilizadas neste trabalho para as simulações do grão com formato esférico e de elipsóide prolato com excentricidade igual a 2 e 2,5, respectivamente e com coordenadas cilíndricas. Os pontos nodais ficaram mais concentrados nos contornos, para maior acurácia dos resultados, conforme mostraram testes efetuados previamente e comparações de soluções.



a) Esfera

b) Elipse com excentricidade 2,0



c) Elipse com excentricidade 2,5

Figura 3.1. Distribuição normalizada dos pontos nodais utilizados para discretização do grão de trigo com formato esférico e de elipsóide prolato.

3.3.1. Simulação de secagem de grãos de trigo utilizando coordenadas cilíndricas e condição de contorno de convecção

Os dados e discussão desta seção referem-se a soluções numéricas associadas a coordenadas cilíndricas. A Figura 3.2 mostra as curvas de secagem previstas, com condição de contorno de convecção na superfície do grão com formato esférico e de elipsóide, versus as experimentais reportadas por Fortes et al. (1981) para a seguinte

condição de secagem: temperatura de bulbo seco $47,0^{\circ}\text{C}$, umidade relativa 33,8%, teor de umidade inicial 0,211 (decimal) e velocidade do ar 1,5 m/s. Constata-se que a maior diferença entre os dados preditos, considerando o grão com formato esférico e de elipsóide com excentricidade de 2 e 2,5, e os dados experimentais é menor que 0,52%. Portanto, pode-se dizer que o método de FBR cúbico modificado é adequado para simular o processo de secagem em camada fina com condição de contorno de convecção na superfície do grão com formato elipsoidal prolato assim como esférico.

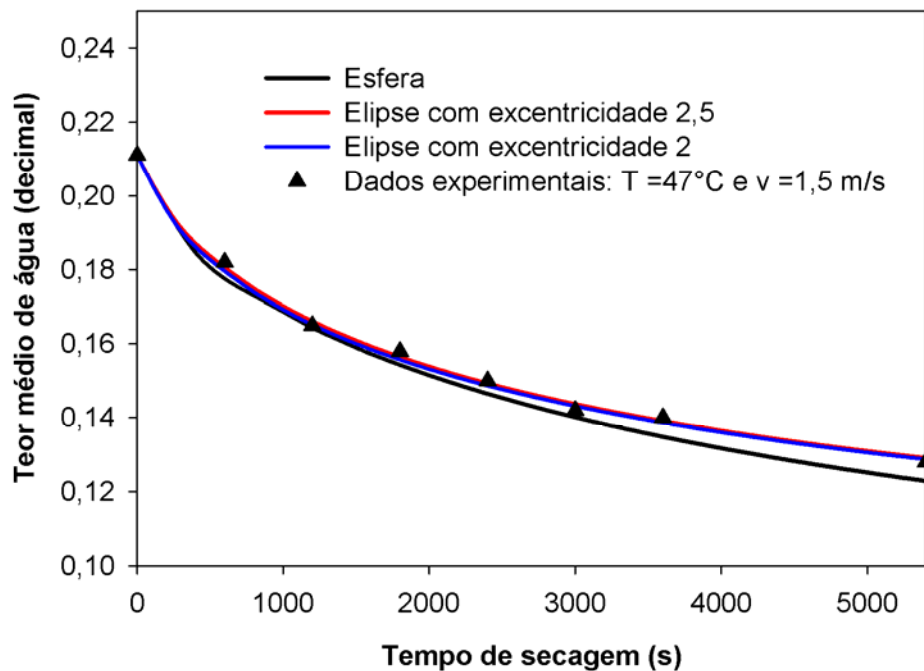


Figura 3.2. Comparação entre as curvas de secagem preditas (linhas contínuas) e respectivos dados experimentais (em pontos discretos - triângulos): Soluções numéricas com condição de contorno de convecção e coordenadas cilíndricas.

As Figuras 3.3a-i mostram a distribuição do teor de água dentro do grão de trigo com formato de elipsóide prolato com excentricidade igual a 2 e 2,5 e do grão com formato esférico à temperatura de secagem de 47°C e três diferentes tempos de secagem (50s, 2700s e 5400s). Pode-se observar que:

- Pelas figuras a, b, d, e, g e h a frente de evaporação ocorre de forma não simétrica em grão com formato elipsoidal ou elipsóide, fato que leva a um processo de secagem mais pronunciado, no topo (z máximo).

