

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
MESTRADO EM ENGENHARIA QUÍMICA

TRANSFERÊNCIA SIMULTÂNEA DE CALOR E MASSA EM SECAGEM DE GRÃOS  
DE CEREAIS: UMA ABORDAGEM POR ELEMENTOS DE CONTORNO.

**MESTRANDO:** WILLIAM GONÇALVES VIEIRA

**ORIENTADOR:** PROF. LUIZ HENRY MONKEN E SILVA

Dissertação de mestrado submetida à  
Universidade Estadual de Maringá,  
para obtenção do grau de mestre em  
Engenharia Química, área de  
Desenvolvimento de Processos.

Maringá - PR

1997

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ

MESTRADO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**TRANSFERÊNCIA SIMULTÂNEA DE CALOR E MASSA EM SECAGEM DE GRÃOS  
DE CEREAIS: UMA ABORDAGEM POR ELEMENTOS DE CONTORNO.**

**WILLIAM GONÇALVES VIEIRA**

**ENG. QUÍMICO, UFRJ, 1979.**

**ORIENTADOR: PROF. LUIZ HENRY MONKEN E SILVA**

Dissertação de mestrado submetida à  
Universidade Estadual de Maringá,  
para obtenção do grau de mestre em  
Engenharia Química, área de  
Desenvolvimento de Processos.

Maringá - PR

1997

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA**

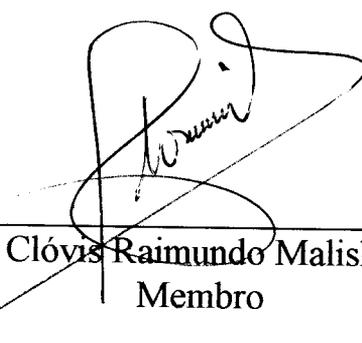
Está é a versão definitiva da Dissertação de Mestrado submetida por William Gonçalves Vieira, à Comissão Julgadora do Curso de Mestrado em Engenharia Química, na data de 21 de julho de 1997.

**COMISSÃO JULGADORA**



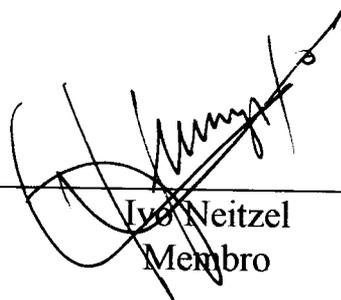
---

Luiz Henry Monken e Silva  
Orientador



---

Clóvis Raimundo Maliska  
Membro



---

Ivo Neitzel  
Membro

## **AGRADECIMENTOS**

Ao professor Luiz Henry Monken e Silva, pela orientação e apoio recebido durante o período de realização desse trabalho.

Aos professores e funcionários do PEQ/UEM pelo incentivo.

Aos colegas de pós-graduação, pelo incentivo e apoio nas horas difíceis.

Ao professor M.Sc. Edson Antônio da Silva pelos comentários e ajuda na elaboração de programas computacionais.

À minha esposa pelo incentivo e apoio dados em todas as etapas do curso e por sua dedicação e paciência para digitar essa dissertação.

## SUMÁRIO

ÍNDICE DE FIGURAS.....	iii
NOTAÇÃO E NOMENCLATURA.....	v
RESUMO	
ABSTRACT	
CAPÍTULO I	
INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO II	
REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	6
2.1 Referências Bibliográficas.....	6
CAPÍTULO III	
MODELAGEM MATEMÁTICA, MATERIAIS E MÉTODOS.....	12
3.1 Equacionamento Matemático.....	12
3.2 Estabelecimento das Condições Inicial e de Contorno.	17
3.3 Método de Elementos de Contorno (BEM).....	22
3.4 Tratamento Numérico da Formulação Integral.....	43
3.5 Procedimentos para Solução da Formulação Integral.	58
3.6 Propriedades Geométricas e Físicas do Soja.....	65
3.7 Solução do Modelo sem Acoplamento.....	67
3.8 Procedimentos de Simulação Numérica.....	71
CAPÍTULO IV	
RESULTADOS.....	76
CAPÍTULO V	

CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	92
CAPÍTULO VI	
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	95
APÊNDICES	
APÊNDICE A - BALANÇO DE MASSA E ENERGIA EM UM CORPO POROSO ESFÉRICO ISOTRÓPICO.....	99
A.1 Balanço de Massa.....	99
A.2 Balanço de Energia.....	109
APÊNDICE B - SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO SEM TERMO DE ACOPLAMENTO.....	118
B.1 Resolução Analítica da Equação da Difusão Mássica...	118
B.2 Equação da Difusão em Coordenadas Esféricas.....	127
APÊNDICE C - RESOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO DE CALOR SEM O TERMO DE ACOPLAMENTO DE UMIDADE.....	130
APÊNDICE D - OBTENÇÃO DA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL EM COORDENADAS ESFÉRICAS.....	139

## ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA 3.1 REPRESENTAÇÃO SIMBÓLICA DO VOLUME DE CONTROLE DE UM ÚNICO GRÃO DE SOJA UTILIZADO NO BALANÇO DE MASSA E ENERGIA.....	15/99
FIGURA 3.2 REPRESENTAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO.....	19
FIGURA 3.3. REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DA DISCRETIZAÇÃO RADIAL.....	51
FIG.4.1 RESULTADOS DE UMIDADE OBTIDOS PELO MÉTODO DE ELEMENTOS DE CONTORNO E PELO MÉTODO ANALÍTICO OBTIDO PELA EQUAÇÃO 3.91.....	78
FIG. 4.2 RESULTADOS DE UMIDADE MOSTRANDO AS PRIMEIRAS 4 HORAS DE SIMULAÇÃO, UTILIZANDO PASSO $h_u = 0,2 h$ .....	79
FIG. 4.3 RESULTADOS NUMÉRICOS DE TEMPERATURA COM ACOPLAMENTO E SEM ACOPLAMENTO DE UMIDADE PARA O PONTO DO RAI0 $r = 0$ .....	81
FIG. 4.4 RESULTADOS NUMÉRICOS DE TEMPERATURA COM ACOPLAMENTO E SEM ACOPLAMENTO DE UMIDADE PARA O RAI0 $r = 0,4*a$ .....	82
FIG. 4.5 RESULTADOS NUMÉRICOS DE TEMPERATURA COM ACOPLAMENTO E SEM ACOPLAMENTO DE UMIDADE PARA O RAI0 $r = 0,7*a$ .....	83
FIG. 4.6 RESULTADOS NUMÉRICOS DE TEMPERATURA COM ACOPLAMENTO E SEM ACOPLAMENTO DE UMIDADE PARA O RAI0 $r = 0,9*a$ .....	84
FIG. 4.7 VARIAÇÃO DE TEMPERATURA DO GRÃO DE SOJA COM O TEMPO, MOSTRANDO CADA PONTO RADIAL, NOS PROCESSOS COM ACOPLAMENTO E SEM ACOPLAMENTO DE UMIDADE.....	85
FIG. 4.8 RESULTADOS DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UMIDADE OBTIDOS PELO MÉTODO BEM E OS OBTIDOS POR HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988).....	87

FIG. 4.9 RESULTADOS DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE TEMPERATURA COM ACOPLAMENTO DE UMIDADE OBTIDOS PELO MÉTODO BEM E OS RESULTADOS NUMÉRICOS OBTIDOS POR HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988).....	89
FIG. 4.10 RESULTADOS MÉDIOS DE UMIDADE DE SOJA COMPARANDO O MÉTODO DE ELEMENTOS DE CONTORNO COM RESULTADOS EXPERIMENTAIS E ELEMENTOS FINITOS, OBTIDOS DA LITERATURA.....	91

## NOTAÇÃO E NOMENCLATURA

$a$	- raio da partícula de soja
$A$	- coeficiente da função de <i>Bessel</i>
$A_n$	- coeficiente da expressão analítica
$A_{ti}, A_{TFi}$	- matrizes dos coeficientes das expressões integrais
$B$	- coeficiente da função de <i>Bessel</i>
$B_{ui}, B_{ti}$	- matrizes dos coeficientes das expressões integrais
$C_p$	- capacidade calorífica da partícula
$D$	- coeficiente de difusão mássica
$e$	- número do elemento de discretização
$E$	- número de elementos
$G^*$	- designação genérica de solução fundamental
$G_{xx}, H_{xx}$	- vetores dos coeficientes das expressões integrais
$h$	- passo de integração no tempo; $h = t_F - t_{F-1}$
$h_c$	- coeficiente de transferência de calor por convecção
$i$	- número de nós no domínio
$J_M$	- fluxo de massa
$J_T$	- fluxo de calor
$J_0$	- função esférica de <i>Bessel</i> de ordem 1/2
$k$	- coeficiente de difusão
$K_1$	- constante = $L\&D/C_p$
$K_{11}$	- $D$ @ Difusividade mássica da partícula
$K_{12}$	- $Dd \rightarrow$ Corresponde ao termo de acoplamento

$K_{21}$	- $L\mathbf{eD}/Cp \rightarrow$ Corresponde ao termo de acoplamento
$K_{22}$	- $\mathbf{a} + L\mathbf{eD}/Cp \rightarrow$ Corresponde ao termo de Difusividade térmica e mudança de estado físico
$k_l$	- difusividade do líquido
$k_T, K_T$	- condutividade térmica
$k_v$	- difusividade do vapor
$k_{lT}$	- difusividade térmica de umidade no estado líquido
$k_{vT}$	- difusividade térmica de umidade no estado vapor
$L$	- $(h_v - h_l) \rightarrow$ calor latente de vaporização de umidade
$L(.)$	- designação genérica de operador diferencial
$L^*(.)$	designação genérica de operador diferencial adjunto
$q_1$	- gradiente de umidade
$q_2$	- gradiente de temperatura
$q_3$	- variação de temperatura com o tempo
$r$	- variável radial
$r_i$	- raio referente ao nó 'i'
$t$	- tempo
$T_{\mathbf{y}}$	- temperatura ambiente
$T^*$	- solução fundamental do operador $L^*(.)$
$T_a$	- temperatura da superfície
$T_{ar}$	- temperatura ambiente
$T_{i,F}$	- temperatura no nó 'i' referente ao instante atual
$T_{i,F-1}$	- temperatura no nó 'i' referente ao instante anterior
$U$	- fração mássica de água em forma de umidade
$U^*$	- solução fundamental do operador $L^*(.)$

$U_0$	- umidade inicial
$U_c$	- umidade de equilíbrio na temperatura ambiente
$U_{i,F}$	- umidade no nó 'i' referente ao instante atual
$U_{i,F-1}$	- umidade no nó 'i' referente ao instante anterior
$w, \mathbf{w}$	- coeficiente de convecção mássica
$X_i^{(e)}$	- função de interpolação quadrática no domínio referente ao nó 'i' do elemento (e); em coordenadas locais
$Y_0$	- função esférica de <i>Neumann</i> de ordem 1/2

### SÍMBOLOS

$\mathbf{a}$	- $K_T/r_s C_p \rightarrow$ Difusividade térmica da partícula
$\nabla$	- diferencial parcial
$\mathbf{d}_{r,z,t_F,t}$	- distribuição delta de Dirac
$\mathbf{d}$	- coeficiente termogradiante
$\mathbf{e}$	- Fator de tortuosidade para difusão de gases em meios porosos capilares (adimensional)
$\mathbf{l}_n$	- autovalores da solução analítica
$\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2$	- funções de interpolação lineares no tempo
$\mathbf{y}(U, t)$	- função de U e t
$\mathbf{r}_s$	- densidade do sólido seco
$\mathbf{t}$	- diferença de tempo $t_F - t$
$\mathbf{h}, \mathbf{z}$	- coordenadas no domínio
$\mathbf{z}$	- ponto de aplicação do potencial para uma fonte pontual
$\mathbf{m}$	- variável auxiliar, representa qualquer espécie difundida

- $W$**  - domínio do problema
- $G$**  - contorno do problema
- $\tilde{N}$**  - designação de gradiente
- $\tilde{N}^2$**  - designação de operador laplaciano

## RESUMO

A secagem é um importante processo para conservação de grãos de cereais durante sua armazenagem. Para ser realizada de maneira adequada, é necessário conhecer seus mecanismos. No estudo destes mecanismos, é fundamental a utilização de experimentos de laboratório acompanhando uma situação real de secagem, e, de posse destes dados de laboratório, é que o mecanismo pode ser simulado computacionalmente. O estudo computacional, que é o objetivo deste trabalho, modela o fenômeno físico matematicamente e o processo é simulado numericamente. Neste trabalho, para modelagem matemática do problema de secagem, foi realizado um balanço de massa e energia em um corpo esférico chegando-se às equações da difusão de calor e massa. Nas equações obtidas, o termo envolvendo gradiente mássico na equação da difusão térmica e o termo de vaporização de umidade na condição de contorno, tornam o problema acoplado, o que difere dos trabalhos existentes na literatura. A escolha do perfil esférico justifica-se por algumas espécies de grãos apresentarem forma aproximadamente esférica e pelas facilidades matemáticas. É utilizado o método de Elementos de Contorno para resolução do modelo, aproveitando a estrutura algébrica e computacional do modelo matemático. Além do modelo acoplado, foi resolvido um modelo desacoplado, com objetivo de comparar os resultados dos dois modelos. A modelagem foi aplicada a um grão de soja, considerado como um corpo esférico, poroso e isotrópico, com 3.5 mm de raio. As equações integrais resultantes da aplicação do método de Elementos de Contorno ao problema com e sem acoplamento de umidade, foram resolvidas pelo método de Colocação, utilizando-se 11 pontos de discretização no domínio, com elementos quadráticos e interpolando linearmente, também usando elementos quadráticos no tempo. Os resultados de umidade obtidos numericamente são comparáveis aos obtidos analiticamente e aos disponíveis na literatura. Os resultados de temperatura obtidos numericamente a partir do modelo com acoplamento de massa são comparáveis aos da literatura e se afastam dos resultados obtidos pelo modelo sem o termo de acoplamento de massa. Conclui-se então que o modelo com termo de acoplamento é adequado quando se deseja uma avaliação precisa do fenômeno. Esses resultados mostram também que o método de Elementos de Contorno se constitui numa técnica importante para analisar esses tipos de modelos por sua precisão, estabilidade e facilidade de programação computacional.

## ABSTRACT

Drying is an important process for grains conservation during their storage. In order to be done it in a suitable way it is necessary to know its mechanisms. These mechanisms are studied by laboratories experiments and follow a real drying situation and then simulating this mechanisms in computer. The computer studies, which is the scope of this work, simulate the physics of the phenomena by mathematical equations and the process is numerically simulated by the Boundary Elements Method. For this, it was done both mass and energy balance in a spherical body and it was obtained the equations of mass and heat diffusion. In the resulted equations, the expressions involving mass gradient in the thermal diffusion equations and humidity vaporization expression in the boundary condition, become coupled the model in a way that is different from others in literature. The choice of spherical shape is because the mathematical facilities and by the fact of several grains present spherical shape profile. Boundary Element Method is used in order to take numerical and computational advantages from the mathematical model. Furthermore, an uncoupled model was also solved, in order to compare results from two models. The suggested modeling was applied to one soybean grain, considering it as a spherical, porous and isotropic body with 3.5 mm radius. The integral equations obtained by applying the boundary element method to the problem with and without moisture coupling was solved by the collocation method, using quadratic discretization in domain, and linear interpolation in time. The moisture results, obtained numerically, have good agreement to analytical and available literature results. The temperature's results obtained by the model with mass coupled were similar to literature results and they differ from the results obtained by the uncoupled mass term model. It concludes that the coupled model is suitable when one wish a precise evaluation from the phenomenon. Outcomes also show that the boundary element method is an important technique for analyzing cereal grain drying behavior by diffusion equation due its precision, stability and computers processing facilities.

## CAPÍTULO I

### INTRODUÇÃO

Os grãos de cereais, no momento da colheita, apresentam teores de umidade elevados. Isto favorece o aparecimento de fungos e bolores no produto contribuindo para sua rápida deterioração. Portanto, nas condições de colheita, os cereais não podem ser armazenados por um longo período de tempo, mas se isto for feito de forma apropriada, os cereais granulares podem ficar armazenados até por vários anos. Uma forma adequada de armazenar cereais é reduzindo sua umidade a níveis tais que minimizem o dano causado pela presença de vida microbiana. Então, pode-se dizer que a secagem de grãos de cereais se constitui numa forma adequada de preparar o produto para estocagem, assegurando como conseqüência, melhor qualidade ao produto.

O conhecimento de propriedades externas ao produto a ser secado, tais como temperatura, umidade ambiente e velocidade do ar de secagem, é necessário mas não é suficiente para se efetuar uma secagem de forma segura e econômica, pois dependendo da forma como é realizada ela pode danificar o produto, fazendo aparecer trincas e enrugamento, reduzindo a

capacidade de germinação ou tornando-o com aparência inapropriada para ser comercializado. Portanto há necessidade de se conhecer e controlar o processo de secagem de forma a projetar adequadamente os equipamentos a serem utilizados, como aquecedores de ar, silos de estocagem e transportadores de esteira. Tudo isto requer um conhecimento preciso do mecanismo de secagem.

Diversos estudos foram já feitos propondo mecanismos teóricos, suportados ou não por resultados experimentais, conforme se pode constatar nos trabalhos de FORTES e OKOS, (1980), HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988), LUIKOV, (1966), SOKHANSANJ e BRUCE, (1987), HUSAIN, CHEN e CLAYTON, (1973), PLUMB, (1991), BORIES, (1991) entre outros. Todos esses trabalhos apontam a difusão como o mecanismo predominante nos processos de secagem de produtos biológicos e em particular de cereais granulares.

O presente trabalho visa estudar o fenômeno de secagem de grãos de cereais, considerado como sendo um corpo esférico, poroso e isotrópico, estabelecer o equacionamento matemático por meio de um balanço de massa e energia e resolver o modelo pelo método de Elementos de Contorno. O termo de massa levado em consideração no balanço de energia e

o termo de vaporização de água na condição de contorno, tornam o modelo matemático acoplado. Paralelamente, resolveu-se analítica e numericamente um modelo similar ao antes citado mas sem acoplamento. Os resultados obtidos a partir do modelo com acoplamento são comparados com os do modelo sem acoplamento a fim de se analisar a influência da transferência simultânea de calor e massa na secagem de cereais granulares. Convém salientar que, os termos de acoplamento inseridos no presente trabalho são distintos dos apresentados por HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988) por se levar em consideração a energia devida à vaporização da água na superfície do grão. A comparação dos resultados agora obtidos com os disponíveis na literatura (cf. HAGHIGHI e SEGERLIND, 1988) mostram a pertinência dos termos de acoplamento ao propiciarem curvas de secagem satisfatoriamente próximas das experimentais.

Para solução do modelo matemático acoplado, adota-se uma abordagem pelo método direto de elementos de contorno. Esta escolha se respalda nas vantagens computacionais do citado método para solução de equações diferenciais parciais que envolvem basicamente o operador laplaciano dependente do tempo e que podem apresentar elevados gradientes nas variáveis dependentes. Soma-se a isso as facilidades advindas das simetrias do problema que o reduzem a um problema unidimensional cujo contorno é apenas um ponto.

No CAPÍTULO II do presente trabalho, faz-se uma Revisão Bibliográfica e comenta-se os principais estudos que embasaram a modelagem proposta para o problema de secagem de um grão de soja.

No CAPÍTULO III, estão inclusos a Modelagem Matemática, Materiais e Métodos. Tem início com o Equacionamento Matemático e com uma modelagem física do problema em questão. No item 3.2, são apresentadas e comentadas as condições inicial e de contorno. Em seguida, item 3.3 é aplicado o método de Elementos de Contorno nas equações da difusão. No item 3.4 é feito o tratamento numérico da formulação integral e no item seguinte apresenta-se o procedimento adotado para sua resolução. As propriedades geométrica e físicas do soja usadas nos experimentos numéricos nessa dissertação são apresentadas no item 3.6. No item 3.7 é apresentada a equação proposta para o modelo sem considerar o termo de acoplamento de umidade e no item 3.8, o procedimento de simulação numérica. Os perfis de umidade e temperatura dentro do grão de soja foram obtidos por meio da determinação, após serem escolhidas convenientemente, em sucessivos experimentos numéricos, os passos  $h_u$  e  $h_t$  que não causavam instabilidade numérica e são adequados para obtenção dos resultados.

No CAPÍTULO IV são apresentados, em forma de gráficos, os resultados obtidos por meio da simulação numérica do processo com acoplamento de umidade, comparados com os resultados obtidos da literatura e os analíticos e numéricos sem o termo de acoplamento.

No CAPÍTULO V estão as conclusões e sugestões para trabalhos futuros e no CAPÍTULO VI estão as Referências Bibliográficas citadas no presente estudo. Os balanços de massa e energia estão, a título de mostrar os passos seguidos na modelagem, no APÊNDICE A. No APÊNDICE B é apresentada uma solução analítica da equação da difusão mássica sem considerar o termo de acoplamento. No APÊNDICE C é obtida a solução da equação da difusão térmica sem o termo de acoplamento de umidade, utilizando o método de Elementos de Contorno e no APÊNDICE D, é obtida a solução fundamental em coordenadas esféricas.

## CAPÍTULO II

### REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

#### 2.1 Referências Bibliográficas

Neste item são mencionados alguns estudos relacionados com a modelagem física e o método numérico, que contribuíram para realização desta dissertação.

HUSAIN, CHEN e CLAYTON, (1973), simularam a difusão acoplada de calor e massa em materiais biológicos utilizando as equações de Luikov modificadas, e coeficiente de difusão variável. Foram comparados um modelo de difusão isotérmico e outro não isotérmico. O modelo obtido em coordenadas cilíndricas, foi testado simulando a secagem de arroz bruto, sendo os resultados numéricos comparados com os experimentais. Foi observado que os resultados obtidos pela simulação e os obtidos do procedimento experimental atingiram o equilíbrio muito rapidamente devido à elevada temperatura utilizada na secagem. Além disso, os resultados obtidos da simulação utilizando um modelo isotérmico e um modelo não isotérmico

foram praticamente coincidentes. Esta observação foi considerada na modelagem matemática no presente estudo.

SOKHANSANJ e BRUCE, (1987), simularam a secagem de grãos, comparando os modelos simplificado, da condução e da difusão com resultados experimentais, aplicado a grãos de cevada e trigo. Em seus estudos, consideraram a evaporação de umidade apenas na superfície do grão, sendo esta consideração também adotada no estabelecimento das condições de contorno do presente estudo. Em suas conclusões, o modelo da difusão é o mais recomendado para uma predição acurada de temperatura e umidade durante o processo de secagem.

HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988), modelaram a transferência simultânea de calor e massa em uma esfera isotrópica utilizando um modelo de difusão similar ao de Luikov modificado por Husain. O modelo bidimensional, dependente do tempo, utiliza coordenadas cilíndricas e foi resolvido pelo método de Elementos Finitos. O modelo foi testado na simulação de secagem de grãos de soja, cujas propriedades foram consideradas constantes em seu interior. A malha utilizada foi de 255 elementos triangulares compostos de 152 nós sobre um quadrante de círculo, aproveitando-se da simetria esférica do grão de soja. Conforme suas observações,

os resultados da simulação concordaram bem com os dados experimentais fornecidos por Overhults e Shahab. A temperatura média do grão atingiu o equilíbrio em torno de 1 hora, e permaneceu constante a partir daí até o final da secagem. O processo de secagem do grão foi bem representado pelo modelo da difusão de Luikov, e os resultados da simulação foram bem próximos dos valores experimentais obtidos por Overhults e por Shahab. Na presente dissertação é utilizado também o modelo de Luikov, porém, será buscada uma solução em coordenadas esféricas. Devido à semelhança na modelagem, serão realizadas comparações entre esses resultados obtidos por Elementos Finitos e os obtidos pelo método de Elementos de Contorno.

FORTES e OKOS, (1980), analisaram os fundamentos das teorias de secagem, expondo os conceitos básicos dos fenômenos de adsorção e dessorção, quando aplicado à secagem de gêneros alimentícios e grãos. Foram descritas as principais situações que ocorrem durante o processo de secagem de alimentos, citados por diversos pesquisadores, dividindo as várias etapas de secagem de acordo com a forma com que a água está ligada ao produto. Também foram comparados os fundamentos dos diversos mecanismos descritos pelos pesquisadores incluindo a teoria abordada por Luikov, que foi tomado como base nesta dissertação.

BORIS, (1991), analisou os fundamentos da secagem em corpos porosos capilares estudados por alguns pesquisadores na última década. Apresentou as diversas teorias existentes, mostrando para cada situação a equação proposta para o modelo. Comparou resultados numéricos e experimentais e determinou a eficiência de cada modelo em representar o fenômeno de transferência simultânea de calor e massa em um corpo poroso. Para o modelo acoplado, considerando a secagem sendo realizada à pressão atmosférica e baixa temperatura (abaixo do ponto de ebulição da água), foram feitas algumas considerações que resultaram em simplificações algébricas, como por exemplo: a) a variação da massa de vapor, no interior dos poros é desprezível se compararmos com a variação da massa de líquido; b) o termo convectivo do balanço de energia é desprezível. Essas considerações também foram feitas no presente estudo. Apesar das limitações de cada modelo e respeitando as restrições dos métodos, concluiu, com base nos resultados experimentais, que o modelo matemático macroscópico, representado pelo modelo de difusão de Luikov obtido pela equação de balanço de massa e energia, é um potente recurso para descrever e analisar a secagem de corpos porosos.

A partir deste ponto, serão mencionados os trabalhos relacionados com a técnica de Elementos de Contorno.

FERNANDES e PINA, (1983), analisaram a equação da condução de calor bidimensional em regime transiente com duas condições de contorno - de Dirichlet em uma parte do contorno e do tipo Robin em outra, utilizando a técnica de Elementos de Contorno. Foi obtida uma representação da solução na forma integral no contorno, com discretização linear no tempo e malha quadrática no domínio. O modelo foi testado em um objeto de forma retangular, utilizando vários elementos diferentes e formas de discretização no tempo, e comparado com resultados analíticos. O trabalho mostra que o método de Elementos de Contorno (BEM) pode ser utilizado com êxito para resolver problemas de condução de calor em regime transiente. Em outro estudo, (PINA e FERNANDES, 1983), analisaram o problema da condução de calor tridimensional em regime transiente, utilizando a mesma técnica anterior. Foi mostrada a boa precisão deste método utilizando elementos lineares de discretização. Estes estudos, apresentando várias formas de progredir no tempo, possibilitou a decisão de optar inicialmente por elementos lineares, que foram úteis para aplicação do procedimento de discretização no presente trabalho.

SILVA, (1995), simulou a secagem de gelatina, usando acoplamento do leite com a partícula, considerada como um corpo cilíndrico e não poroso. O modelo da difusão foi

usado para caracterizar o movimento do líquido no interior da gelatina, sendo adotado o método de Elementos de Contorno para transformar as equações diferenciais em equações integrais no contorno. A partícula foi discretizada por elementos quadráticos, sendo adotado o recurso de progredir linearmente no tempo. Para resolução do modelo no leito, utilizou-se de discretização da altura do leito, obtendo um sistema de equações diferenciais ordinárias, que foram resolvidas pelo método de GEAR. No presente estudo foi adotado o mesmo processo de discretização no domínio, com elementos quadráticos, inclusive sendo aproveitadas algumas rotinas computacionais.

## CAPÍTULO III

### MODELAGEM MATEMÁTICA, MATERIAIS E MÉTODOS

O presente capítulo inicia com as restrições que delimitam o problema e permitem a sua modelagem física e matemática. Logo após é feito o estabelecimento das condições inicial e de contorno. A seguir, no item 3.3, vem uma breve descrição do método de Elementos de Contorno e sua aplicação nas equações da difusão, em coordenadas esféricas. Posteriormente, é dado um tratamento numérico à formulação integral obtida e é descrito o procedimento de simulação numérica. No item 3.6 estão as propriedades geométricas e físicas do grão de soja.

#### 3.1 Equacionamento Matemático

Os estudos, sobre transferência de calor e massa em corpos porosos capilares LUIKOV, (1966), supõem que os fluxos devido à difusão de vapor e à difusão de líquido, se formam à partir do gradiente de concentração total de umidade, e do

gradiente de temperatura. Além dessas considerações, os balanços de massa e energia realizados, levam em conta as seguintes ( cf. BORIES, 1991 e LUIKOV, 1966):

- 1- A transferência de calor e massa - transporte de vapor, ar, e água - são consideradas simultaneamente no corpo;
- 2- A transferência de vapor e gás inerte (ar) é feita por difusão e efusão. Não é considerada a transferência por filtração. A transferência de líquido ocorre por difusão e adsorção capilar. Todos estes tipos de transferência são aqui denominados condicionalmente de difusão, e será empregada uma equação similar à lei de *Fick*, para representar este mecanismo;
- 3- O coeficiente de difusão mássica  $D$  é considerado constante dentro do corpo, ou seja, não depende de concentração ou temperatura. Todas as demais propriedades físicas do grão de soja serão consideradas constantes.
- 4- Não será considerado o efeito da redução de volume devido à eliminação de água; isto é, o volume do corpo e sua área superficial serão considerados constantes;

5- O grão de soja será considerado um corpo esférico, isotrópico e poroso, sendo que as variáveis dependentes são axissimétricas, isto é, não dependem das coordenadas circunferenciais  $q$  e  $j$ ;

6- A variação da massa de vapor, no interior dos poros é desprezível se compararmos com a variação da massa de líquido;

7- O termo convectivo do balanço de energia é desprezível face ao termo condutivo.

A Figura 3.1 a seguir apresenta esquematicamente o volume de controle de um único grão de soja.

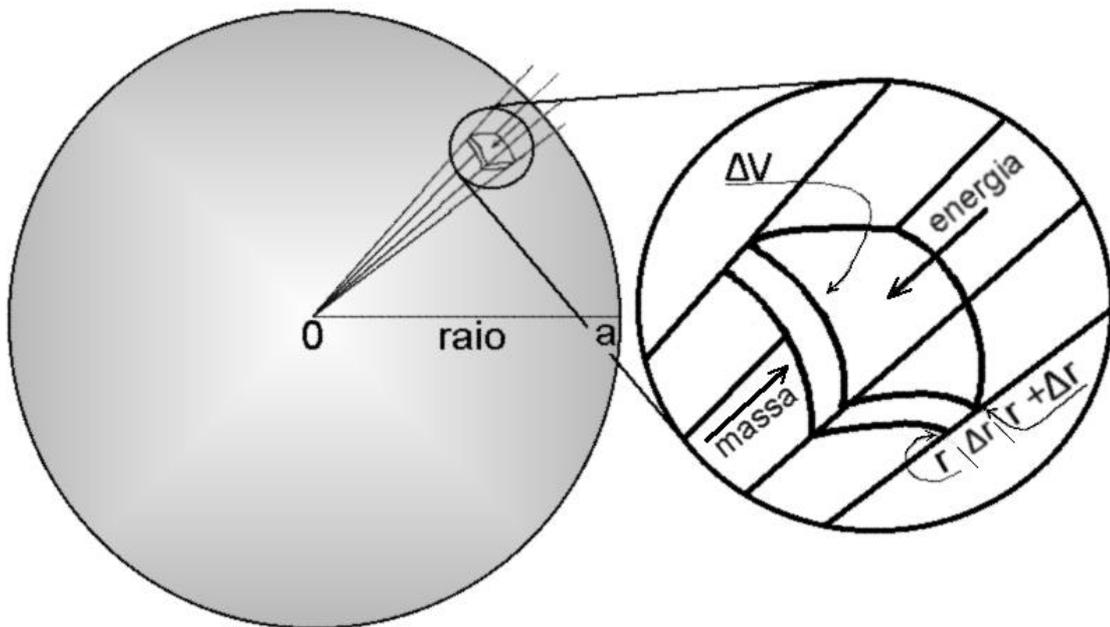


FIGURA 3.1 REPRESENTAÇÃO SIMBÓLICA DO VOLUME DE CONTROLE DE UM ÚNICO GRÃO DE SOJA UTILIZADO NO BALANÇO DE MASSA E ENERGIA.

Partindo-se, então, de um balanço de massa e energia neste volume de controle (cf. APÊNDICE A), obtém-se a seguinte equação para a umidade,

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 U + Dd \cdot \nabla^2 T, \quad (3.1)$$

e para a temperatura,

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{Le}{C_p} D \cdot \nabla^2 U + \left( a + \frac{Led}{C_p} D \right) \cdot \nabla^2 T \quad , \quad (3.2)$$

onde:

$D$  = Difusividade mássica da partícula;

$d$  = Coeficiente termogradiante;

$U$  = Fração mássica de água em forma de umidade;

$T$  = Temperatura;

$t$  = Tempo;

$L$  = Calor latente de evaporação de água;

$e$  = Fator de tortuosidade que leva em conta a dificuldade de difusão de vapor em meios porosos;

$C_p$  = Capacidade calorífica da partícula;

$a$  = Difusividade térmica da partícula. [ $a = k_T / (r_s \cdot C_p)$ ];

$k_T$  = Condutividade térmica da partícula;

$r_s$  = Densidade do sólido seco.

HUSAIN, et al., (1973), compararam a difusão não isotérmica com difusão em sistemas isotérmicos, utilizando um modelo de Luikov modificado, e considerando coeficiente de difusão variável. O modelo foi utilizado para prever o comportamento de secagem de grãos de arroz bruto, dispostos em

uma camada delgada. Neste trabalho de Husain, foi sugerido, pelo fato das duas soluções não serem muito diferentes, que o termo referente à difusão mássica por gradiente térmico poderia ser desprezado. Todavia isto não significava, necessariamente, que os gradientes térmicos fossem também desprezíveis, mas devido à pequena magnitude do coeficiente termogradiante ( $\mathbf{d}$ ), eles poderiam ser retirados das equações. Após essas constatações, as equações 3.1 e 3.2 ficam sendo,

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 U \quad , \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \left( \frac{L \mathbf{e} D}{C_p} \right) \cdot \nabla^2 U + \mathbf{a} \cdot \nabla^2 T \quad . \quad (3.4)$$

É com base nos estudos de Husain, equações 3.3 e 3.4, que o presente trabalho simulará a difusão simultânea de calor e massa na secagem artificial de um grão de soja.

### **3.2 Estabelecimento das Condições Inicial e de Contorno.**

Condição inicial:

No tempo,  $t=0$ , o grão de soja se encontra à temperatura  $T_0$  e umidade relativa  $U_0$ , uniformes em todo o grão, sendo estas condições descritas assim,

$$\text{CI.: } r \leq a; t = 0 @ T = T_0 ; U = U_0 . \quad (3.5)$$

Com relação às condições de contorno, tem-se,

- Para temperatura,
  - O fluxo de calor que entra no grão pelo contorno por convecção é proporcional à diferença entre a temperatura da superfície e a temperatura do meio externo, somando-se o termo relativo à evaporação de umidade no contorno; isto pode ser expresso como sendo,

$$t > 0 ; r = a : J_T = h_c [T_\infty - T(a)] - L r_s D \frac{\partial U}{\partial r} ,$$

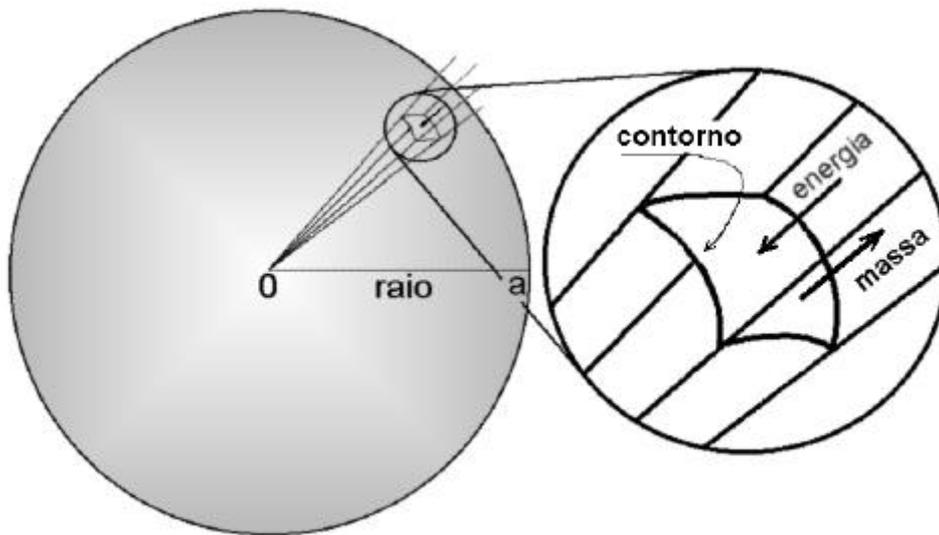


FIGURA 3.2 REPRESENTAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO.

onde,  $J_T$  = fluxo de calor;

$h_c$  = coeficiente de convecção de calor;

$T_\infty$  = temperatura do meio externo;

$T(a)$  = temperatura da superfície;

$Lr_s D \rho_w / \rho_p$  = representa a energia relativa à evaporação de umidade;

$L$  = Calor latente de evaporação.

A taxa de troca de calor por unidade de área superficial da partícula é obtida por:

$$J_T = -k_T \frac{\partial T}{\partial n} ,$$

onde  $k_T$  é a condutividade térmica do grão de soja, e  $\frac{\partial (\cdot)}{\partial n}$  expressa o gradiente na direção normal externa à superfície.