- Pelas figuras c, f e i, que a frente de evaporação ocorre de forma simétrica em grão com formato esférico ou esfera, e a secagem ocorre na direção radial, como era de se esperar.
- O conjunto das figuras mostra que, enquanto na esfera o fluxo de massa ocasiona gradientes definidos de concentração de água, no caso do elipsóide, a região referente ao topo é mais sujeita a um fluxo intenso de massa. No cômputo global, o movimento de água no elipsóide ocorre mais pronunciadamente do interior para a superfície, enquanto que na esfera, a frente de evaporação é mais pronunciada.
- Esfericidade de grãos de trigo (e outros grãos) é a relação entre a área da superfície de uma esfera de igual volume para área da superfície do esferóide alongada (prolato). Seis variedades de trigo apresentaram esfericidade média de 92% (KANG e DELWICHE, 2000), fato que corrobora os dois estudos aqui efetuados.

Observa-se, nas Figuras 3.4a-c, a distribuição de temperatura no interior do grão de trigo com formato de elipsóide prolato com excentricidade igual a 2 e 2,5 e grão esférico após 50s de secagem. Os dados numéricos mostram que a temperatura média do grão atingiu a temperatura do meio em aproximadamente 100s para os três casos analisados. Novamente, no caso do grão de trigo com formato de elipsóide prolato com excentricidade 2 e 2,5 pode-se observar que a secagem é mais acentuada na região mais delgada do grão.