Desta forma obtém-se, para temperatura,

CC1:  $r = a$  (referente ao raio externo do grão);  $t > 0$

$$\textcircled{*} -k_T \frac{\partial T}{\partial n} + h_c [T_\infty - T(a)] + L r_s D \frac{\partial U}{\partial n} = 0. \quad (3.6)$$

CC2:  $r = 0$  (referente ao centro do grão);  $t > 0$

$$\textcircled{*} \frac{\partial T}{\partial n} = 0 .$$

- Para umidade,

- O fluxo de massa que passa pela superfície do grão é proporcional à diferença entre a umidade da superfície e a umidade de equilíbrio na temperatura ambiente, e pode ser expresso por:

$$J_M = w(U - U_c) ,$$

onde,  $J_M$  = fluxo de massa;

$w$  = coeficiente de convecção de umidade;

$U_c$  = umidade de equilíbrio da superfície à temperatura ambiente.

A taxa de transferência de massa por unidade de área superficial do grão, é obtida por:

$$J_M = -D \frac{\partial U}{\partial r} ,$$

onde,  $D$  é a difusividade mássica da partícula.

Desta forma, resultam as seguintes condições para umidade,

CC1:  $r = a$  (relativo ao raio externo do grão);  $t > 0$

$$\textcircled{R} -D \cdot \frac{\partial U}{\partial r} + w(U - U_c) = 0 \quad . \quad (3.7)$$

CC2:  $r = 0$  (relativo ao centro do grão);  $t > 0$

$$\textcircled{*} \quad \frac{\partial U}{\partial n} = 0.$$

### 3.3 Método de Elementos de Contorno (BEM).

Uma vez obtidas as equações diferenciais que descrevem o fenômeno de secagem, um problema que surge é o de como resolvê-las. Uma forma, é escolher um método numérico.

Alguns métodos trabalham essencialmente com partições e aproximações no domínio do problema. Como representantes desses métodos tem-se o de diferenças finitas e o de elementos finitos. Esses, são denominados métodos de domínio.

O método de diferenças finitas, usa a formulação diferencial do problema que é aproximada por diferenças finitas em pontos nodais de uma malha estabelecida no domínio da formulação. Tal aproximação é equivalente a utilização de um resíduo ponderado em que as funções de ponderação são distribuição de Dirac (**d** de Dirac).

O método de elementos finitos, tem início com uma partição do domínio do problema em sub-domínios denominados elementos finitos. Neles são definidas funções de interpolação locais que por um processo de sobreposição constituem funções de interpolação globais. Estas satisfazem pelo menos condições de contorno do tipo Dirichlet para o operador diferencial do problema. O método segue, formando um resíduo com a equação diferencial, que pode ser ponderado pelas próprias funções de interpolação - Método de Galerkin ou um outro tipo de ponderação que então dá origem a outros tipos de métodos de elementos finitos.

Uma outra classe de métodos engloba os que trabalham primeiro no contorno do problema, para depois determinar as variáveis de interesse no domínio do problema. São os métodos de contorno.

Nesses, a formulação diferencial é transformada em integral por meio de uma técnica de resíduo ponderado ou de reciprocidade entre dois estados possíveis no sistema. No primeiro caso, a função de ponderação é a solução fundamental do operador diferencial adjunto ao operador do problema. No caso de reciprocidade, um dos estados é o real - que se deseja

determinar - e o outro é o estado estabelecido pela resolução fundamental.

Aplicando-se o teorema da divergência e um processo limite, conduz-se a solução para o contorno do domínio de definição do problema. Ali, as incógnitas são aproximadas por interpolação em partições do contorno denominadas elementos de contorno. O método segue, em geral, fazendo-se a colocação, das equações integrais discretizadas, nos pontos nodais da interpolação realizada.

O presente trabalho emprega o método direto de Elementos de Contorno (cf. SILVA, 1995 e BREBBIA, 1984). Primeiramente, é obtido o operador ' $L^*$ ', adjunto do operador da equação diferencial parabólica, ' $L$ ', que representa a equação da difusão. A solução fundamental associada ao operador adjunto ' $L^*$ ' representada por ' $G^*$ ' é obtida a partir da equação:

$$L^*(G^*) = k\nabla^2 G^* - \frac{\partial G^*}{\partial t} + \mathbf{j} = \mathbf{d}(r, \mathbf{z}, t_F, t) .$$

A solução  $G^* = G^*(r, \mathbf{z}, t_F, t)$  é uma designação genérica de  $U^*$  e  $T^*$  que são soluções fundamentais dos operadores adjuntos ' $L^*$ ' obtidos dos balanços de massa e

energia. A solução fundamental do operador ' $L^*$ ', em coordenadas esféricas é obtida partindo-se da mesma solução em coordenadas cartesianas apresentada por CARSLAW e JAEGER, (1959). O estado fundamental também chamado 'estado auxiliar', apresenta algumas propriedades que serão definidas posteriormente. A equação diferencial representada pelo operador ' $L$ ', pode ser escrita como:

$$L(G) = k\nabla^2 G - \frac{\partial G}{\partial t} = 0 \quad ,$$

onde  $G$  representa o estado real e assume as incógnitas  $U(r,t)$  e  $T(r,t)$  nas equações de transferência de massa e energia. Efetuando-se o produto entre o operador adjunto  $L^*(G^*)$  e o estado real  $G$  e entre o operador da equação da difusão  $L(G)$  e o estado auxiliar  $G^*$ , subtraindo-se estes resultados, obtém-se duas equações diferenciais, uma para equação da umidade e outra para equação da energia. Aplicando as identidades de Green nestes resultados, as equações diferenciais são transformadas em equações integrais definidas no domínio ( $W$ ). A formulação na forma integral apresenta singularidades devido à natureza da solução fundamental  $G^*$  e sua derivada, que deverão ser resolvidas posteriormente. As formulações definidas no domínio são então levadas para o contorno, onde

são inseridas as condições de contorno do problema. Nesta passagem para o contorno, o problema que era definido no domínio unidimensional pela variável radial, passa agora a ter dimensão zero, representado por um ponto no contorno. Para levar a formulação para o contorno, faz-se  $z$  igual a 'a', raio da esfera. Na equação do balanço de energia, permanece um termo definido no domínio, o termo de acoplamento, que não é levado para o contorno, sendo aí discretizado.

As integrais obtidas no contorno apresentam singularidades e são resolvidas numericamente. Onde não há singularidade, o cálculo pôde ser feito analiticamente, utilizando o programa MAPLE e transferindo os resultados para subrotinas em linguagem FORTRAN.

Para discretização do domínio foi escolhido uma malha com 5 elementos quadráticos, totalizando 11 nós e para evoluir no tempo, é adotado o princípio passo a passo, com elementos lineares BREBBIA, (1984), BREBBIA, TELLES e WROBEL, (1984), e SILVA, (1995), e quadráticos FINLAYSON, (1980).

A seguir, é aplicado o método de Elementos de Contorno nas equações 3.3 e 3.4, da difusão mássica e de calor.

Rearranjando as citadas equações vem,

$$D \nabla^2 U - \frac{\mathcal{I} U}{\mathcal{I} t} = 0 \quad , \quad (3.8)$$

$$\mathbf{a} \nabla^2 T - \frac{\mathcal{I} T}{\mathcal{I} t} + \mathbf{Y}(U, t) = 0 \quad , \quad (3.9)$$

onde foi feito,

$$\mathbf{Y}(U, t) = \frac{L\mathbf{e}D}{c\rho} \nabla^2 U \quad .$$

Seja ' $L(\cdot)$ ' operador diferencial definido por,

$$L(\cdot) = K \nabla^2(\cdot) - \frac{\mathcal{I}(\cdot)}{\mathcal{I} t} \quad .$$

Usando a definição de ' $L$ ', as equações 3.8 e 3.9 se tornam,

$$L(U) = D \nabla^2(U) - \frac{\mathcal{I}(U)}{\mathcal{I} t} = 0 \quad , \quad (3.10)$$

$$L(T) = \mathbf{a} \nabla^2(T) - \frac{\mathcal{I}(T)}{\mathcal{I} t} = -\mathbf{Y}(U, t) \quad . \quad (3.11)$$

Seja também ' $L^*(.)$ ' o operador adjunto de ' $L(.)$ ', que pode ser obtido por tratamento convencional de operadores diferenciais resultando em

$$L^*(.) = K \nabla^2(.) + \frac{\mathcal{I}(.)}{\mathcal{I}t} . \quad (3.12)$$

A função  $G^*(r, \mathbf{z}, t_F, t)$  que satisfaz à equação

$$L^*(G^*) = K \nabla^2(G^*) + \frac{\mathcal{I}(G^*)}{\mathcal{I}t} = \mathbf{d}(r, \mathbf{z}, t_F, t) , \quad (3.13)$$

é denominada de solução fundamental do operador ' $L^*(.)$ ', BREBBIA e SKERGET,(1985). Nesta equação, tem-se

$\mathbf{z}$  e  $r$   $\hat{I}$   $W$  = coordenadas radiais,

$t_F$  = tempo final de aplicação do potencial,

$\mathbf{d}$  é a distribuição de *Dirac*, que representa uma fonte pontual de calor ou umidade aplicada em  $\mathbf{z}$  no tempo  $t$ , e verificada em  $r$  no tempo final  $t_F$ , definida como

$$\int_t \int_W f(\mathbf{z}, t_F) d\mathbf{r}, \mathbf{z}, t_F, t) dW_z dt = f(\mathbf{z}, t_F) \quad . \quad (3.14)$$

Em coordenadas esféricas (cf. APÊNDICE D), a função  $G^*(r, \mathbf{z}, t_F, t)$  fica sendo,

$$G^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) = 0 \quad t > t_F \quad , \quad (3.15)$$

$$G^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) = \frac{1}{2rz(\rho kt)^{0,5}} \cdot [\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2] \quad t < t_F \quad , \quad (3.16)$$

conforme CARSLAW & JAEGER, (1959).

A derivada da função  $G^*(r, \mathbf{z}, t_F, t)$  em relação à variável  $r$ , é igual a

$$\frac{\partial G^*}{\partial r}(r, \mathbf{z}, t_F, t) = -\frac{[\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2]}{2r^2 z(\rho kt)^{0,5}} + \frac{-\frac{(r-z)\mathbf{b}_1}{2kt} + \frac{(r+z)\mathbf{b}_2}{2kt}}{rz(\rho kt)^{0,5}} \quad . \quad (3.17)$$

A derivada da função  $G^*(r, \mathbf{z}, t_F, t)$ , em relação à variável  $t$  é,

$$\frac{\partial G^*}{\partial t}(r, \mathbf{z}, t_F, t) = \frac{\frac{(r-z)^2 \mathbf{b}_1}{4kt^2} - \frac{(r+z)^2 \mathbf{b}_2}{4kt^2}}{2rz(\rho kt)^{0,5}} - \frac{\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2}{4rz(\rho k)^{0,5} t^{1,5}} \quad , \quad (3.18)$$

onde, nessas equações,

$$t = t_F - t \quad ,$$

$$b_1 = \exp\left(-\frac{(r - z)^2}{4Kt}\right) \quad ,$$

$$b_2 = \exp\left(-\frac{(r + z)^2}{4Kt}\right) \quad ,$$

$z$ , representa a coordenada no espaço no ponto de aplicação do potencial,

$r$ , representa a coordenada no espaço no ponto onde se deseja a solução,

$K = a$ , para equação do balanço de energia,

$K = D$ , para equação do balanço de massa,

$G^*(r, z, t_F, t) = T^*(r, z, t_F, t)$ , para equação de balanço de energia,

$G^*(r, z, t_F, t) = U^*(r, z, t_F, t)$ , para equação de balanço de massa.

A solução fundamental apresenta as seguintes propriedades (cf. BREBBIA e SKERGET, 1985):

$$D \nabla^2 U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) + \frac{\mathfrak{I} U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t)}{\mathfrak{I} t} = 0 \text{ em } \mathbf{W} \text{ p/ } t < t_F, \quad (3.19)$$

$$\mathbf{a} \nabla^2 T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) + \frac{\mathfrak{I} T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t)}{\mathfrak{I} t} = 0 \text{ em } \mathbf{W} \text{ p/ } t < t_F, \quad (3.20)$$

$$\lim_{e \rightarrow 0} \int_{\mathbf{W}} U^*(r, \mathbf{z}, t_{F-e}, t) U(r, t_0) d\mathbf{W} = U(\mathbf{z}, t_F) \quad \text{p/ } t = t_F, \quad (3.21)$$

$$\lim_{e \rightarrow 0} \int_{\mathbf{W}} T^*(r, \mathbf{z}, t_{F-e}, t) T(r, t_0) d\mathbf{W} = T(\mathbf{z}, t_F) \quad \text{p/ } t = t_F, \quad (3.22)$$

Multiplicando a equação 3.10 por  $U^*$ , e a equação 3.19 por  $U$ , e a equação 3.11 por  $T^*$ , e a equação 3.20 por  $T$ , tem-se

$$\left( D \nabla^2 U - \frac{\mathfrak{I} U}{\mathfrak{I} t} \right) \cdot U^* = 0, \quad (3.23)$$

$$\left( D \nabla^2 U^* + \frac{\mathfrak{I} U^*}{\mathfrak{I} t} \right) \cdot U = 0, \quad (3.24)$$

$$\left[ \mathbf{a} \nabla^2 T - \frac{\mathfrak{I} T}{\mathfrak{I} t} + \mathbf{Y}(U, t) \right] \cdot T^* = 0, \quad (3.25)$$

$$\left( \mathbf{a} \nabla^2 T^* + \frac{\mathfrak{I} T^*}{\mathfrak{I} t} \right) \cdot T = 0 \quad . \quad (3.26)$$

Subtraindo 3.24 de 3.23 e 3.26 de 3.25, integrando no intervalo de tempo  $t_0$  a  $t_F$  e no espaço compreendido por uma esfera de raio  $a$  e fazendo uso da simetria esférica, obtém-se

$$\begin{aligned}
 D \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{W}} [U^* \nabla^2 U - U \nabla^2 U^*] d\mathbf{W} dt = \\
 \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{W}} \left( U^* \frac{\mathcal{J}U}{\mathcal{J}t} + U \frac{\mathcal{J}U^*}{\mathcal{J}t} \right) d\mathbf{W} dt \quad , \quad (3.27)
 \end{aligned}$$

e analogamente,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{a} \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{W}} [T^* \nabla^2 T - T \nabla^2 T^*] d\mathbf{W} dt = \\
 \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{W}} \left( T^* \frac{\mathcal{J}T}{\mathcal{J}t} + T \frac{\mathcal{J}T^*}{\mathcal{J}t} - T^* \mathbf{Y}(U, t) \right) d\mathbf{W} dt \quad . \quad (3.28)
 \end{aligned}$$

Aplicando a segunda identidade de *Green*<sup>1</sup> nos termos do lado esquerdo das equações 3.27 e 3.28, rearranjando as

---

<sup>1</sup> 2ª Identidade de *Green*  $\oint_{\mathcal{J}\mathbf{W}} u \frac{\mathcal{J}v}{\mathcal{J}n} - \oint_{\mathcal{J}\mathbf{W}} v \frac{\mathcal{J}u}{\mathcal{J}n} = \int_{\mathbf{W}} u \cdot \mathbf{D}v - \int_{\mathbf{W}} v \cdot \mathbf{D}u$

parcelas e aplicando a primeira identidade de Green<sup>2</sup> no último termo da equação 3.28, resultam

$$D \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{G}} \left[ U^* \frac{\mathcal{I} U}{\mathcal{I} n} - U \frac{\mathcal{I} U^*}{\mathcal{I} n} \right] d\mathbf{G} dt = \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{W}} \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I} t} (U \cdot U^*) d\mathbf{W} dt \quad , \quad (3.29)$$

$$a \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{G}} \left[ T^* \frac{\mathcal{I} T}{\mathcal{I} n} - T \frac{\mathcal{I} T^*}{\mathcal{I} n} \right] d\mathbf{G} dt = \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{W}} \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I} t} (T \cdot T^*) d\mathbf{W} dt -$$

$$K_1 \int_{t_0}^{t_F} \left[ \int_{\mathbf{G}} T^* \frac{\mathcal{I} U}{\mathcal{I} n} d\mathbf{G} - \int_{\mathbf{W}} \text{grad} (T^*) \text{grad} (U) d\mathbf{W} \right] dt \quad , \quad (3.30)$$

onde:

$$K_1 = \frac{LeD}{Cp} \quad ,$$

e as demais variáveis já foram antes nomeadas.

Integrando novamente o último termo da equação 3.30, vem

---

<sup>2</sup> 1ª Identidade de Green  $\int_{\mathbf{W}} \text{grad} u \cdot \text{grad} v = \oint_{\mathcal{I}\mathbf{W}} u \frac{\mathcal{I} v}{\mathcal{I} n} - \int_{\mathbf{W}} u \mathbf{D} v$

$$\int_{\mathbf{W}} \text{grad} (T^*) \cdot \text{grad} (U) d\mathbf{W} = \int_{\mathbf{G}} U \frac{\mathcal{I} T^*}{\mathcal{I} n} d\mathbf{G} - \int_{\mathbf{W}} U \nabla^2 T^* d\mathbf{W} \quad . \quad (3.31)$$

Mas, a partir da equação 3.19, tem-se

$$\int_{\mathbf{W}} U \nabla^2 T^* d\mathbf{W} = \frac{-1}{\mathbf{a}} \int_{\mathbf{W}} U \frac{\mathcal{I} T^*}{\mathcal{I} t} d\mathbf{W} \quad . \quad (3.32)$$

Substituindo 3.32 em 3.31 e 3.30, obtém-se

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{G}} \left[ T^* \frac{\mathcal{I} T}{\mathcal{I} n} - T \frac{\mathcal{I} T^*}{\mathcal{I} n} \right] d\mathbf{G} dt &= \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{W}} \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I} t} (T^* \cdot T) d\mathbf{W} dt - \\ &K_1 \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{G}} T^* \frac{\mathcal{I} U}{\mathcal{I} n} d\mathbf{G} dt + K_1 \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{G}} U \frac{\mathcal{I} T^*}{\mathcal{I} n} d\mathbf{G} dt + \\ &\frac{K_1}{\mathbf{a}} \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{W}} U \frac{\mathcal{I} T^*}{\mathcal{I} t} d\mathbf{W} dt \quad . \quad (3.33) \end{aligned}$$

Calculando no tempo as integrais que estão no lado direito das equações 3.29 e 3.33, tem-se

$$D \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{G}} \left[ U^* \frac{\mathcal{I} U}{\mathcal{I} n} - U \frac{\mathcal{I} U^*}{\mathcal{I} n} \right] d\mathbf{G} dt = \int_{\mathbf{W}} (U^* \cdot U) \Big|_{t_0}^{t_F} d\mathbf{W} \quad , \quad (3.34)$$

$$\mathbf{a} \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{G}} \left[ T^* \frac{\mathcal{I} T}{\mathcal{I} n} - T \frac{\mathcal{I} T^*}{\mathcal{I} n} \right] d\mathbf{G} dt = \int_{\mathbf{W}} (T^* \cdot T) \Big|_{t_0}^{t_F} d\mathbf{W} -$$

$$K_1 \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{G}} T^* \frac{\mathcal{I} U}{\mathcal{I} n} d\mathbf{G} dt + K_1 \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{G}} U \frac{\mathcal{I} T^*}{\mathcal{I} n} d\mathbf{G} dt +$$

$$\frac{K_1}{\mathbf{a}} \int_{t_0}^{t_F} \int_{\mathbf{W}} U \frac{\mathcal{I} T^*}{\mathcal{I} t} d\mathbf{W} dt \quad . \quad (3.35)$$

Estas equações podem ser escritas também na forma,

$$D \int_{t_0}^{t_F} \left[ U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \alpha_1(r, t) - U(r, t) \alpha_1^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \right] a^2 dt =$$

$r=a$

$$\int_0^a \left[ U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) U(r, \mathbf{z}) \right] r^2 dr \quad , \quad (3.36)$$

$t_0$

$$\begin{aligned}
& \mathbf{a} \int_{t_0}^{t_F} \left[ T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{Q}_2(r, t) - T(r, t) \mathcal{Q}_2^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \right]_{r=a} a^2 dt = \\
& \int_0^a \left[ T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) T(r, t) \right]_{t_0}^{t_F} r^2 dr - \\
& K_1 \int_{t_0}^{t_F} \left[ T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{Q}_1(r, t) \right]_{r=a} a^2 dt + \\
& K_1 \int_{t_0}^{t_F} \left[ U(r, t) \mathcal{Q}_2^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \right]_{r=a} a^2 dt + \\
& \frac{K_1}{\mathbf{a}} \int_{t_0}^{t_F} \int_0^a \left[ U(r, t) \mathcal{Q}_3^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \right] r^2 dr dt \quad . \quad (3.37)
\end{aligned}$$

As integrais que aparecem nas equações 3.36 e 3.37 apresentam singularidades quando  $t$  se aproxima de  $t_F$ , devido à natureza das funções  $U^*$  e  $T^*$  e suas derivadas, conforme pode ser visto nas equações 3.16 e 3.17. Para investigar a singularidade da integral do lado direito da equação 3.36 no instante de tempo  $t = t_F$ , subtrai-se uma quantidade arbitrária ' $\epsilon$ ' no tempo  $t_F$  e toma-se o limite quando ' $\epsilon$ ' tende a zero. Desta forma, a citada integral da equação 3.36 fornece:

$$\begin{aligned}
& \int_0^a \left[ U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{U}(r, t) r^2 dr \right]_{t_0}^{t_F} = \\
& \lim_{e \rightarrow 0} \int_0^a \left[ U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{U}(r, t) r^2 dr \right]_{t_0}^{t_F - e} + \\
& \lim_{e \rightarrow 0} \int_0^a \left[ U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{U}(r, t) r^2 dr \right]_{t_F - e}^{t_F} . \tag{3.38}
\end{aligned}$$

De forma análoga, da equação 3.37 obtém-se,

$$\begin{aligned}
& \int_0^a \left[ T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) + (r, t) r^2 dr \right]_{t_0}^{t_F} = \\
& \lim_{e \rightarrow 0} \int_0^a \left[ T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{T}(r, t) r^2 dr \right]_{t_0}^{t_F - e} + \\
& \lim_{e \rightarrow 0} \int_0^a \left[ T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{T}(r, t) r^2 dr \right]_{t_F - e}^{t_F} . \tag{3.39}
\end{aligned}$$

De acordo com as propriedades da solução fundamental expressas pelas equações 3.21 e 3.22, as equações 3.38 e 3.39 ficam sendo,

$$\int_0^a \left[ U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{U}(r, t) r^2 dr \right]_{t_0}^{t_F} =$$

$$U(\mathbf{z}, t_F) - \int_0^a U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{U}(r, t_0) r^2 dr , \quad (3.40)$$

$$\int_0^a \left[ T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{T}(r, t) r^2 dr \right]_{t_0}^{t_F} =$$

$$T(\mathbf{z}, t_F) - \int_0^a T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{T}(r, t_0) r^2 dr . \quad (3.41)$$

Substituindo as equações 3.40 e 3.41 em 3.36 e 3.37 e rearranjando os termos, obtém-se

$$C(\mathbf{z}) \mathcal{U}(\mathbf{z}, t_F) - D \int_{t_0}^{t_F} \left[ U^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{Q}_1(a, t) - U(a, t) \mathcal{Q}_1^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) \right] a^2 dt =$$

$$\int_0^a U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_0) \mathcal{U}(r, t_0) r^2 dr , \quad (3.42)$$

sendo esta a formulação integral para o problema da difusão mássica, definida em qualquer ponto  $\mathbf{z}$  do domínio  $\mathbf{W}$ , onde o primeiro termo corresponde à resposta almejada, a integral do

lado esquerdo é definida apenas no contorno e o último termo é definido no domínio, mas obtido dos resultados do instante anterior, e,

$$\begin{aligned}
C(\mathbf{z})\mathcal{I}(\mathbf{z}, t_F) - \mathbf{a} \int_{t_0}^{t_F} [T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t)q_2(a, t) - T(a, t)q_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t)]a^2 dt = \\
\int_0^a T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_0)\mathcal{I}(r, t_0)a^2 dr + K_1 \int_{t_0}^{t_F} T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t)q_1(a, t)a^2 dt + \\
K_1 \int_{t_0}^{t_F} U(a, t)q_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t)a^2 dt + \\
\frac{K_1}{\mathbf{a}} \int_0^{t_F} \int_0^a U(r, t)q_3^*(r, \mathbf{z}, t_F, t)r^2 dr dt \quad , \quad (3.43)
\end{aligned}$$

representando a formulação integral para o problema da difusão térmica, definida em qualquer ponto  $\mathbf{z}$  do domínio  $\mathbf{W}$ . O primeiro termo corresponde à resposta de temperatura almejada, as 1<sup>a</sup>, 3<sup>a</sup> e 4<sup>a</sup> integrais são definidas apenas no contorno, a segunda é definida no domínio, e calculada com o auxílio dos resultados do instante anterior e a última integral, representa uma força de corpo.

Para levar a formulação integral representada pelas equações 3.42 e 3.43 ao contorno, faz-se o ponto  $\mathbf{z}$  tender para o contorno ( $\mathbf{G}$ ). Quando o ponto  $\mathbf{z}$  pertence ao contorno, podem existir singularidades tanto na função  $G^*$  como em  $\frac{\mathcal{I} G^*}{\mathcal{I} r}$ . Nesta passagem para o contorno,  $C(\mathbf{z})$ , que possuía valor 1 no domínio ( $\mathbf{W}$ ), assume o valor 1/2, quando o contorno for suave (cf. BREBBIA, 1984), produzindo os seguintes resultados:

$$\frac{1}{2} U(a, t_F) - D \int_{t_0}^{t_F} [U^*(a, a, t_F, t) \mathcal{Q}_1(a, t) - U(a, t) \mathcal{Q}_1^*(a, a, t_F, t)] a^2 dt =$$

$$\int_0^a U^*(r, a, t_F, t_0) \mathcal{U}(r, t_0) dr , \quad (3.44)$$

$$\frac{1}{2} T(a, t_F) - \mathbf{a} \int_{t_0}^{t_F} [T^*(a, a, t_F, t) \mathcal{Q}_2(a, t) - T(a, t) \mathcal{Q}_2^*(a, a, t_F, t)] a^2 dt =$$

$$\int_0^a T^*(r, a, t_F, t_0) \mathcal{H}(r, t_0) r^2 dr + K_1 \int_{t_0}^{t_F} T^*(a, a, t_F, t) \mathcal{Q}_1(a, t) a^2 dt +$$

$$K_1 \int_{t_0}^{t_F} U(a, t) \mathcal{Q}_2^*(a, a, t_F, t) a^2 dt + \frac{K_1}{\mathbf{a}} \int_{t_0}^{t_F} \int_0^a U(r, t) \mathcal{Q}_3^*(r, a, t_F, t) r^2 dr dt . \quad (3.45)$$

A mudança do coeficiente que multiplica os primeiros termos das equações 3.44 e 3.45 é devido à contribuição da singularidade no cálculo da integral quando  $\mathbf{z}$  se aproxima do contorno. De uma forma genérica, as equações 3.42 a 3.45 podem ser rescritas, nas formas:

$$C(\mathbf{z})U(\mathbf{z}, t_F) - D \int_{t_0}^{t_F} \left[ U^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{G}_1(a, t) - U(a, t) \mathcal{G}_1^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) \right] a^2 dt =$$

$$\int_0^a U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_0) U(r, t_0) r^2 dr , \quad (3.46)$$

$$C(\mathbf{z})\mathcal{H}(\mathbf{z}, t_F) - \mathbf{a} \int_{t_0}^{t_F} \left[ T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{G}_2(a, t) - T(a, t) \mathcal{G}_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) \right] a^2 dt =$$

$$\int_0^a T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_0) \mathcal{H}(r, t_0) r^2 dr + K_1 \int_{t_0}^{t_F} T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{G}_1(a, t) a^2 dt +$$

$$K_1 \int_{t_0}^{t_F} U(a, t) \mathcal{G}_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) a^2 dt + \frac{k_1}{\mathbf{a}} \int_{t_0}^{t_F} \int_0^a U(r, t) \mathcal{G}_3^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) r^2 dr dt . \quad (3.47)$$

A equação 3.46 representa a formulação integral do método de elementos de contorno, para solução de problemas de difusão mássica unidimensional, em partícula esférica, independente se o ponto  $\mathbf{z}$  pertence ao domínio ou ao contorno. O

domínio foi dividido em pontos discretos e as incógnitas  $U(\mathbf{z}, t_F)$  para  $\mathbf{z}$  pertencente ao domínio, podem ser determinadas a partir de  $U(a, t)$  e  $q_1(a, t)$  obtidas a partir das condições de contorno, e por meio das soluções fundamentais  $U^*$  e  $q_1^*$ . O termo  $U(r, t_0)$  é definido no domínio, porém, não é incógnito em vista de ter sido calculado no instante anterior.

Da mesma forma, a equação 3.47 representa a formulação integral do método de Elementos de Contorno, para solução de problemas de difusão térmica unidimensional com termo de acoplamento, em partícula esférica independente se o ponto  $\mathbf{z}$  pertence ao domínio ou ao contorno. O domínio também foi dividido em pontos discretos e as incógnitas  $T(\mathbf{z}, t_F)$  para  $\mathbf{z}$  pertencente ao domínio, podem ser determinadas a partir de  $T(a, t)$  e  $q_2(a, t)$  obtidas a partir das condições de contorno e das soluções fundamentais  $T^*$  e  $q_2^*$ . Na segunda integral, o termo  $T(r, t_0)$ , definido no domínio, é determinado no instante anterior. Nas 3<sup>a</sup>, 4<sup>a</sup> e 5<sup>a</sup> integrais, da equação 3.47, é onde aparecem os termos de acoplamento, variáveis  $q_1(a, t)$ ,  $U(a, t)$  e  $U(r, t)$ . Os termos  $q_1(a, t)$  e  $U(a, t)$  são definidos apenas no contorno, não são incógnitos, pois já foram obtidos da equação 3.46. O termo  $U(r, t)$ , pertencente à última integral dessa mesma equação, é definido no domínio, e é obtido também da equação 3.46.

Nas equações 3.46 e 3.47,

$$C(\mathbf{z}) = \frac{1}{2}, \text{ se } \mathbf{z} \in \mathbf{G} \quad , \quad C(\mathbf{z}) = 1, \text{ se } \mathbf{z} \in \mathbf{W} \quad ,$$

$$q_1(a, t) = \frac{\int U}{\int n}(a, t) \quad ,$$

$$q_1^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) = \frac{\int U^*}{\int n}(a, \mathbf{z}, t_F, t) \quad ,$$

$$q_2(a, t) = \frac{\int T}{\int n}(a, t) \quad ,$$

$$q_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) = \frac{\int T^*}{\int n}(a, \mathbf{z}, t_F, t) \quad ,$$

$$q_3^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) = \frac{\int T^*}{\int t}(r, \mathbf{z}, t_F, t) \quad ,$$

$$r \in \mathbf{W} \quad ,$$

$$a \in \mathbf{G} .$$

### 3.4 Tratamento Numérico da Formulação Integral

As equações 3.46 e 3.47 representam as formulações integrais para o problema acoplado de difusão de massa e calor

em um corpo esférico. Estas equações serão resolvidas numericamente pelo método da colocação utilizando uma malha de discretização de 11 nós na direção radial do grão de soja. Para evolução no tempo, será adotado o procedimento de marcha passo a passo, em virtude dessa técnica utilizar menor espaço de armazenamento, já que as variáveis no tempo  $t_F$  (instante atual), são funções das variáveis obtidas no tempo  $t_o$  (instante anterior), e também porque desta forma pode-se escolher adequadamente um passo tal que evite instabilidade numérica que provoca oscilações nos tempos iniciais. Além disso, será utilizado passo constante no tempo, pois permite que se calcule todas as integrais apenas uma única vez (SILVA, 1995).

As variáveis  $U(a,t)$ ,  $T(a,t)$ ,  $q_1(a,t)$  e  $q_2(a,t)$ , pertencentes às equações 3.46 e 3.47, definidas apenas no contorno ( $\mathbf{G}$ ), foram aproximadas inicialmente por meio de funções de interpolação lineares no tempo, ou seja,

$$U(a,t) = U(a,t_{F-1})\mathbf{f}_1(t) + U(a,t_F)\mathbf{f}_2(t); \quad (3.48)$$

$$T(a,t) = T(a,t_{F-1})\mathbf{f}_1(t) + T(a,t_F)\mathbf{f}_2(t); \quad (3.49)$$

$$q_1(a,t) = q_1(a,t_{F-1})\mathbf{f}_1(t) + q_1(a,t_F)\mathbf{f}_2(t); \quad (3.50)$$

$$q_2(a,t) = q_2(a,t_{F-1})\mathbf{f}_1(t) + q_2(a,t_F)\mathbf{f}_2(t); \quad (3.51)$$

onde  $\mathbf{f}_1$  e  $\mathbf{f}_2$  são as funções de interpolação lineares:

$$\mathbf{f}_1(t) = \frac{(t_F - t)}{h};$$

$$\mathbf{f}_2(t) = \frac{(t - t_{F-1})}{h};$$

$$t_{F-1} \leq t < t_F;$$

e

$$h = t_F - t_{F-1}.$$

Substituindo as equações 3.48 - 3.51 nas 3.46 e 3.47, adequando os limites de integração para cada intervalo de tempo, para a equação de umidade, vem,

$$\begin{aligned} & C(\mathbf{z})U(\mathbf{z}, t_F) - Da^2[q_1(a, t_{F-1})] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) U^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt - \\ & Da^2[q_1(a, t_F)] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_2(t) U^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt + \\ & Da^2[U(a, t_{F-1})] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) q_1^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt + \\ & Da^2[U(a, t_F)] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_2(t) q_1^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt = \\ & \int_0^a U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) U(r, t_{F-1}) r^2 dr. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Na equação 3.52 a incógnita é  $U(\mathbf{z}, t_F)$  e representa a umidade do grão de soja no instante  $t_F$ , em cada ponto de discretização do raio.  $U(a, t_F)$  e  $q_1(a, t_F)$  são umidade e fluxo radial no contorno do grão no instante  $t_F$ , obtidos da condição de contorno;  $U(a, t_{F-1})$  e  $q_1(a, t_{F-1})$  são umidade e fluxo no contorno definidos no instante anterior.

Similarmente, para equação de energia,

$$\begin{aligned}
& C(\mathbf{z}) T(\mathbf{z}, t_F) - \mathbf{a} a^2 [q_2(a, t_{F-1})] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt - \\
& \mathbf{a} a^2 [q_2(a, t_F)] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_2(t) T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt + \\
& \mathbf{a} a^2 [T(a, t_{F-1})] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) q_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt + \\
& \mathbf{a} a^2 [T(a, t_F)] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_2(t) q_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt = \\
& \int_0^a T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) T(r, t_{F-1}) r^2 dr - \\
& K_1 a^2 [q_1(a, t_{F-1})] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt - \\
& K_1 a^2 [q_1(a, t_F)] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_2(t) T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt + \\
& K_1 a^2 [U(a, t_{F-1})] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) q_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt + \\
& K_1 a^2 [U(a, t_F)] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_2(t) q_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt + \\
& \frac{K_1}{a} \int_{t_{F-1}}^{t_F} \int_0^a U(r, t) q_3^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) r^2 dr dt \quad . \quad (3.53)
\end{aligned}$$

Na equação 3.53 a incógnita é  $T(\mathbf{z}, t_F)$  e representa a temperatura do grão de soja no instante  $t_F$ , em cada ponto de discretização do raio.  $T(a, t_F)$  e  $q_2(a, t_F)$  são temperatura e fluxo radial no contorno do grão no instante  $t_F$ , obtidos da condição de contorno;  $T(a, t_{F-1})$  e  $q_2(a, t_{F-1})$  são temperatura e fluxo no contorno já calculados no instante anterior.  $U(a, t_F)$ ,  $q_1(a, t_F)$ ,  $U(a, t_{F-1})$  e  $q_1(a, t_{F-1})$ , são definidos apenas no contorno e já foram calculados na equação 3.52 e  $U(r, t)$  pertence ao domínio e é também obtido da equação 3.52.