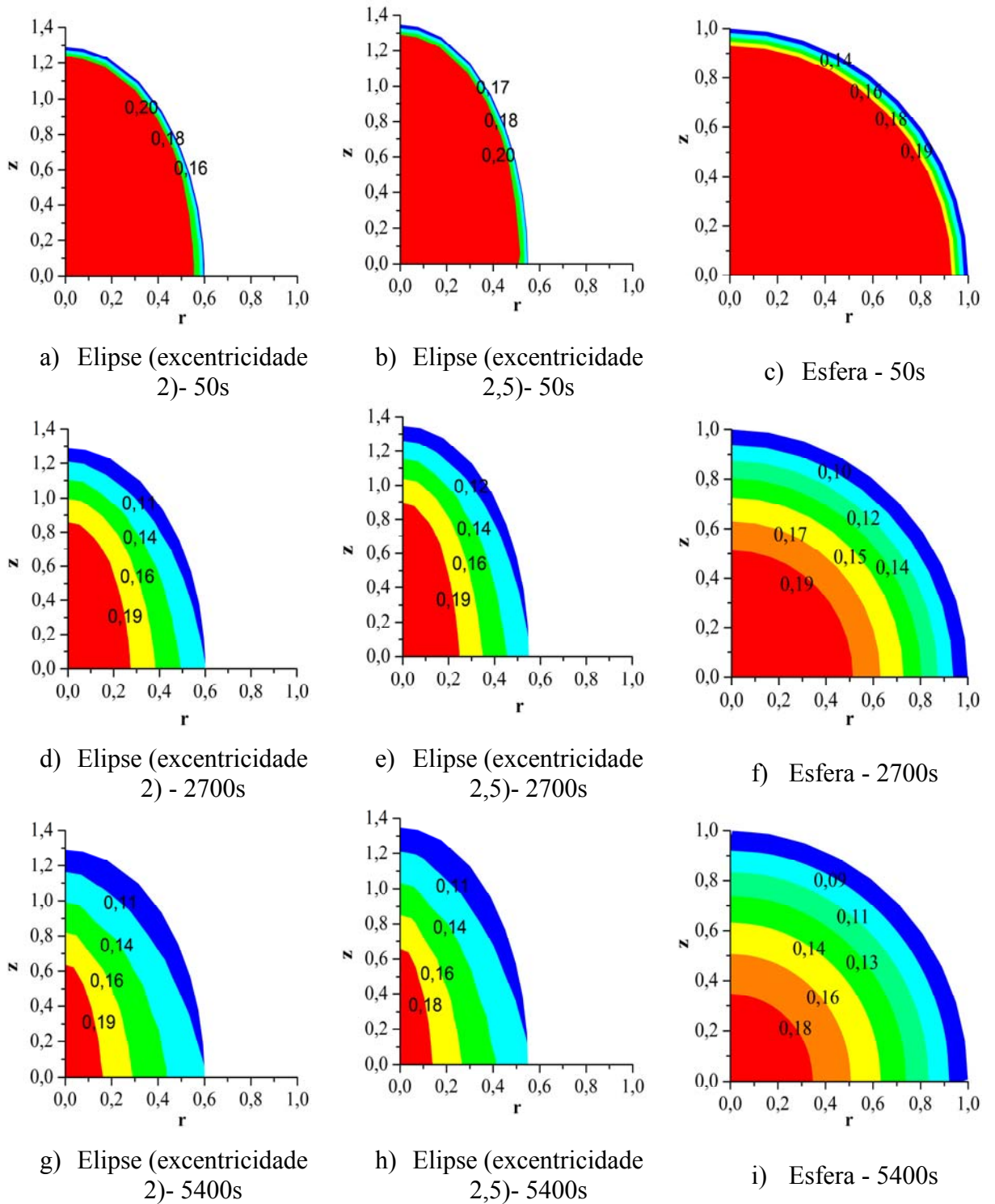


Figura 3.3. Distribuição do teor de água predito dentro do grão de trigo com formato de elipsóide prolato com excentricidade 2 e 2,5, e esférico a 47°C.

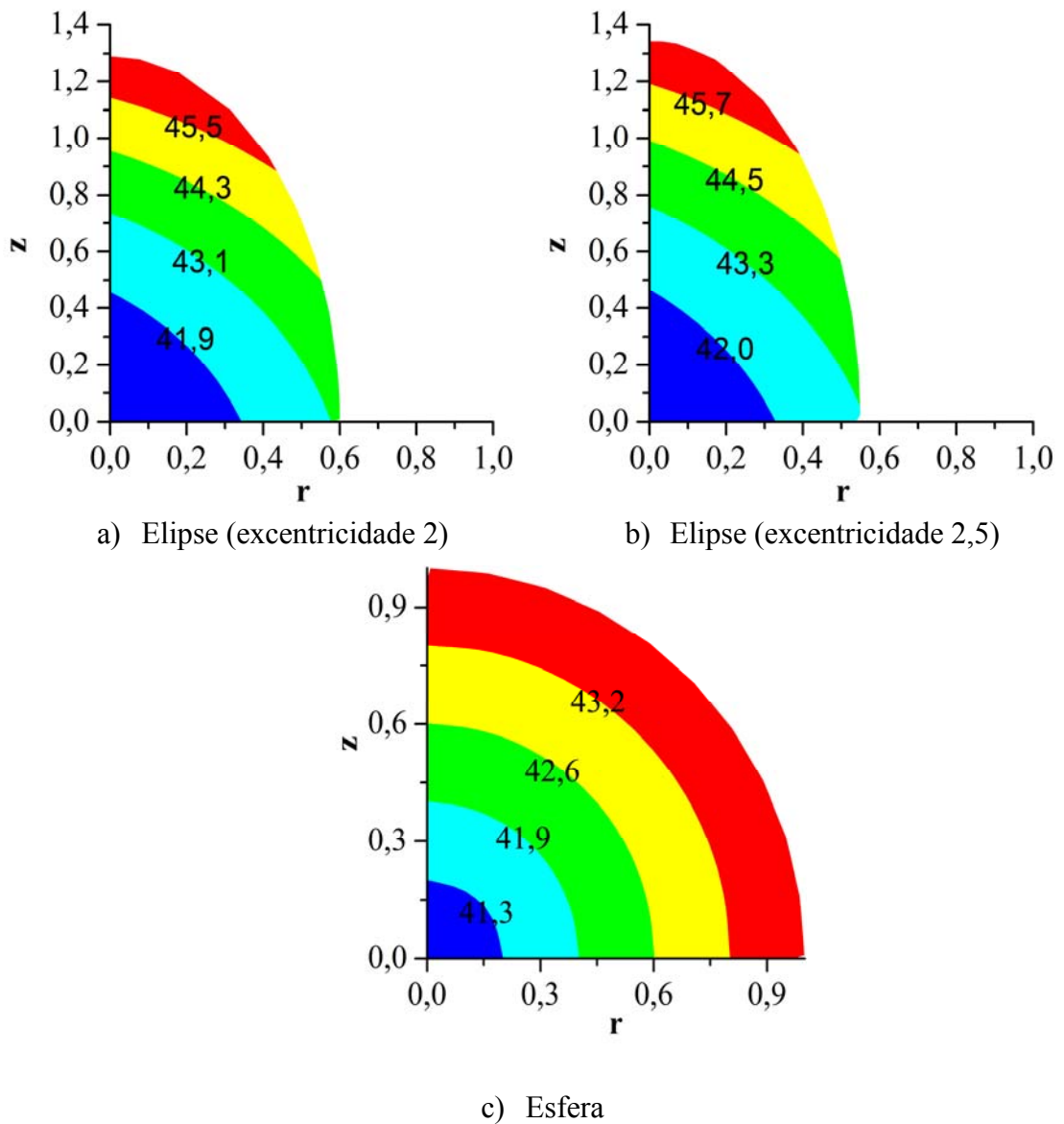


Figura 3.4. Distribuição da temperatura (°C) predita dentro do grão de trigo com formato de elipsóide prolato com excentricidade 2 e 2,5, e esférico a 47°C e tempo de secagem de 50s.