Chamando:

$$G_{U1} = a^2 \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) U^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt \quad , \quad (3.54)$$

$$G_{U2} = a^2 \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_2(t) U^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt \quad , \quad (3.55)$$

$$H_{U1} = a^2 \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) q_1^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt \quad , \quad (3.56)$$

$$H_{U2} = a^2 \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_2(t) q_1^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt \quad , \quad (3.57)$$

$$G_{T1} = a^2 \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt \quad , \quad (3.58)$$

$$G_{T2} = a^2 \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_2(t) T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt \quad , \quad (3.59)$$

$$H_{T1} = a^2 \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) q_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt \quad , \quad (3.60)$$

e

$$H_{T2} = a^2 \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_2(t) q_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt \quad , \quad (3.61)$$

e substituindo 3.54 a 3.61 nas equações 3.52 e 3.53, obtém-se para a umidade,

$$C(\mathbf{z}) U(\mathbf{z}, t_F) - DG_{U1} q_1(a, t_{F-1}) - DG_{U2} q_1(a, t_F) +$$

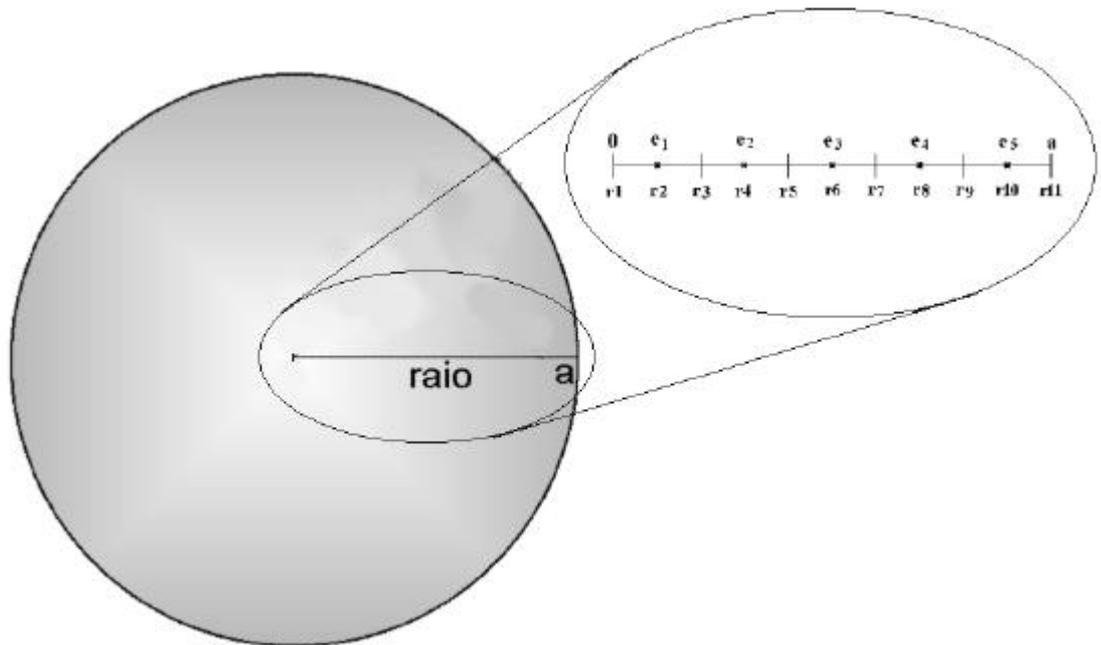
$$DH_{U1} U(a, t_{F-1}) + DH_{U2} U(a, t_F) =$$

$$\int_0^a U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) U(r, t_{F-1}) r^2 dr \quad , \quad (3.62)$$

e, para a temperatura,

$$\begin{aligned}
& C(\mathbf{z}) \mathcal{H}(\mathbf{z}, t_F) - \mathbf{a} G_{T1} q_2(a, t_{F-1}) - \mathbf{a} G_{T2} q_2(a, t_F) + \\
& \mathbf{a} H_{T1} T(a, t_{F-1}) + \mathbf{a} H_{T2} T(a, t_F) = \\
& \int_0^a T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) T(r, t_{F-1}) r^2 dr + \\
& K_1 G_{T1} q_1(a, t_{F-1}) + K_1 G_{T2} q_1(a, t_F) + K_1 H_{T1} U(a, t_{F-1}) + \\
& K_1 H_{T2} U(a, t_F) + \frac{K_1}{\mathbf{a}} \int_{t_{F-1}}^{t_F} \int_0^a U(r, t) q_3^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) r^2 dr dt . \quad (3.63)
\end{aligned}$$

As equações 3.62 e 3.63, apresentam ainda os termos  $U(r, t_{F-1})$  e  $T(r, t_{F-1})$  no domínio, que precisam ser discretizados segundo o raio e o termo  $U(r, t)$  que precisa ser discretizado segundo o raio e no tempo. Para discretizar estes termos na direção radial, utilizou-se funções de interpolação quadráticas (cf. SILVA, 1995). O número de elementos, 'e', foi escolhido igual a 5, conforme representado na Figura 3.3.



**FIGURA 3.3. REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DA DISCRETIZAÇÃO RADIAL**

Nesta figura (Figura 3.3), os pontos representados por  $r_1, r_2, r_3, \dots, r_{11}$ , são os nós no domínio, onde são calculados  $U_{(1,F-1)}, U_{(1,F)}, T_{(1,F-1)}, U_{(2,F-1)}, \dots, T_{(11,F-1)}$ , no domínio.

Para obter os valores de  $U$  e  $T$  em cada nó do domínio, utilizou-se de interpolação quadrática<sup>1</sup>, sendo adotado o método de diferenças para frente (FINLAYSON, 1980). Assim sendo, em coordenadas locais, pode-se escrever

$$U(r, t_{F-1}) = \sum_{e=1}^E [X_1^{(e)}U_{i,F-1} + X_2^{(e)}U_{i+1,F-1} + X_3^{(e)}U_{i+2,F-1}] , \quad (3.64)$$

$$T(r, t_{F-1}) = \sum_{e=1}^E [X_1^{(e)}T_{i,F-1} + X_2^{(e)}T_{i+1,F-1} + X_3^{(e)}T_{i+2,F-1}] , \quad (3.65)$$

$$U(r, t_F) = \sum_{e=1}^E [X_1^{(e)}U_{i,F} + X_2^{(e)}U_{i+1,F} + X_3^{(e)}U_{i+2,F}] , \quad (3.66)$$

onde:

$$i = 2(e - 1) + 1 ,$$

---


$${}^1 D y_n = y_{n+1} - y_n ,$$

$$D^2 y_n = D y_{n+1} - D y_n = y_{n+2} - 2y_{n+1} + y_n ,$$

$$y = y_0 + a D y_0 + \frac{a(a-1)}{2!} D^2 y_0 + \dots (\text{truncado no } 2^\circ \text{ termo}).$$

$$a = \frac{t_a - t_0}{h} \quad h = D t ,$$

$$\text{ou seja:} \quad y_a = y_0 + a(y_1 - y_0) + \frac{a(a-1)}{2!} (y_2 - 2y_1 + y_0) .$$

onde:

$y_0$  = valor da função em  $t=t_0$ ,

$y_1$  = valor da função em  $t=t_1$ ,

$y_2$  = valor da função em  $t=t_2$ ,

$y_a$  = valor da função em  $t=t_a$  (qualquer no intervalo  $t_0 = t_a = t_2$ ).

$$a = (t_a - t_0) / (t_1 - t_0).$$

$$\mathbf{D}r = \frac{a}{2E - 1} \quad ,$$

$$r_i = (i - 1)\mathbf{D}r \quad ,$$

$$U_{i,F-1} = U(r_i, t_{F-1}) \quad ,$$

$$T_{i,F-1} = T(r_i, t_{F-1}) \quad ,$$

$$U_{i,F} = U(r_i, t_F) \quad ,$$

$$X_1^{(e)}(r) = \mathbf{j}(r)^{e)} \left[ \frac{r_{i+1} \cdot r_{i+2}}{\mathbf{D}i} - \frac{(r_{i+1} + r_{i+2})}{\mathbf{D}i} r + \frac{r^2}{\mathbf{D}i} \right] \quad ,$$

$$X_2^{(e)}(r) = \mathbf{j}(r)^{e)} \left[ \frac{r_i \cdot r_{i+2}}{\mathbf{D}i + 1} - \frac{(r_i + r_{i+2})}{\mathbf{D}i + 1} r + \frac{r^2}{\mathbf{D}i + 1} \right] \quad ,$$

$$X_3^{(e)}(r) = \mathbf{j}(r)^{e)} \left[ \frac{r_i \cdot r_{i+1}}{\mathbf{D}i + 2} - \frac{(r_i + r_{i+1})}{\mathbf{D}i + 2} r + \frac{r^2}{\mathbf{D}i + 2} \right] \quad ,$$

$$\mathbf{j}(r)^{e)} = \begin{cases} 0 & \text{se } r < r_i \quad \text{ou} \quad r > r_{i+2} \quad , \\ 1 & \text{se } r_i \leq r \leq r_{i+2} \quad , \end{cases}$$

$$\mathbf{D}i = (r_{i+1} - r_i) * (r_{i+2} - r_i) \quad ,$$

$$\mathbf{D}i + 1 = (r_i - r_{i+1}) * (r_{i+2} - r_{i+1}) \quad ,$$

$$\mathbf{D}i + 2 = (r_{i+2} - r_{i+1}) * (r_{i+2} - r_i) \quad .$$

Fazendo também interpolação linear no tempo para a função  $U(r, t)$  no domínio, juntamente com interpolação quadrática no raio, a última integral que aparece na equação 3.63 fica sendo,

$$\frac{K_1}{a} \int_{t_{F-1}}^{t_F} \int_0^a U(r, t) q_3^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) r^2 dr dt =$$

$$\frac{K_1}{a} \int_{t_{F-1}}^{t_F} \int_0^a [U(r, t_{F-1}) \mathbf{f}_1(t) + U(r, t_F) \mathbf{f}_2(t)] q_3^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) r^2 dr dt ,$$

ou seja,

$$\frac{K_1}{a} \int_{t_{F-1}}^{t_F} \int_0^a \sum_{e=1}^E [X_1^{(e)} U_{i, F-1} + X_2^{(e)} U_{i+1, F-1} + X_3^{(e)} U_{i+2, F-1}] *$$

$$\mathbf{f}_1(t) q_3^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) r^2 dr dt +$$

$$\frac{K_1}{a} \int_{t_{F-1}}^{t_F} \int_0^a \sum_{e=1}^E [X_1^{(e)} U_{i, F} + X_2^{(e)} U_{i+1, F} + X_3^{(e)} U_{i+2, F}] *$$

$$\mathbf{f}_2(t) q_3^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) r^2 dr dt . \quad (3.67)$$

Substituindo, então, 3.64, 3.65 e 3.67 em 3.62 e 3.63, resulta,

$$C(\mathbf{z})U(\mathbf{z}, t_F) - DG_{U1}q_1(a, t_{F-1}) - DG_{U2}q_1(a, t_F) +$$

$$DH_{U1}U(a, t_{F-1}) + DH_{U2}U(a, t_F) =$$

$$\sum_{e=1}^E \int_0^a [X_1^{(e)}, X_2^{(e)}, X_3^{(e)}] \begin{bmatrix} U_{i,F-1} \\ U_{i+1,F-1} \\ U_{i+2,F-1} \end{bmatrix} U^*(a, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) r^2 dr, \quad (3.68)$$

para umidade, e

$$C(\mathbf{z})T(\mathbf{z}, t_F) - aG_{T1}q_2(a, t_{F-1}) - aG_{T2}q_2(a, t_F) +$$

$$aH_{T1}T(a, t_{F-1}) + aH_{T2}T(a, t_F) =$$

$$\sum_{e=1}^E \int_0^a [X_1^{(e)}, X_2^{(e)}, X_3^{(e)}] \begin{bmatrix} T_{i,F-1} \\ T_{i+1,F-1} \\ T_{i+2,F-1} \end{bmatrix} T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) r^2 dr -$$

$$K_1G_{T1}q_1(a, t_{F-1}) - K_1G_{T2}q_1(a, t_F) +$$

$$K_1H_{T1}U(a, t_{F-1}) + K_1H_{T2}U(a, t_F) +$$

$$\frac{K_1}{a} \sum_{e=1}^E \int_{t_{F-1}}^{t_F} \int_0^a [X_1^{(e)}, X_2^{(e)}, X_3^{(e)}] \begin{bmatrix} U_{i,F-1} \\ U_{i+1,F-1} \\ U_{i+2,F-1} \end{bmatrix} f_1(t) q_3^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) r^2 dr dt +$$

$$\frac{K_1}{a} \sum_{e=1}^E \int_{t_{F-1}}^{t_F} \int_0^a [X_1^{(e)}, X_2^{(e)}, X_3^{(e)}] \begin{bmatrix} U_{i,F} \\ U_{i+1,F} \\ U_{i+2,F} \end{bmatrix} f_2(t) q_3^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) r^2 dr dt, \quad (3.69)$$

para a temperatura.

Fazendo também,

$$\sum_{e=1}^E \int_0^a [X_1^{(e)}, X_2^{(e)}, X_3^{(e)}] \begin{bmatrix} U_{i,F-1} \\ U_{i+1,F-1} \\ U_{i+2,F-1} \end{bmatrix} U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) r^2 dr = B_{U_{i,F-1}} \quad ,$$

$$\sum_{e=1}^E \int_0^a [X_1^{(e)}, X_2^{(e)}, X_3^{(e)}] \begin{bmatrix} T_{i,F-1} \\ T_{i+1,F-1} \\ T_{i+2,F-1} \end{bmatrix} T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) r^2 dr = B_{T_{i,F-1}} \quad ,$$

$$\frac{k_1}{a} \sum_{e=1}^E \int_{t_{F-1}}^{t_F} \int_0^a [X_1^{(e)}, X_2^{(e)}, X_3^{(e)}] \begin{bmatrix} U_{i,F} \\ U_{i+1,F} \\ U_{i+2,F} \end{bmatrix} q_3^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \mathbf{f}_2 r^2 dr dt = A_{T_{i,F}} \quad ,$$

e

$$\frac{k_1}{a} \sum_{e=1}^E \int_{t_{F-1}}^{t_F} \int_0^a [X_1^{(e)}, X_2^{(e)}, X_3^{(e)}] \begin{bmatrix} U_{i,F-1} \\ U_{i+1,F-1} \\ U_{i+2,F-1} \end{bmatrix} q_3^*(r, \mathbf{z}, t_F, t) \mathbf{f}_1 r^2 dr dt = A_{T_{i,F-1}} \quad ,$$

e substituindo esses termos nas equações 3.68 e 3.69, tem-se

$$C(\mathbf{z})U(\mathbf{z}, t_F) - DG_{U2}q_1(a, t_F) + DH_{U2}U(a, t_F) =$$

$$DG_{U1}q_1(a, t_{F-1}) - DH_{U1}U(a, t_{F-1}) + B_{U_{i,F-1}} \quad , \quad (3.70)$$

para a equação da unidade, e,

$$\begin{aligned}
& C(\mathbf{z})T(\mathbf{z}, t_F) - \mathbf{a}G_{T1}q_2(a, t_{F-1}) - \mathbf{a}G_{T2}q_2(a, t_F) + \\
& \mathbf{a}H_{T1}T(a, t_{F-1}) + \mathbf{a}H_{T2}T(a, t_F) = B_{Ti, F-1} - \\
& K_1G_{T1}q_1(a, t_{F-1}) - K_1G_{T2}q_1(a, t_F) + K_1H_{T1}U(a, t_{F-1}) + \\
& K_1H_{T2}U(a, t_F) + A_{Ti, F-1} + A_{Ti, F} \quad , \quad (3.71)
\end{aligned}$$

para equação de temperatura.

Essas equações são as equações algébricas, obtidas das formulações integrais no contorno após a aplicação do método de colocação e fazendo as interpolações antes descritas. As incógnitas são  $U(\mathbf{z}, t_F)$  e  $T(\mathbf{z}, t_F)$ .  $G$  e  $H$  são vetores, com dimensão igual ao número de nós de discretização no domínio, ou seja, 11 nós.  $A$  e  $B$  são matrizes, que com o recurso de progredir passo a passo no tempo, não necessitam que sejam armazenadas integralmente, mas apresentam dimensões 11 X 2, para o caso de se utilizar elementos lineares no tempo ou então possuem dimensões 11 x 3, caso sejam utilizados elementos quadráticos.

### 3.5 Procedimentos para Solução da Formulação Integral.

Para solução da formulação integral, primeiro, as condições de contorno, equações 3.6 e 3.7, são inseridas nas equações 3.70 e 3.71. Em seguida, coloca-se a formulação integral no contorno. No caso, basta fazer  $\mathbf{z} = \mathbf{a} \hat{\mathbf{I}} \mathbf{G}$ , para obter após rearranjar adequadamente,

$$U(\mathbf{a}, t_F) = [DG_{U1}Q_1(\mathbf{a}, t_{F-1}) - DH_{U1}U(\mathbf{a}, T_{F-1}) + wG_{U2}U_c + B_U(\mathbf{a}, t_{F-1})] / \left( \frac{1}{2} + DH_{U2} + wG_{U2} \right) , \quad (3.72)$$

para umidade e,

$$T(\mathbf{a}, t_F) = [\mathbf{a}G_{T1}Q_2(\mathbf{a}, t_{F-1}) - \mathbf{a}H_{T1}T(\mathbf{a}, t_{F-1}) + \frac{\mathbf{a}}{k_T} H_C G_{T2} T_{ar} - \mathbf{a}L G_{T2} Q_1(\mathbf{a}, t_F) + k_1 G_{T1} Q_1(\mathbf{a}, t_{F-1}) + k_1 G_{T2} Q_1(\mathbf{a}, t_F) + k_1 H_{T1} U(\mathbf{a}, t_{F-1}) + k_1 H_{T2} U(\mathbf{a}, t_F) + B_T(\mathbf{a}, t_{F-1}) + A_T(\mathbf{a}, t_F) + A_T(\mathbf{a}, t_{F-1})] / \left( \frac{1}{2} + \mathbf{a}H_{T2} + \frac{\mathbf{a}}{k_T} H_C G_{T2} \right) , \quad (3.73)$$

para a temperatura.

Os valores de  $q_1$  e  $q_2$  são calculados por meio de,

$$q_1(a, t_F) = -\frac{w}{D} [U(a, t_F) - U_c] \quad , \quad (3.74)$$

$$q_2(a, t_F) = -\frac{h_c}{k_T} [T_{ar} - T(a, t_F)] + Lr_s D q_1(a, t_F) \quad , \quad (3.75)$$

onde:  $w$  = coeficiente de convecção de umidade [m/s],

$U_c$  = teor de umidade de equilíbrio na temperatura ambiente,

$k_T$  = condutividade térmica da partícula,

$T_{ar}$  = temperatura ambiente,

$L$  = calor latente de evaporação de umidade.

Uma vez calculado os valores de  $U$  e  $T$  no contorno, pode-se calcular os valores  $U$  e  $T$  no domínio. As equações para isto, são obtidas substituindo-se os valores das variáveis  $U(a, t_F)$ ,  $q_1(a, t_F)$ ,  $T(a, t_F)$  e  $q_2(a, t_F)$ , definidas no contorno e obtidas a partir das equações 3.72 a 3.75, nas equações 3.70 e 3.71, sabendo-se que nessas equações  $C(\mathbf{z}) = 1$ , resultando:

$$\begin{aligned}
U(\mathbf{z}, t_F) &= DG_{U1}(\mathbf{z})\mathcal{Q}_1(\mathbf{a}, t_{F-1}) + DG_{U2}(\mathbf{z})\mathcal{Q}_1(\mathbf{a}, t_F) - \\
&DH_{U1}(\mathbf{z})\mathcal{U}(\mathbf{a}, t_{F-1}) - DH_{U2}(\mathbf{z})\mathcal{U}(\mathbf{a}, t_F) + B_{U_i, F-1}(\mathbf{z}) \quad .
\end{aligned} \tag{3.76}$$

e

$$\begin{aligned}
T(\mathbf{z}, t_F) &= \mathbf{a}G_{T1}(\mathbf{z})\mathcal{Q}_2(\mathbf{a}, t_{F-1}) + \mathbf{a}G_{T2}(\mathbf{z})\mathcal{Q}_2(\mathbf{a}, t_F) - \\
&\mathbf{a}H_{T1}(\mathbf{z})\mathcal{I}(\mathbf{a}, t_{F-1}) - \mathbf{a}H_{T2}(\mathbf{z})\mathcal{I}(\mathbf{a}, t_F) + k_1G_{T1}(\mathbf{z})\mathcal{Q}_1(\mathbf{a}, t_{F-1}) + \\
&k_1G_{T2}(\mathbf{z})\mathcal{Q}_1(\mathbf{a}, t_F) + k_1H_{T1}(\mathbf{z})\mathcal{U}(\mathbf{a}, t_{F-1}) + k_1H_{T2}(\mathbf{z})\mathcal{U}(\mathbf{a}, t_F) + \\
&B_{T_i, F-1}(\mathbf{z}) + A_{T_i, F}(\mathbf{z}) + A_{T_i, F-1}(\mathbf{z}) \quad ,
\end{aligned} \tag{3.77}$$

Nessas equações, as integrais para determinação dos vetores coeficientes  $G_{U1}$ ,  $G_{U2}$ ,  $G_{T1}$ ,  $G_{T2}$ ,  $H_{U1}$ ,  $H_{U2}$ ,  $H_{T1}$ ,  $H_{T2}$ , e das matrizes coeficientes  $A_{T_i, F}$ ,  $A_{T_i, F-1}$ ,  $B_{U_i, F-1}$  e  $B_{T_i, F-1}$ , nos pontos de singularidades, ou seja, para  $\mathbf{z} = \mathbf{a}$  e  $t = t_F$ , e também para  $\mathbf{z} = 0$ , serão calculadas numericamente usando fórmulas Gaussianas de quadratura numérica de dez pontos de colocação. Já, nos demais pontos, onde não há singularidades, essas integrais podem ser obtidas por métodos analíticos. A determinação dos termos de acoplamento, representados por  $A_{T_i, F}$  e  $A_{T_i, F-1}$ , já que dependem de valores de umidade, e como o passo  $h_u$  para prosseguir no tempo, no cálculo de umidade, é diferente

do passo  $h_t$ , para o cálculo de temperatura, necessitou-se de interpolação para adaptar os valores de  $U(\mathbf{z}, t)$  obtidos do passo  $h_u$  para o passo  $h_t$  e então determinar o perfil de temperatura  $T(\mathbf{z}, t)$ . Esta interpolação inicialmente foi feita por técnicas lineares mas depois optou-se por interpolação quadrática por apresentar melhores resultados, como um perfil de temperatura com inclinação mais suave.

Para determinação dos coeficientes  $G$  e  $H$ , procede-se como se segue:

$$G_{U1} = a^2 \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) U^*(a, \mathbf{z}, t_F, \mathbf{t}) dt =$$

$$a^2 \int_{t_{F-1}}^{t_F} \frac{t_F - t}{h} \frac{1}{2az(\mathbf{p}kt)^{0.5}} \left[ \exp \frac{-(a - \mathbf{z})^2}{4kt} - \exp \frac{-(a + \mathbf{z})^2}{4kt} \right] dt \quad , \quad (3.78)$$

onde:  $\mathbf{f}_1(t) = \frac{\mathbf{t}}{h}$  ,

$$\mathbf{t} = t_F - t \quad \rightarrow \quad d\mathbf{t} = -dt \quad ,$$

como, para  $t = t_{F-1} \quad \rightarrow \quad \mathbf{t} = h$  e para

$$t = t_F \quad \rightarrow \quad \mathbf{t} = 0 \quad .$$

Dai, adequando-se os limites de integração, tem-se:

$$\int_{t_{F-1}}^{t_F} f(t)dt = \int_0^h f(t)dt \quad ,$$

ou seja,

$$G_{U1} = \frac{a^2}{h} \int_0^h \frac{t}{2az(\mathbf{p}kt)^{0.5}} \cdot \left[ \exp \frac{-(a-z)^2}{4kt} - \exp \frac{-(a+z)^2}{4kt} \right] dt \quad . \quad (3.79)$$

Da mesma forma,

$$f_2(t) = \frac{t - t_{F-1}}{h} = 1 - \frac{t}{h} \quad .$$

Então, podemos obter  $G_{U2}$ ;

$$G_{U2} = a^2 \int_0^h \frac{1}{2az(\mathbf{p}kt)^{0.5}} \cdot \left[ \exp \frac{-(a-z)^2}{4kt} - \exp \frac{-(a+z)^2}{4kt} \right] dt - G_{U1} \quad . \quad (3.80)$$

Da mesma forma, obtém-se os demais coeficientes:

$$H_{U1} = \frac{a^2}{h} \int_0^h t \frac{\int U^*(a, \mathbf{z}, t_F, \mathbf{t})}{\int r} dt \quad , \quad (3.81)$$

$$H_{U2} = a^2 \int_0^h \frac{\int U^*(a, \mathbf{z}, t_F, \mathbf{t})}{\int r} dt - H_{U1} \quad , \quad (3.82)$$

$$G_{T1} = \frac{a^2}{h} \int_0^h t T^*(a, \mathbf{z}, t_F, \mathbf{t}) dt \quad , \quad (3.83)$$

$$G_{T2} = a^2 \int_0^h \frac{\int T^*(a, \mathbf{z}, t_F, \mathbf{t})}{\int r} dt - G_{T1} \quad , \quad (3.84)$$

$$H_{T1} = \frac{a^2}{h} \int_0^h t \frac{\int T^*(a, \mathbf{z}, t_F, \mathbf{t})}{\int r} dt \quad , \quad (3.85)$$

$$H_{T2} = a^2 \int_0^h \frac{\int T^*(a, \mathbf{z}, t_F, \mathbf{t})}{\int r} dt - H_{T1} \quad , \quad (3.86)$$

$$B_{U,F-1} = \sum_{e=1}^E \int_0^a \begin{bmatrix} X_1^{(e)} & X_2^{(e)} & X_3^{(e)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{i,F-1} \\ U_{i+1,F-1} \\ U_{i+2,F-1} \end{bmatrix} U^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) r^2 dr \quad , \quad (3.87)$$

$$B_{T,F-1} = \sum_{e=1}^E \int_0^a \begin{bmatrix} X_1^{(e)} & X_2^{(e)} & X_3^{(e)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{i,F-1} \\ T_{i+1,F-1} \\ T_{i+2,F-1} \end{bmatrix} T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) r^2 dr \quad , \quad (3.88)$$

$$A_{T,F-1} = \frac{k_1}{a} \sum_{e=1}^E \int_0^h \int_0^a \begin{bmatrix} X_1^{(e)} & X_2^{(e)} & X_3^{(e)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{i,F-1} \\ U_{i+1,F-1} \\ U_{i+2,F-1} \end{bmatrix} \frac{\int T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1})}{\int t} \frac{t}{h} r^2 dr dt \quad , \quad (3.89)$$

$$A_{T,F} = \frac{k_1}{a} \sum_{e=1}^E \int_0^h \int_0^a \begin{bmatrix} X_1^{(e)} & X_2^{(e)} & X_3^{(e)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{i,F} \\ U_{i+1,F} \\ U_{i+2,F} \end{bmatrix} \frac{\mathcal{I} T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1})}{\mathcal{I} t} \left(1 - \frac{t}{h}\right) r^2 dr dt \quad . \quad (3.90)$$

Uma vez calculados estes coeficientes, forma-se um sistema de equações que tem como forma geral,

$$U(\mathbf{z}) = G_U \cdot q_{1',F-1} + G_U \cdot q_{1',F} - H_U \cdot U_{F-1} - H_U \cdot U_F + B_U$$

e

$$T(\mathbf{z}) = G_T \cdot q_{2',F-1} + G_T \cdot q_{2',F} - H_T \cdot T_{F-1} - H_T \cdot T_F + G_T \cdot q_{1',F-1} + G_T \cdot q_{1',F} + H_T \cdot U_{F-1} + H_T \cdot U_F + B_T + A_T + A_{T,F-1}$$

onde:  $G_U$ ,  $H_U$ ,  $G_T$ ,  $H_T$  - são vetores a serem determinados em cada nó do domínio,

$U_F$ ,  $U_{F-1}$ ,  $q_1$  - são os valores de umidade e fluxo de umidade, nos instantes anteriores ( $F-1$ ), e atuais ( $F$ ), determinados no contorno,

$T_F$ ,  $T_{F-1}$ ,  $q_2$  - são os valores de temperatura e fluxo de temperatura, nos instantes anteriores ( $F-1$ ), e atuais ( $F$ ), determinados no contorno,

$B_U, B_T, A_{T,F-1}$  - são matrizes determinadas no domínio referentes ao instante anterior,

$A_T$  - é uma matriz definida no domínio e determinada no instante atual.

### 3.6 Propriedades Geométricas e Físicas do Soja

Os parâmetros que, em geral, entram nos modelos de transferência simultânea de calor e massa presentes em processos de secagem de materiais biológicos, dependem da temperatura, umidade e tempo. A falta de informações experimentais sobre as propriedades de materiais biológicos obriga muitas vezes a se adotar valores aproximados dessas propriedades nas simulações numéricas.

HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988), mencionando esta falta de informações experimentais, usaram parâmetros constantes para simular numericamente o comportamento da secagem de um grão de soja. Algumas dessas propriedades, disponíveis no citado estudo são as seguintes: Raio médio [ $a$ ] =  $3,5 \times 10^{-3} \text{m}$ , Coeficiente de difusão mássica [ $D$ ] =  $7,0 \times 10^{-11} \text{m}^2/\text{s}$ ,

Condutividade térmica  $[k_T] = 0,1\text{W/m}^\circ\text{C}$ , Calor específico da partícula  $[C_p] = 2000\text{J/kg}^\circ\text{C}$ , Densidade do sólido seco  $[r_s] = 1200\text{kg/m}^3$ , Coeficiente de convecção de calor  $[h_c] = 60\text{W/m}^2^\circ\text{C}$ , Coeficiente de convecção de massa  $[h_m] = 0,05\text{m/s}$ , Umidade de equilíbrio à temperatura ambiente  $[U_c] = 0,11\text{kg água/kg sólido seco}$ , Temperatura ambiente  $[T_{ar}] = 35^\circ\text{C}$ .

RAMSTAD e GEDDES, (1942), propuseram para armazenagem segura de soja o valor  $U_c = 0,11\text{ kg água/kg sólido seco}$  (base seca B.S.). Uma faixa inicial de  $U_0 = 0,33$  a  $0,35\text{kg}$  água/kg sólido seco (B.S.), também foi considerada para uma temperatura média de colheita do grão de  $15^\circ\text{C}$ . Devido à falta de informações, foi adotado o valor 1,0 para fator de tortuosidade ( $e$ ) e calor latente de vaporização da água ( $L$ ) igual a  $585\text{kcal/kg}$ , para representar o calor latente de vaporização de umidade. As curvas de secagem, assim obtidas, também se aproximaram das curvas experimentais.

### 3.7 Solução do Modelo sem Acoplamento.

A partir dos modelos propostos para o problema da difusão, equações 3.3 e 3.4, considerando agora o fenômeno sem acoplamento, isto é, desprezando o efeito do termo de transferência de massa na equação da difusão térmica e também desconsiderando a influência do termo convectivo na equação da condição de contorno, equação 3.6, foi buscada uma solução alternativa para o problema da difusão (cf. APÊNDICE B e APÊNDICE C), cujos resultados serão comparados com os resultados obtidos do cálculo acoplado.

A equação de difusão de umidade é,

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 U \quad , \quad (3.3)$$

as condições inicial e de contorno são,

$$CI: U(r,0) = U_0 \quad ,$$

$$CC1: \frac{\partial U(a,t)}{\partial r} = -w(U(a,t) - U_c) \quad (\text{raio externo do grão}),$$

$$\text{CC2: } \frac{\partial U}{\partial n} = 0 \quad (\text{centro do gr\~{a}o}).$$

e a solu\~{c}o\~{e} proposta encontrada (cf. AP\^E\N\D\I\C\I\E B) \^e:

$$U(r, t) = U_c + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \frac{\text{sen } l_n r}{l_n r} e^{-Dl_n^2 t} \quad , \quad (3.91)$$

onde:

$$A_n = \frac{4l_n [U_0 - U_c]}{2l_n a - \text{sen } 2l_n a} \left[ \frac{1}{l_n} \text{sen } l_n a - a \cos l_n a \right] \quad , \quad (3.92)$$

e,

$l_n$ , s\~{a}o autovalores determinados a partir da equa\~{c}o\~{e}o transcendental,

$$\frac{\text{tg } l_n a}{l_n a} = \frac{1}{(1 - ha)} \quad , \quad \text{para } n = \text{\'i}m\text{p}a\text{r}, \quad h = w/D, \quad (3.93)$$

calculado pelo m\^e\text{t}odo de Newton Raphson (cf. PACITTI e ATKINSON, 1975).

Para equação de transferência de calor sem acoplamento e considerando condição de contorno sem o termo convectivo na condição de contorno (cf. APÊNDICE C), a equação é,

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \mathbf{a} \cdot \nabla^2 T \quad , \quad (\text{C.1})$$

as condições inicial e de contorno são,

$$\text{CI.:} \quad r = a, t = 0 \quad \textcircled{*} \quad T = T_0 \quad , \quad (\text{C.2})$$

$$\text{CC1:} \quad r = a \text{ (raio externo do grão)}, t > 0,$$

$$\textcircled{*} \quad -k_T \cdot \frac{\partial T}{\partial n} + h_c [T_\infty - T(a)] = 0 \quad . \quad (\text{C.3})$$

$$\text{CC2:} \quad r = 0 \text{ (centro do grão)}, t > 0 \quad ,$$

$$\textcircled{*} \quad \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \quad .$$

sua formulação integral é,

$$\begin{aligned} C(\mathbf{z}) T(\mathbf{z}, t_F) - \mathbf{a} G_{T1} Q_2(a, t_{F-1}) - \mathbf{a} G_{T2} Q_2(a, t_F) + \\ \mathbf{a} H_{T1} T(a, t_{F-1}) + \mathbf{a} H_{T2} T(a, t_F) = B_{Ti, F-1} \quad . \end{aligned} \quad (\text{3.94})$$

A temperatura no contorno, no instante  $t_F$ , é determinada (cf. APÊNDICE C) através da equação:

$$T(a, t_F) = [\mathbf{a} G_{T1} q_2(a, t_{F-1}) - \mathbf{a} H_{T1} T(a, t_{F-1}) + \frac{\mathbf{a}}{k_T} H_C G_{T2} T_{ar} + B_T(a, t_{F-1})] / \left( \frac{1}{2} + \mathbf{a} H_{T2} + \frac{\mathbf{a}}{k_T} H_C G_{T2} \right) , \quad (C.6)$$

onde os valores de  $q_2$  são obtidos por meio de,

$$q_2(a, t_F) = - \frac{h_C}{k_T} [T_{ar} - T(a, t_F)] . \quad (C.7)$$

Os valores de  $T(\mathbf{z}, t_F)$ , no domínio, são determinados por:

$$T(\mathbf{z}, t_F) = \mathbf{a} G_{T1}(\mathbf{z}) q_2(a, t_{F-1}) + \mathbf{a} G_{T2}(\mathbf{z}) q_2(a, t_F) - \mathbf{a} H_{T1}(\mathbf{z}) T(a, t_{F-1}) - \mathbf{a} H_{T2}(\mathbf{z}) T(a, t_F) + B_T(\mathbf{z}, t_{F-1}) , \quad (C.8)$$

a partir das variáveis  $T(a, t_F)$  e  $q_2(a, t_F)$ , definidas no contorno e  $B_T(\mathbf{z}, t_{F-1})$  definida no domínio, mas determinadas no instante anterior.

### 3.8 Procedimentos de Simulação Numérica.

Uma vez obtidas as equações da difusão na forma integral no contorno, equações 3.72 e 3.73, assim como as equações no domínio, 3.76 e 3.77, utilizou-se subrotinas em linguagem FORTRAN para sua implementação computacional. Nessas equações, a determinação dos vetores e matrizes coeficientes  $G_U$ ,  $G_T$ ,  $H_U$ ,  $H_T$ ,  $B_U$ ,  $B_T$ ,  $A_{ti}$  e  $A_{TFi}$  envolve o cálculo de integrais e diferenciais sendo para isto usado os programas MAPLE e DERIVE. A vantagem de se utilizar o MAPLE está na possibilidade de se transferir diretamente as expressões algébricas ali obtidas, para o FORTRAN reduzindo a possibilidade de erros de digitação.

No programa FORTRAN estas equações eram resolvidas por meio de subrotinas utilizando o método da colocação. Os resultados obtidos no programa FORTRAN, em forma de tabelas, foram transferidos diretamente para o programa EXCEL em forma de planilhas, minimizando o trabalho e diminuindo também os erros de digitação.

Os pontos reconstituídos manualmente dos gráficos da literatura, também foram digitados nas planilhas do

programa EXCEL. Na resolução analítica do problema, sem os termos de acoplamento, foi utilizada também uma subrotina em linguagem FORTRAN sendo os resultados transferidos para uma planilha do programa EXCEL.

Em EXCEL foram traçados os gráficos comparativos dos resultados da simulação com os resultados analíticos e da literatura, sendo os mesmos inseridos diretamente no programa WORD, e apresentados como resultados finais.

No problema da difusão mássica, foram feitas comparações entre os resultados obtidos pelo métodos analítico, equações B.10 e B.11 (APÊNDICE B), e resultados numéricos obtidos pelas equações 3.70, 3.74 e 3.76, com objetivo de se avaliar o método e as equações utilizadas, obtendo resultados coincidentes para valores de passo de tempo -  $h_u$  - entre 0,1 e 4,0 horas. Valores de passo maiores que 4,0 horas não eram interessantes, pois os resultados se aproximavam do equilíbrio muito rapidamente e não era possível observar com detalhes o comportamento da secagem no início do processo. Valores de passo  $h_u$  inferiores a 0,1 h apresentavam ligeiras oscilações de umidade no método numérico. Estas oscilações também foram encontradas nos trabalhos de SILVA, (1995). Um valor dentro desta faixa, entre 0,1 h e 4,0 h, que se mostrou satisfatório para o passo de umidade, sendo então

adotado para a simulação foi  $h_u = 1,0 h$  sendo este o passo adotado para o cálculo do perfil de umidade dentro do grão de soja.