3.3.2. Discussão sobre o quadro global da modelagem teórica do processo de secagem

Os dados apresentados e outras informações da literatura (citadas abaixo, quando necessárias) permitem afirmar que:

- a. *Faz sentido o uso de um modelo aparentemente complexo para analisar o processo de secagem de corpos higroscópicos capilares porosos*

As justificativas para esta afirmativa têm por base os seguintes fatos:

- O produto a ser seco pode apresentar uma infinidade de características particulares tais como anisotropia, formato irregular, composição variável, etc. Modelos simplificados não poderiam, em princípio, refletir, mesmo que de maneira simplista, tais particularidades e, portanto, não passariam de tentativas de ajuste estatístico dos dados de secagem.
- O modelo utilizado tem por base e é coerente com os princípios da termodinâmica de processos irreversíveis; a complexidade do modelo surge devido ao caráter igualmente complexo do produto a ser seco, caráter este expresso pelas propriedades físicas.
- Modelos de igual nível de complexidade já foram apresentados tanto na própria literatura de secagem (LUIKOV, 1966; PHILIP e DE VRIES, 1957, dentre outros) quanto na literatura pertinente de escoamento de água ou poluentes em solos (ŠIMŮNEK et al., 2008)
- Uma vez resolvidos, modelos complexos podem ser rapidamente utilizados por uma vasta gama de interessados; exemplos fáceis de citar incluem inúmeros pacotes de elementos, volumes e diferenças finitas, utilizados para uma infinidade de problemas de engenharia e o programa Hydrus, de alta complexidade, que permite a análise de problemas de infiltração de água em solos.
- Este trabalho mostrou toda a técnica necessária para resolver o problema de secagem de produtos agrícolas por meio de funções de base radial. O caráter inovador apresentado consistiu na técnica de resolver o sistema de duas equações diferenciais parciais com características hiperbólicas e lidar com o termo difusivo com coeficiente altamente não linear.
- Utilizaram-se coordenadas cilíndricas para analisar o problema de secagem de trigo suposto ter formato esférico ou de elipsóide prolato, ou seja, formatos axissimétricos.

b. *Faz sentido o uso de geometrias esféricas e elipsoidais prolatas para modelar um grão como o de trigo.*

De fato:

- Existem analogias que utilizam a esfericidade de corpos para determinar valores dos coeficientes de transferência de calor e massa (por exemplo:- as expressões de Chilton-Colburn,1934). Deve-se notar que, uma vez conhecido os coeficientes convectivos, pode-se determinar a taxa de secagem.
- A característica anisotrópica do trigo e a presença de três componentes principais, endosperma, fibra e gérmen, Figura 3.5, é amortizada pela suposição de simetria e isotropia. Deve-se notar que o endosperma e a parte fibrosa são responsáveis, respectivamente, por aproximadamente 80-85% e 13-17% do peso do trigo (valor obviamente dependente da variedade) (BELDEROK et al., 2000). Modelos mais complexos poderão incluir todos componentes, mas, tal abordagem ainda não foi feita. No modelo proposto neste trabalho, a presença dos componentes endosperma e fibra aparecem por meio da variação dos coeficientes fenomenológicos com o teor de água e temperatura e os valores dos coeficientes convectivos.
- Deve-se considerar que grãos de trigo apresentam formatos que vão de aproximadamente esféricos a elipsoidais prolatos de diferentes excentricidades. A pressuposição de formato esférico leva a um modelo que reduz o efeito de ponta (região de menor diâmetro ou mais delgada) no perfil de teor de água e temperatura do grão de trigo. De fato, a esfericidade do grão de trigo é 92% (KANG e DELWICHE, 2000) o que endossa a pressuposição de análise de secagem supondo que o grão de trigo tenha formato esférico. Todavia, os modelos que consideraram formatos elipsoidais são mais realistas. Em outras palavras, os fluxos de calor e massa não são amenizados nas regiões com formatos mais delgados, nos casos em que se usam formatos elipsoidais. O valor médio dos diversos coeficientes e perfis deve refletir as condições reais de fluxos e perfis de temperatura e massa, em termos de ordem de grandeza;

este fato foi assegurado pelo fato que o ajuste às curvas de secagem e de temperatura média dos grãos foi obedecido, como mostrado anteriormente.