Devido à diferença entre as ordens de grandeza dos valores de difusividade mássica ( $D$ ) e difusividade térmica ( $\mathbf{a}$ ), do grão de soja, o passo de temperatura utilizado para o problema da difusão térmica foi muito inferior ao utilizado para a simulação de umidade, ou seja,  $h_t = 0,0007 h$ , para o cálculo de temperatura sem acoplamento de umidade, equação 3.97.

Para o problema de difusão térmica com acoplamento de umidade, equações 3.73, 3.75 e 3.77, o passo usado para progredir no tempo foi  $h_t = 0,007 h$  (com passo de umidade de acoplamento  $h_u = 1,0 h$ ). Tentou-se utilizar também para o passo de umidade valores inferiores a  $h_u = 1,0 h$ , por exemplo  $h_u = 0,1 h$  até para valores  $h_u = h_t$ , porém os resultados não foram satisfatórios devido às oscilações dos resultados numéricos de umidade e temperatura obtidos, devido a oscilações do próprio método. Essas oscilações eram observadas sempre que o tempo, no cálculo do perfil de temperatura, se aproximava do passo de umidade ou de valores múltiplos deste. Devido a estas oscilações de umidade pelo método numérico e

tendo já sido testadas as equações analíticas, com resultados satisfatórios, optou-se então por se utilizar os resultados analíticos de umidade para obtenção do perfil de temperatura. Isto resolveu o problema de instabilidade no cálculo do perfil de umidade mas não resolveu a instabilidade no cálculo do perfil de temperatura.

Em vista desses problemas de instabilidade numérica surgidos, os valores de umidade antes obtidos com passo  $h_u = 1,0 h$ , foram recalculados com  $h_u = 0,1$ . Por sua vez, os valores intermediários de  $U(a, t_F)$  e  $q_1(a, t_F)$  para ser utilizado no cálculo do perfil de temperatura, usando passo de  $h_t = 0,007 h$ , antes obtidos por meio de interpolações lineares no tempo (Silva, 1995), foram recalculados usando-se interpolações quadráticas no tempo, tendo-se obtido melhores resultados. Foram, também, experimentados outros valores de passo de umidade ( $h_u = 0,01, 0,1, 0,5$  e  $1,0$ ), e de temperatura ( $h_t = 0,001, 0,005, 0,006, 0,009, 0,01$  e  $0,05$ ), mas em alguns casos ( $h_t < 0,06 h$  e  $h_u < 0,01 h$ ), os valores do perfil de temperatura, não convergiam para os valores esperados, e valores maiores do que  $h_t = 0,01 h$ , não permitiam acompanhar o perfil de temperatura da secagem, atingindo o equilíbrio muito rapidamente. Isto constata que a escolha do passo de integração no tempo é fundamental no processo de simulação, para obtenção de bons resultados como SILVA, (1995) já tivera

oportunidade de analisar. O valor de passo de unidade que se mostrou mais aceitável para o processo de simulação com acoplamento foi  $h_u = 0,01 h$ , chegando-se a uma temperatura próxima de  $35^{\circ}\text{C}$  na situação de equilíbrio (tempo infinito), que é o valor esperado.

## CAPÍTULO IV

### RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados, em forma de gráficos, os resultados obtidos da simulação do problema da difusão de calor e massa simultâneos, com acoplamento na equação de energia e na condição de contorno, aplicados à secagem de grãos de soja, utilizando a técnica de Elementos de Contorno. Seguem também os resultados analíticos, aplicados ao mesmo fenômeno porém sem o termo de acoplamento e os resultados obtidos da literatura, que serão utilizados para comparações com os resultados numéricos.

Primeiramente, foi efetuado o cálculo do perfil de umidade utilizando passo  $h_u = 1,0 h$ . Para o caso da simulação de temperatura sem acoplamento de umidade, o passo utilizado foi  $h_t = 0,007 h$ , mas, para este caso, o sistema atinge o equilíbrio muito rapidamente, sendo então testado um passo menor. O passo que se mostrou mais adequado para esta simulação foi  $h_t = 0,0007 h$ .

Os resultados de umidade e de temperatura, tirados do trabalho de HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988), foram obtidos reconstituindo-se os pontos de um gráfico e transferindo-os para o programa EXCEL. Portanto, pode ter havido algum erro de precisão na obtenção destes dados, que são os disponíveis na literatura.

A figura 4.1 a seguir apresenta os resultados numéricos de umidade obtidos a partir da formulação no contorno e resultados analíticos. Os resultados numéricos, sem acoplamento, foram obtidos a partir das equações 3.72 - umidade no contorno e 3.76 - umidade no domínio; o passo adotado foi  $h_u = 1,0 h$ . Os resultados analíticos comparativos foram obtidos pela equação 3.91.

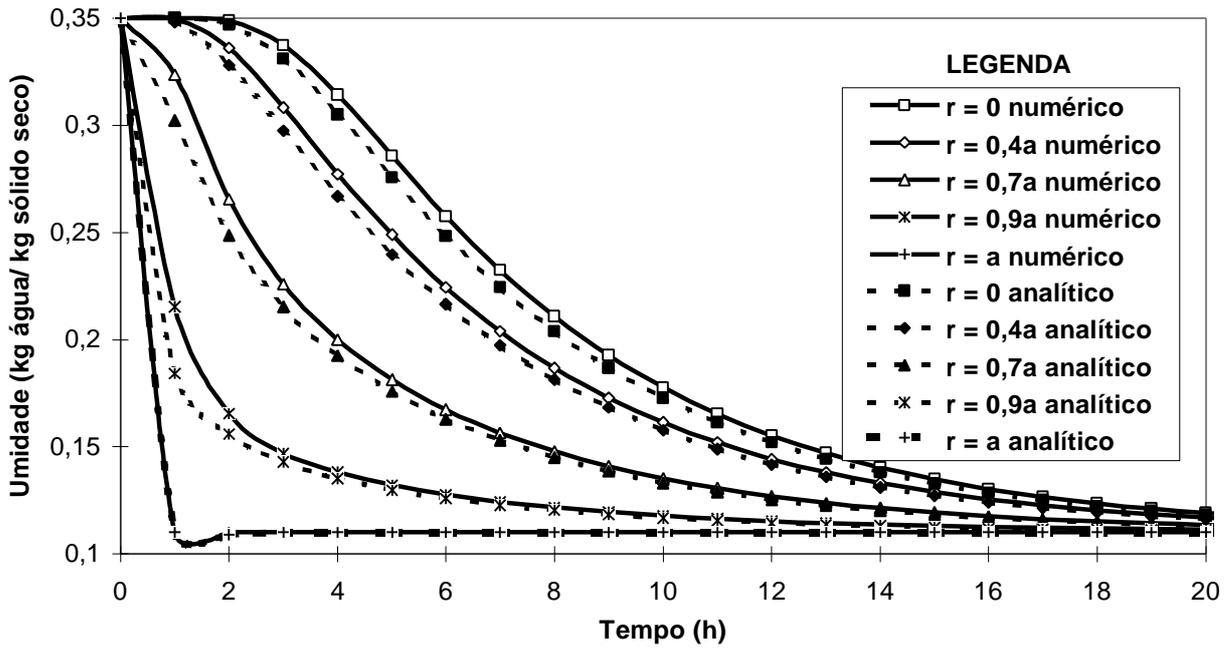


FIG. 4.1 RESULTADOS DE UMIDADE OBTIDOS PELO MÉTODO DE ELEMENTOS DE CONTOURNO E PELO MÉTODO ANALÍTICO OBTIDO PELA EQUAÇÃO 3.91.

A Figura 4.2 apresenta a mesma informação anterior, numa escala mais adequada, mostrando apenas o período de tempo que é importante para o cálculo de temperatura, ou seja, antes do grão atingir o equilíbrio térmico, utilizando passo de tempo de  $h_u = 0,2 h$ .

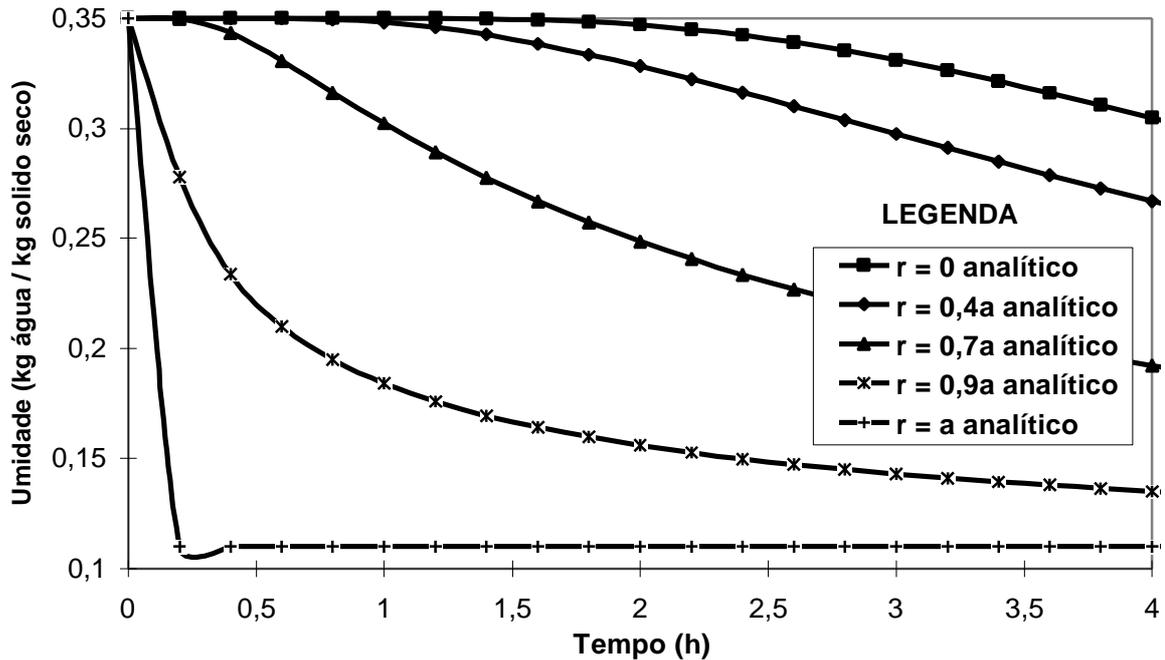


FIG. 4.2 RESULTADOS DE UMIDADE MOSTRANDO AS PRIMEIRAS 4 HORAS DE SIMULAÇÃO, UTILIZANDO PASSO  $h_u = 0,2$  h.

Os resultados de umidade apresentados na figura 4.1 indicam a aproximação do equilíbrio após 25 horas de simulação tanto pelo método analítico quanto pelo numérico. Nos raios  $r = a$  e  $r = 0,9*a$ , há um gradiente muito acentuado nas primeiras horas de secagem, se compararmos com o gradiente no raio  $r = 0$ . Para a umidade, as análises sem acoplamento e com acoplamento apresentam mesmo resultado devido ao grão atingir o equilíbrio térmico muito rapidamente. Foi observado também, nas Figuras 4.1 e 4.2, que em  $r = a$ , ou seja, no raio externo do grão, a umidade atinge o equilíbrio quase que imediatamente após o início da simulação. Isto também foi observado nos

resultados de HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988), conforme pode ser visto na Figura 4.8.

As Figuras 4.3 a 4.6 apresentam os resultados numéricos de temperatura com acoplamento de umidade e sem acoplamento de umidade. Os resultados com acoplamento foram obtidos a partir das equações 3.73 - valores no contorno e equações 3.77 - valores no domínio, utilizando passo de integração no tempo  $h_u = 0,01 h$  e  $h_t = 0,007 h$ , em ambas as equações. Os resultados obtidos do processo sem acoplamento de umidade foram obtidos a partir das equações C.6 - valores no contorno, e C.8 - valores no domínio, utilizando passo de integração no tempo  $h_t = 0,0007 h$ .

Devido ao fato do grão de soja apresentar um coeficiente de difusão mássica muito menor do que o coeficiente térmico, o equilíbrio térmico é atingido muito mais rapidamente do que o equilíbrio de massa. Isso obrigou que fossem adotados passos diferentes para evoluir no tempo quando da simulação do processo de secagem. Observando as abcissas dos gráficos mostrados nas figuras 4.1 a 4.7, isto pode ser constatado.

A Figura 4.3 apresenta o perfil de temperatura para o ponto do raio  $r = 0$ , correspondente a  $r1$  na figura esquemática (cf. Figura 3.3), este ponto representa o centro do grão de soja.

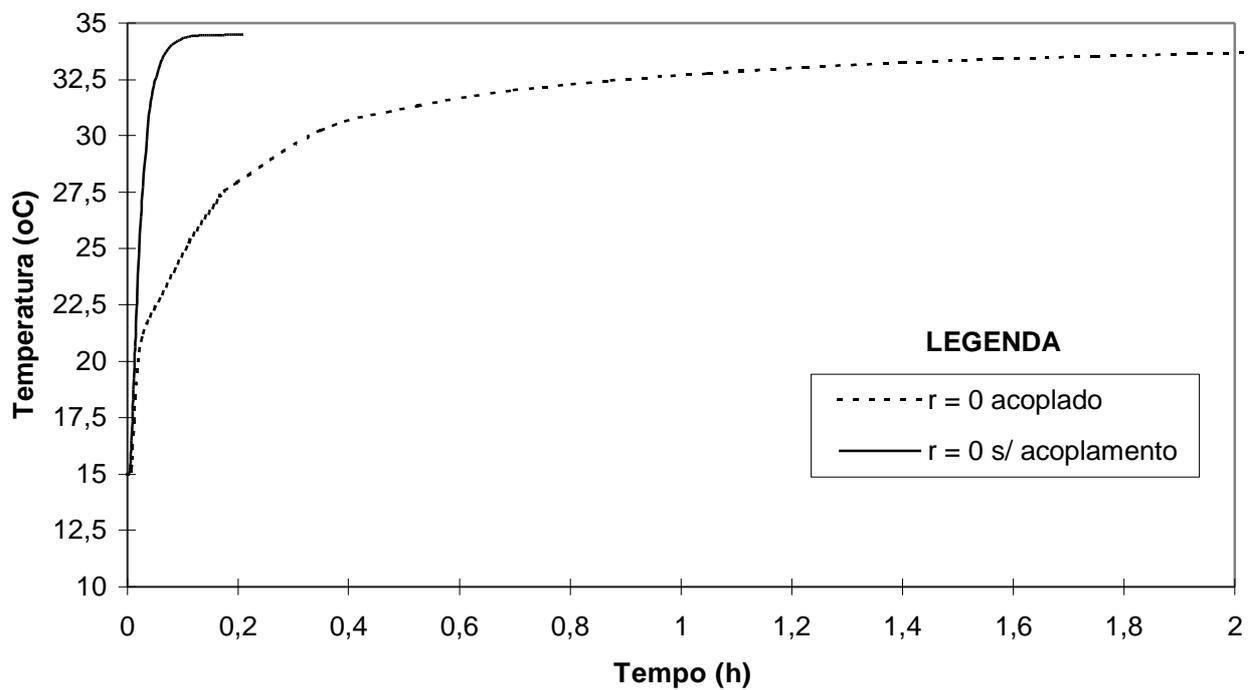
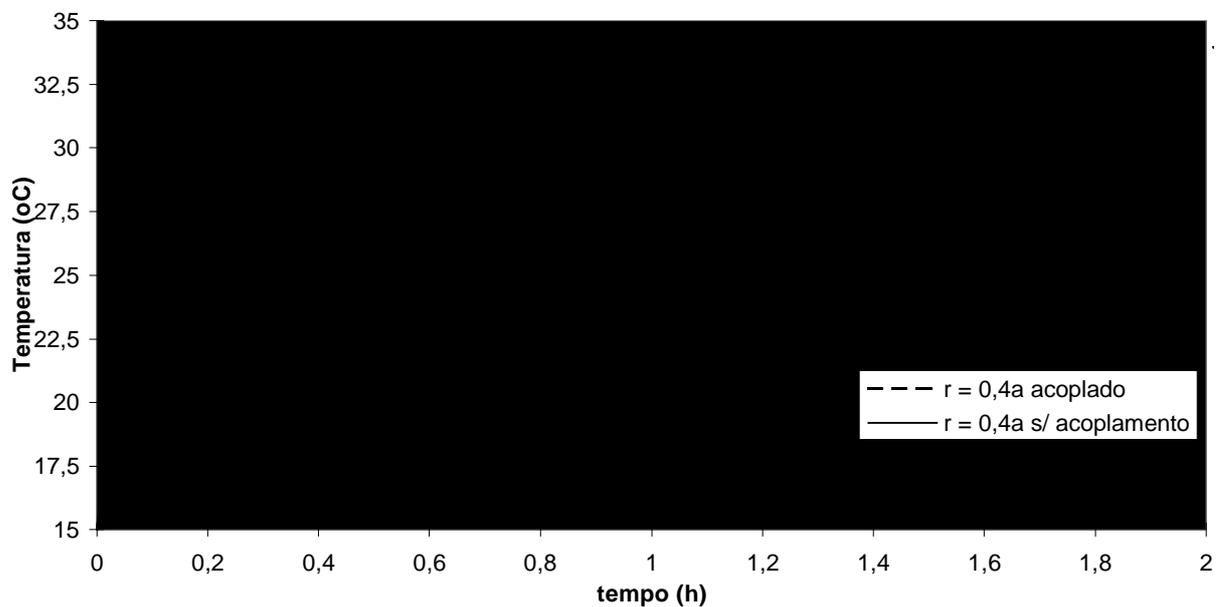


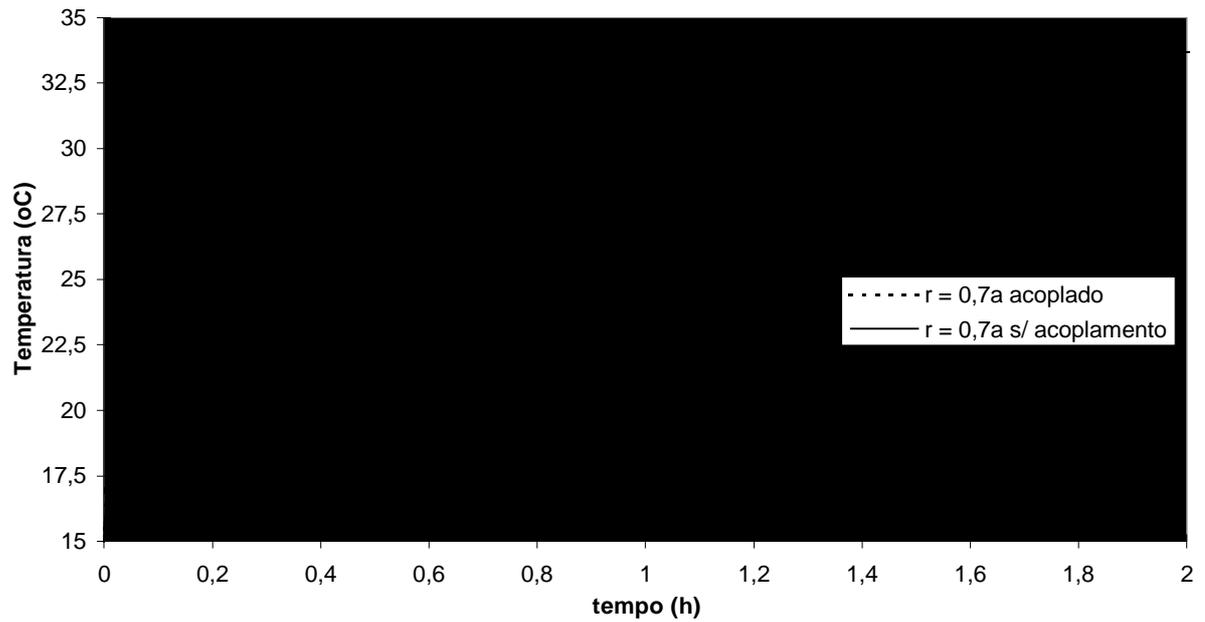
FIG. 4.3 RESULTADOS NUMÉRICOS DE TEMPERATURA COM ACOPLAMENTO E SEM ACOPLAMENTO DE UMIDADE PARA O PONTO DO RAIOS  $r = 0$ .