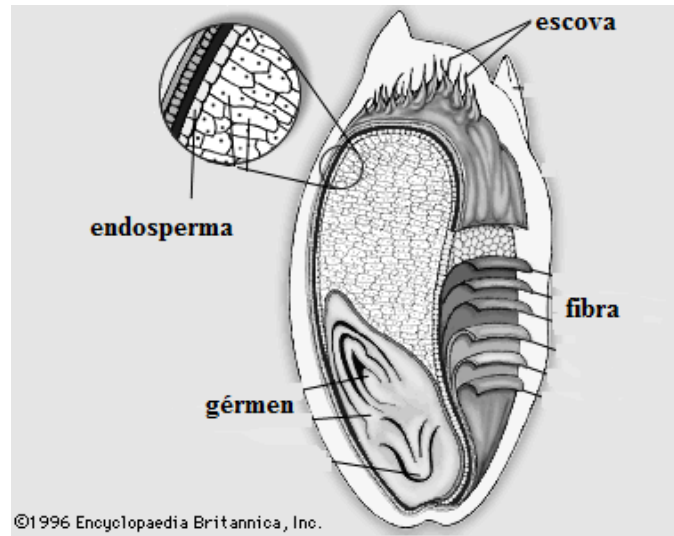


Figura 3.5 Grão de trigo (Fonte: Encyclopaedia Britannica, <http://www.britannica.com>).

c. Acurácia dos modelos de secagem: - O efeito do formato do grão

Dois tipos de erros foram utilizados neste trabalho, para efeito de avaliação dos diferentes modelos. Considerando que se tenham efetuado N avaliações do valor do teor de água do grão, em que $i = 0$ é o início e $i = N$ é o ponto que representa o fim da secagem experimental, o erro máximo (E_{\max}) é definido por:

$$E^{\infty} = \max_{0 \leq i \leq N} \left| \bar{M}_{\text{predito}_i} - \bar{M}_{\text{experimental}_i} \right| \quad (37)$$

O erro RMS (root means square – raiz quadrada da média da soma dos quadrados) é definido por:

$$E^2 = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \bar{M}_{\text{predito}_i} - \bar{M}_{\text{experimental}_i} \right|^2} \quad (38)$$

A Tabela 3.3 mostra os erros associados ao uso de coordenadas cilíndricas considerando o grão de trigo com formato esférico e de elipsóide prolato e condições

de contorno convectivas na simulação do processo de secagem para a condição deste trabalho.

Tabela 3.3. Acurácia dos modelos de secagem deste trabalho

Coordenadas	Formato do Grão	Excentricidade	47°C	
			RMS	Emáx
Cilíndricas	Esférico	-	0,0036	0,0052
	Elipsóide prolato	2	0,0015	0,0025
		2,5	0,0012	0,0017

A Tabela 3.3 permite inferir que o modelo proposto, em qualquer uma de suas formas satisfaz plenamente a condição de acurácia dos processos de secagem, com erro RMS inferior a 0,0036 e erro máximo inferior a 0,0052, para a condição de secagem simulada neste trabalho.

3.4. CONCLUSÕES

Este trabalho apresenta o método FBR cúbico modificado para resolver, por meio de modelo da termodinâmica de processos irreversíveis, o problema de transferência simultânea de calor e massa que ocorre durante a secagem de um único grão de trigo. Supôs-se que o grão de trigo tivesse formato esférico ou elipsoidal prolato com duas diferentes excentricidades. O método FBR modificado mostrou-se adequado para resolver problemas de secagem de camada fina com condição de contorno de convecção na superfície do grão.

Assim, este trabalho apresenta uma ampliação considerável do método de análise de secagem proposto por Fortes et al. (1981), por expor soluções mais realistas, com condições de contorno convectivas e suposição de formatos esféricos e elipsoidais para os grãos de trigo.

Os resultados das simulações mostraram que a secagem se processa por meio de uma frente móvel de evaporação. A frente de evaporação é mais definida e simétrica no caso de suposição de formato esférico. Por outro lado, a frente de evaporação manifesta-se mais fortemente e de forma assimétrica a partir da região delgada da elipse. Da literatura sabe-se que a esfericidade do trigo é da ordem de

92%, fato que justifica os formatos escolhidos. Por outro lado, sabe-se que o endosperma e o pericarpo (fibra) constituem 80 a 85% e 13 a 17 % do grão de trigo; tal fato permite supor isotropia no interior e na parte externa; assim, a variabilidade presumida para os diferentes parâmetros físicos são capazes de assimilar esta anisotropia radial.

Os dados de simulação indicam que, durante o processo de secagem, o movimento de água ocorreu, principalmente, na fase líquida nas regiões dentro do grão de trigo e na fase de vapor nas regiões mais secas, próximas a superfície do grão.

As comparações entre o desempenho do método de FBR modificado e os dados experimentais de Fortes et al. (1981) mostraram que a metodologia proposta é acurada e competitiva para resolver problemas de secagem de um único grão com formato esférico ou elipsoidal, com condição de contorno convectiva na superfície do grão.

3.5. REFERÊNCIAS

ABALONE, R.; GASTÓN, A.; CASSINERA, A.; LARA, M. A. Thin layer drying of amaranth seeds. *Biosystems Engineering*, v. 93, n. 2, pp. 179–188, 2006.

BASUNIA, M. A.; ABE, T. Thin-layer solar drying characteristics of rough rice under natural convection. *Journal of Food Engineering*, v. 47, n. 4, pp. 295-301, 2001.

BELDEROK, B.; MESDAG, H.; DONNER, D.A. *Bread-Making Quality of Wheat*. New York: Springer, 2000.

BENNAMOUN, L.; BELHAMRI, A. Numerical simulation of drying under variable external conditions: Application to solar drying of seedless grapes. *Journal of Food Engineering*, v. 76, n. 2, pp. 179–187, 2006.

BIXLER, N. An improved time integrator for finite element analysis. *Communications in Applied Numerical Methods*, v.5, pp. 69-78, 1989.

BROOKER, D.B.; BAKER-ARKEMA, F.W.; HALL, C.W. *Drying and Storage of Grains and Oilseeds*. New York: The AVI Publishing Company, 1992.

BROWN, D., LING, L., KANSA, E. e LEVESLEY, J. On approximate cardinal preconditioning methods for solving PDEs with radial basis functions. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 29, n. 4, pp. 343–353, 2005.

CAVALCANTI MATA, M.E.R.M.; ALMEIDA, F.A.C.; DUARTE, M.E.M. *Secagem de sementes*. In: ALMEIDA, F.A.C; DUARTE, M.E.M.; CAVALCANTI MATA, M.E.R.M. (Eds.). *Tecnologia de armazenagem em sementes*. Campina Grande: Universidade Federal de Campina Grande, 2006.

CIHAN, A.; KAHVECI, K., HACIHAFIZOĞLU, O. Modelling of intermittent drying of thin layer rough Rice. *Journal of Food Engineering*, v. 79, n. 1, pp. 293–298, 2007.

CRANK, J. *Mathematics of Diffusion*. Oxford: Oxford University Press, 1979.

DEGHAN, M.; TATARI, M. Determination of a control parameter in a one-dimensional parabolic equation using the method of radial basis functions. *Mathematical and Computer Modelling*, v. 44, n. 11-12, pp. 1160–1168, 2006.

DRISCOLL, T. A.; HERYUDONO, A. R. H. Adaptive residual subsampling methods for radial basis function interpolation and collocation problems. *Computers and Mathematics with Applications*, v. 53, n. 6, pp. 927–939, 2007.

FASSHAUER, G. E.) *Meshfree approximation methods with matlab*, Singapore: World Scientific Publishers, 2007.

FORTES, M. *A non-equilibrium thermodynamics approach to transport phenomena in capillary porous media with special reference to drying of grains and foods*. Tese de Doutorado em Engenharia Agrícola e Biológica, Purdue University, 1978.

FORTES, M.; OKOS, M. R. *Drying theories: their bases and limitations as applied to food and grain*. In A. Mujamdar (Ed.). *Advances in Drying* (Vol. 1, pp. 119-154). Washington: Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

FORTES, M.; OKOS, M. R. Heat and Mass Transfer in Hygroscopic Capillary Extruded Products. *AIChE Journal*, v. 27, n. 2, 1981a.

FORTES, M.; OKOS, M. R. *Non-equilibrium thermodynamics approach to heat and mass transfer in corn kernels*. Trans. ASAE, v. 24, pp. 761–769, 1981b.

FORTES, M.; OKOS, M. R.; BARRETT JR., J. R. Heat and Mass Transfer analysis of intra-kernel wheat drying and rewetting. *Journal of Agricultural Engineering Research*, v.26, pp. 109-125, 1981.

FORTES, M.; FERREIRA, W.R. The one-dimensional transient diffusional method: finite element adaptive solutions to convection-diffusion problems. *International Journal of Thermal Sciences*, v. 38, pp. 780-796, 1999.

FRANÇA, A. S.; FORTES, M.; HAGHIGHI, K.. Numerical simulation of intermittent and continuous deep-bed drying of biological materials. *Drying Technology*, v.12, n. 7, pp. 1537-1560, 1994.

GASTÓN, A. L.; ABALONE, R. M.; GINER, S. A. Wheat drying kinetics. Diffusivities for sphere and ellipsoid by finite elements. *Journal of Food Engineering*, v. 52, n. 4, pp. 313–322, 2002.

GHOSH, P. K.; JAYAS, D. S.; SMITH, E. A.; GRUWEL, M. L. H.; WHITE, N. D. G. Mathematical modelling of wheat kernel drying with input from moisture movement studies using magnetic resonance imaging (MRI), Part I: Model development and comparison with MRI observations. *Biosystems Engineering*, v. 100, n. 3, pp. 389 - 400, 2008a.

GHOSH, P. K.; JAYAS, D. S.; SMITH, E. A.; GRUWEL, M. L. H.; WHITE, N. D. G. Mathematical modelling of wheat kernel drying with input from moisture movement studies using magnetic resonance imaging (MRI), Part II: Model comparison with published studies. *Biosystems Engineering*, v. 100, n. 4, pp. 547–554, 2008b.

GOTO, Y.; FE, Z.; KAN, S.; KITA, E. Options valuation by using radial basis function approximation. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, v. 31, n. 10, pp. 836-843, 2007.

GONG, Z. X.; DEVAHASTIN, S.; MUJUMDAR, A. S. A two-dimensional finite element model for wheat drying in a novel rotating jet spouted bed. *Drying Technology*, v. 15, n. 3, pp. 575 – 592, 1997.

GRESHO, P.M.; LEE, R.L.; SANI, R.L. *On the time dependent solution of the incompressible Navier-Stokes equation in two and three dimensions*. In: RECENT ADVANCES IN NUMERICAL METHODS IN FLUIDS, v. 1, Swansea: Pineridge Press, pp. 27-79, 1980.

HAGHIGHI, K.; IRUDAYARAJ, J.; STROSHINE, R. L.; SOKHANSANJ, S. *Grain kernel drying simulation using the finite element method*. Trans. ASAE, v. 33, pp. 1957–1965, 1990.

HAGHIGHI, K.; AGUIRRE, C. G. Adaptive and stochastic finite element analysis in drying. *Drying Technology*. v.17, n. 10, pp. 2037-2053, 1999.

HOFFMAN, J.D. *Numerical Methods for Engineers and Scientists.*, New York: McGraw-Hill, 1992.

IRUDAYARAJ, J.; HAGHIGHI, K.; STROSHINE, R. L. Finite element analysis of drying with application to cereal grains. *J. Agric. Eng. Research*, v. 53, n. 4, pp. 209–229, 1992.

JAYAS, D. S.; GHOSH, P. K. Preserving quality during grain drying and techniques for measuring grain quality. In: Proceedings of the 9th International Working Conference on Stored Product Protection (Lorini I; Bacaltchuk B; Beckel H; Deckers D; Sunfeld E; dos Santos J P; Biagi J D; Celaro J C; Faroni L R D A; Bortolini L de O F; Sartori M R; Elias M C; Guedes R N C; da Fonseca R G; Scussel V M, eds), pp 969–981. Brazilian Post-harvest Association, Campinas, Brazil, 2006.

JIA, C.; SUN, D.; CAO, C. Mathematical simulation of temperature and moisture fields within a grain kernel during drying. *Drying Technology*, v. 18, n. 6, pp. 1305 - 1325, 2000.

KANG, S.; DELWICHE, S. R. *Moisture diffusion coefficients of single wheat kernels with assumed simplified geometries: analytical approach*. Transactions of the ASAE, v. 43, pp. 1653-1659, 2000.

KANSA, E. J., HON, Y. C. Circumventing the ill-conditioning problem with multiquadric radial basis functions: applications to elliptic partial differential equations. *Computers and Mathematics with Applications*, v. 39, n. 7-8, pp. 123-137, 2000.

KASHANINEJAD M.; MORTAZAVI, A.; SAFEKORDI, A.; TABIL, L. G. Thin-layer drying characteristics and modeling of pistachio nuts. *Journal of Food Engineering*, v. 78, n. 1, pp. 98–108, 2007.

KULASIRI, D.; SAMARASINGHE, S. Modelling heat and mass transfer in drying of biological materials: a simplified approach to materials with small dimensions. *Ecological Modelling*, v. 86, n. 2-3, pp. 163-167, 1996.

LI, Z.; KOBAYASHI, N.; HASATANI, M. Modeling of diffusion in ellipsoidal solids: A comparative study. *Drying Technology*, v. 22, n. 4, pp. 649 – 675, 2004.

LÓPEZ, I. I. R.; SÁNCHEZ, C. E. M.; VIVALDO, R. C.; LARA, E. H. Mathematical modeling and simulation of batch drying of foods in fixed beds with airflow reversal. *Journal of Food Engineering*, v. 89, n. 3, pp. 310–318, 2008.

LUIKOV, A. V. *Heat and Mass Transfer in Capillary Bodies*. Oxford: Pergamon Press, 523p., 1966.

MOHAPATRA, D.; RAO, P. S. A thin layer drying model of parboiled wheat. *Journal of Food Engineering*, v. 66, n. 4, pp. 513–518, 2005.

MUJUMDAR, A. S. An overview of innovation in industrial drying: current status and R&D needs. *Transp. Porous Med.*, v. 66,n. 1-2, pp. 3–18, 2007.

MUJUMDAR, A. S.; LAW, C. L. Drying Technology: Trends and Applications in Postharvest Processing. *Food Bioprocess Technol*, v. 3, n. 6, pp. 843–852, 2010.

NAWIRSKA, A.; FIGIEL, A.; KUCHARSKA, A. Z.; SOKÓŁ-ŁĘTOWSKA, A.; BIESIADA, A. Drying kinetics and quality parameters of pumpkin slices dehydrated using different methods. *Journal of Food Engineering*, v. 94, n. 1, pp. 14–20, 2009.

OLIVEIRA, V. A. B.; LIMA, A. G. B. Drying of wheat based on the non-equilibrium thermodynamics: A numerical study. *Drying Technology*, v. 27, n. 2, pp. 306–313, 2009.

PABIS, S.; JAYAS, D. S.; CENKOWSKI, S. *Grain drying: theory and practice*. John Wiley & Sons Inc., 1998.

PARTI, M. Selection of mathematical models for drying grain in thin-layers. *Journal of Agricultural Engineering Research*, v. 54, n. 4, pp. 339-352, 1993.

PHILIP, J. R.; DE VRIES, D. A. Moisture movement in porous materials under temperature gradients. *Trans. Amer. Geophys. Unin.*, v. 38, n. 2, pp. 222-232, 1957.

SARRA, S. A. Adaptive radial basis function methods for time dependent partial differential equations. *Applied Numerical Mathematics*, v. 54, n. 1, pp. 79–94, 2005.

SANDER, A. Thin-layer drying of porous materials: Selection of the appropriate mathematical model and relationships between thin-layer models parameters. *Chemical Engineering and Processing*, v. 46, n. 12, pp. 1324–1331, 2007.

SANTOS, G. T.; SOUZA, M. C.; FORTES, M. Use of radial basis functions for meshless numerical solutions applied to financial engineering barrier options. *Pesquisa Operacional*, v. 29, n. 2, pp. 419-437, 2009.

SANTOS, G. T.; FORTES, M.; MARTINS, J. H. *Aplicação do método de função de base radial a problemas unidimensionais de dispersão de contaminante em solo não saturado*. In: VI Congresso Ibérico de Agro-Engenharia, 2011, Évora, Portugal. Comunicações finais do VI Congresso Ibérico de Agro-Engenharia, Évora, Portugal, 2011, CD-ROM, ISBN: 978-972-778-113-3.

SINICIO, R.; MUIR, W. E.; JAYAS, D. S.; CENKOWSKI, S. Thin-layer drying and wetting of wheat. *Postharvest Biology and Technology*, v. 5, n. 3, pp. 261-275, 1995.

YANG, W.; JIA, C.-C.; SIEBENMORGEN, T. J.; HOWELL, T. A.; CNOSSEN, A. G. *Intra-kernel moisture responses of rice to drying and tempering treatments by finite element simulation*. Transactions of the ASAE, v. 45, pp. 1037–1044, 2002.

WONGWISES, S.; THONGPRASERT, M. Thin layer and deep bed drying of long grain rough rice. *Drying Technology*, v. 18, n. 7, pp. 1583- 1599, 2000.

WU, B.; YANG, W.; JIA, C. A three-dimensional numerical simulation of transient heat and mass transfer inside a single rice kernel during the drying process. *Biosystems Engineering*, v. 87, n. 2, pp.191–200, 2004.

ZHANG, Y. Solve partial differential equations by two or more radial basis functions. *Applied Mathematics and Computation*, v. 181, n. 1, pp. 793–801, 2006.