A Figura 4.4 apresenta o perfil de temperatura para o raio  $r = 0,4*a$ . Este corresponde ao ponto  $r_5$  na figura esquemática (cf. Figura 3.3).



**FIG. 4.4 RESULTADOS NUMÉRICOS DE TEMPERATURA COM ACOPLAMENTO E SEM ACOPLAMENTO DE UMIDADE PARA O RAIOS  $r = 0,4*a$ .**

A Figura 4.5 apresenta o perfil de temperatura para o raio  $r = 0,7*a$ . Este corresponde ao ponto  $r_8$  na figura esquemática (cf. Figura 3.3).



**FIG. 4.5 RESULTADOS NUMÉRICOS DE TEMPERATURA COM ACOPLAMENTO E SEM ACOPLAMENTO DE UMIDADE PARA O RAIOS  $r = 0,7*a$ .**

A Figura 4.6 apresenta o perfil de temperatura para o raio  $r = 0,9*a$ . Este corresponde ao ponto  $r10$  na figura esquemática (cf. Figura 3.3).

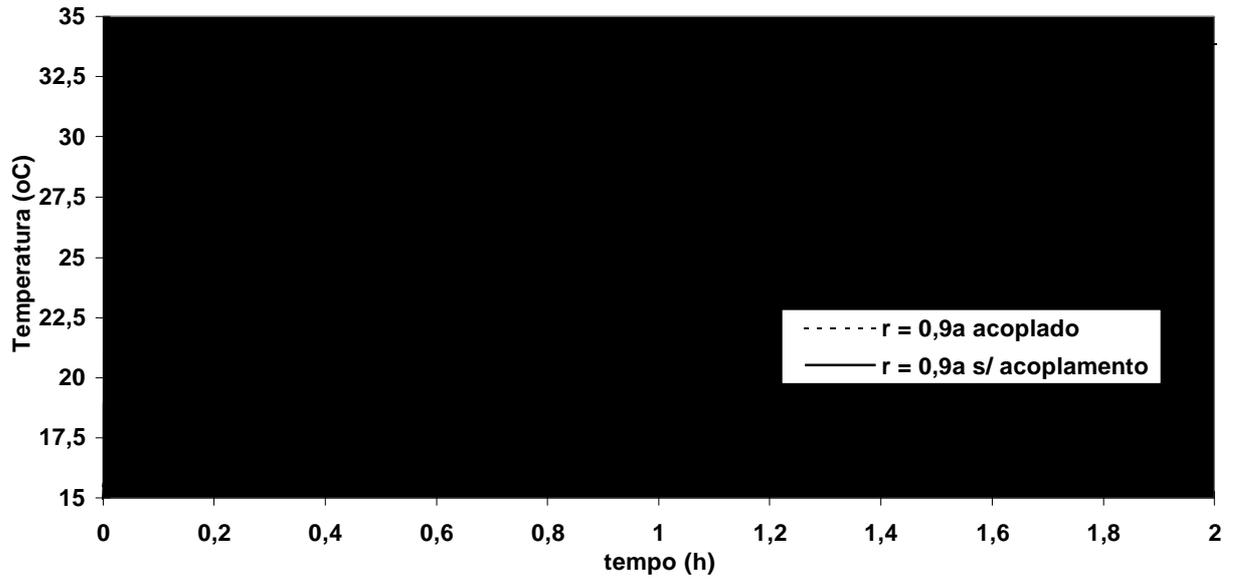


FIG. 4.6 RESULTADOS NUMÉRICOS DE TEMPERATURA COM ACOPLAMENTO E SEM ACOPLAMENTO DE UMIDADE PARA O RAIIO  $r = 0,9*a$ .

A Figura 4.7, apresenta os mesmos resultados das Figuras 4.3 - 4.6, inseridos em um mesmo gráfico, mostrando a variação de temperatura no sentido radial com o tempo.

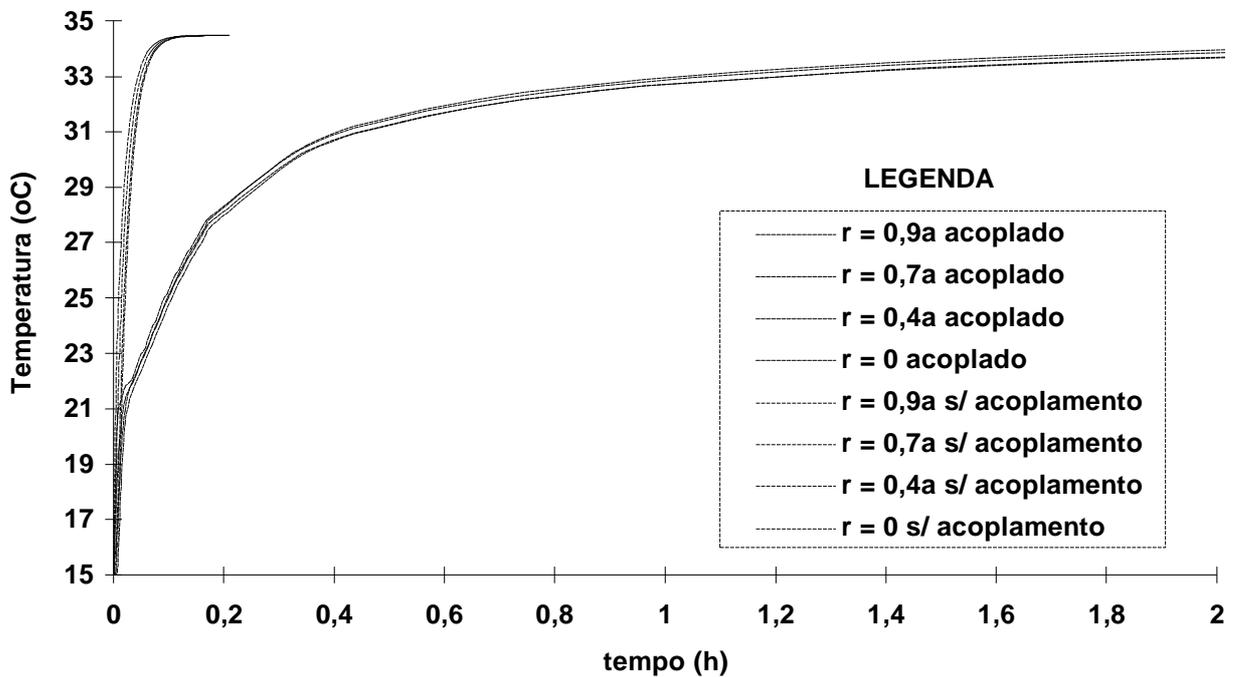


FIG. 4.7 VARIAÇÃO DE TEMPERATURA DO GRÃO DE SOJA COM O TEMPO, MOSTRANDO CADA PONTO RADIAL, NOS PROCESSOS COM ACOPLAMENTO E SEM ACOPLAMENTO DE UMIDADE.

Os resultados numéricos de temperatura para a secagem sem acoplamento de umidade, conforme podem ser vistos nas Figuras 4.3 a 4.6, indicam a situação de equilíbrio em um tempo próximo de 0,1 hora, muito antes do ponto de equilíbrio indicado pelos resultados com acoplamento. Isto era esperado, pois na equação do fenômeno acoplado (Equação 3.4) e na condição de contorno (Equação 3.6) existe um termo que corresponde a parcela de energia que é retirada do grão junto com a água evaporada e que não aparece na equação sem

acoplamento e condição de contorno correspondente (Equações C.1 e C.3, respectivamente). Portanto a energia efetiva entrando no grão, representada pelo aumento de temperatura, tende a ser menor no processo com acoplamento do que no processo sem acoplamento. Como os resultados da simulação do fenômeno acoplado se aproximam mais dos resultados da literatura, (cf. Figura 4.9) conclui-se que esse modelo é mais adequado para representar o fenômeno.

Conforme se observa, os resultados de temperatura (cf. Figuras 4.3 a 4.7), não mostram nitidamente um ponto de equilíbrio que represente o final de simulação, nas curvas do processo com acoplamento de umidade, mesmo após decorrido um tempo relativamente grande, considerando as dimensões do grão. O que se observa neste caso é que, próximo à 2,0 horas de simulação, o gradiente de temperatura é pequeno, menor que  $1,0^{\circ}\text{C/h}$  e portanto, pode se considerar que o grão já atingiu o equilíbrio térmico.

Na figura 4.8 estão apresentados os resultados de umidade obtidos pelo modelo proposto neste trabalho, utilizando método numérico com passo  $h_u = 1,0 h$ , e os resultados de simulação numérica de umidade obtidos por HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988), utilizando o método de Elementos

Finitos. Os dados da literatura, conforme já foi mencionado, foram obtidos reconstituindo-se os pontos de um gráfico apresentado no artigo citado.

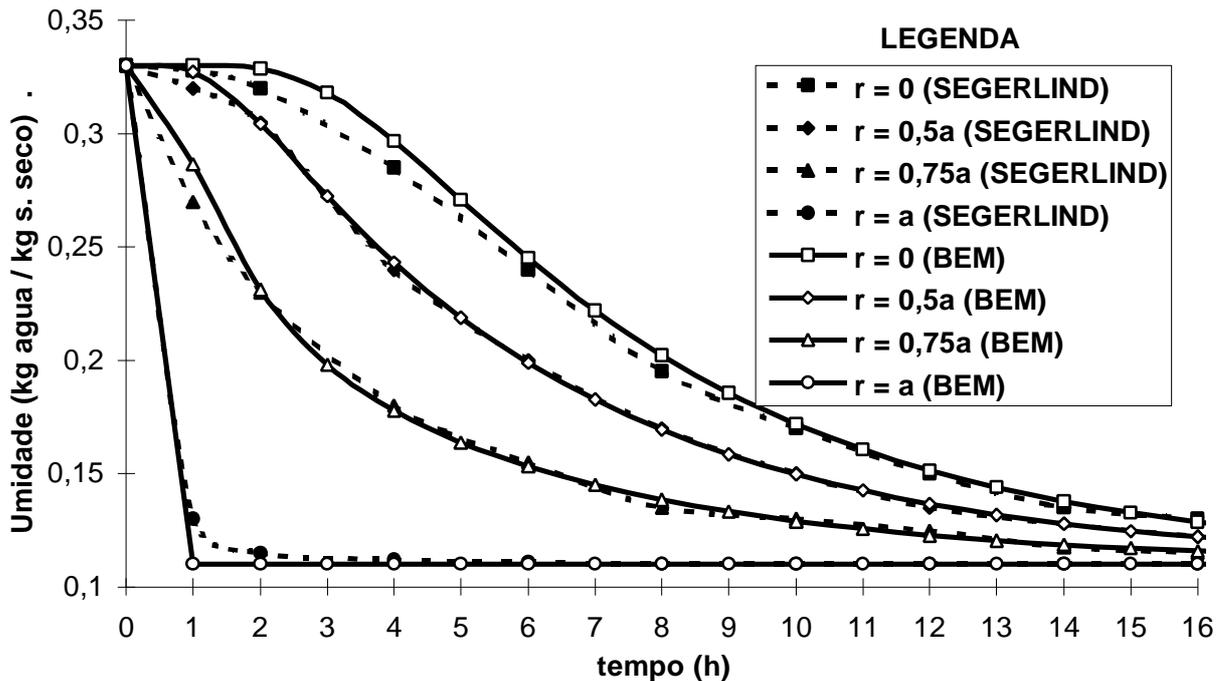


FIG. 4.8 RESULTADOS DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UMIDADE OBTIDOS PELO MÉTODO BEM E OS OBTIDOS POR HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988).

Os resultados numéricos de umidade obtidos pelo método de Elementos de Contorno e os obtidos numericamente por Elementos Finitos, da literatura, apresentados no gráfico da Figura 4.8, estão bastante concordantes, e inclusive tendem a atingir o equilíbrio ao mesmo tempo. O raio externo da soja é representado por  $r = a$  e o raio interno é  $r = 0$  tanto nos

dados da literatura quanto nos obtidos neste trabalho. Conclui-se portanto nesse estudo, que o método de Elementos de Contorno se constitui, tal como os métodos de Elementos Finitos e de Diferenças Finitas, numa técnica importante para avaliar o comportamento de secagem utilizando equação de difusão. Todavia, o aumento da precisão dos resultados obtidos pelo método de Elementos Finitos está vinculado ao refinamento da malha de discretização (cf. SILVA, 1995). HAGHIGHI e SEGERLIND, 1988, simulando a secagem de grãos de soja, utilizaram um modelo axisimétrico bidimensional composto de 255 elementos triangulares com 152 nós. Para obter os mesmos resultados na secagem de grãos de soja, com o método de Elementos de Contorno, foi utilizado um modelo axisimétrico unidimensional composto de 5 elementos quadráticos num total de 11 nós.

Na figura 4.9 estão apresentados os resultados de temperatura obtidos por este trabalho, com acoplamento de umidade e passo de tempo  $h_u = 0,01 h$  e  $h_t = 0,007 h$ , comparados com os resultados médios de temperatura obtidos por HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988), utilizando-se Elementos Finitos no processo de simulação. Os dados da literatura foram reconstituídos de um gráfico publicado no artigo citado.

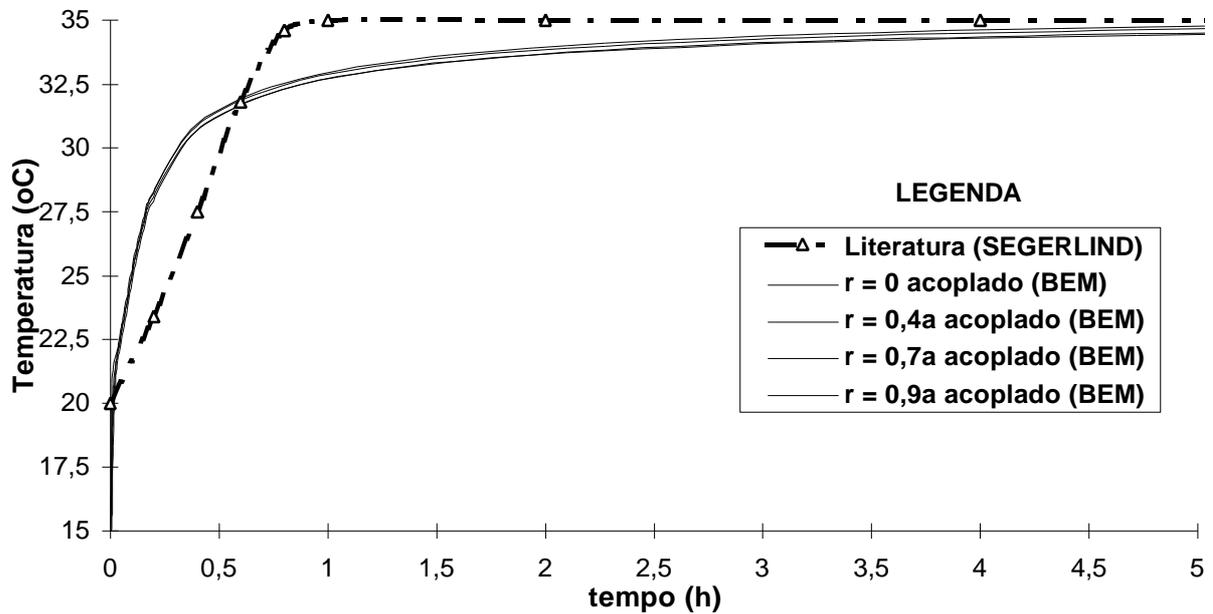


FIG. 4.9 RESULTADOS DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE TEMPERATURA COM ACOPLAMENTO DE UMIDADE OBTIDOS PELO MÉTODO BEM E OS RESULTADOS NUMÉRICOS OBTIDOS POR HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988).

A temperatura elevada que se observa no grão logo no início do processo, (cf. Figuras 4.7 e 4.9) é função do elevado gradiente de temperatura inicial existente entre a partícula e meio externo. Este gradiente, conforme já relatado por HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988), é o responsável pelo aparecimento de tensões no grão, podendo causar trincas no produto.

Os resultados do perfil de temperatura, nos pontos radiais do grão, sobrestimaram os valores médios obtidos por HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988), nas primeiras 0,6 h de secagem e os subestimaram após isto, conforme observado no gráfico da Figura 4.9.

A figura 4.10 apresenta os resultados de umidade média obtidos por este trabalho, utilizando o mesmo conceito de umidade média, citado por HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988), comparados com os dados experimentais, obtidos por SHAHAB et al., (1976) e OVERHULTS et al., (1973), e comparados também com os resultados numéricos obtidos por HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988), utilizando o método de Elementos Finitos. Os dados de temperatura e umidade relativa do ar, considerados nos experimentos numéricos foram 35°C e 11%, e os utilizados nos testes experimentais foram 36,6°C e 19% em SHAHAB e 37,8°C e 18% em OVERHULTS. Os dados da literatura aqui reportados foram também obtidos por reconstituição dos pontos de um gráfico apresentado no artigo de HAGHIGHI e SEGERLIND, (1988), citado.

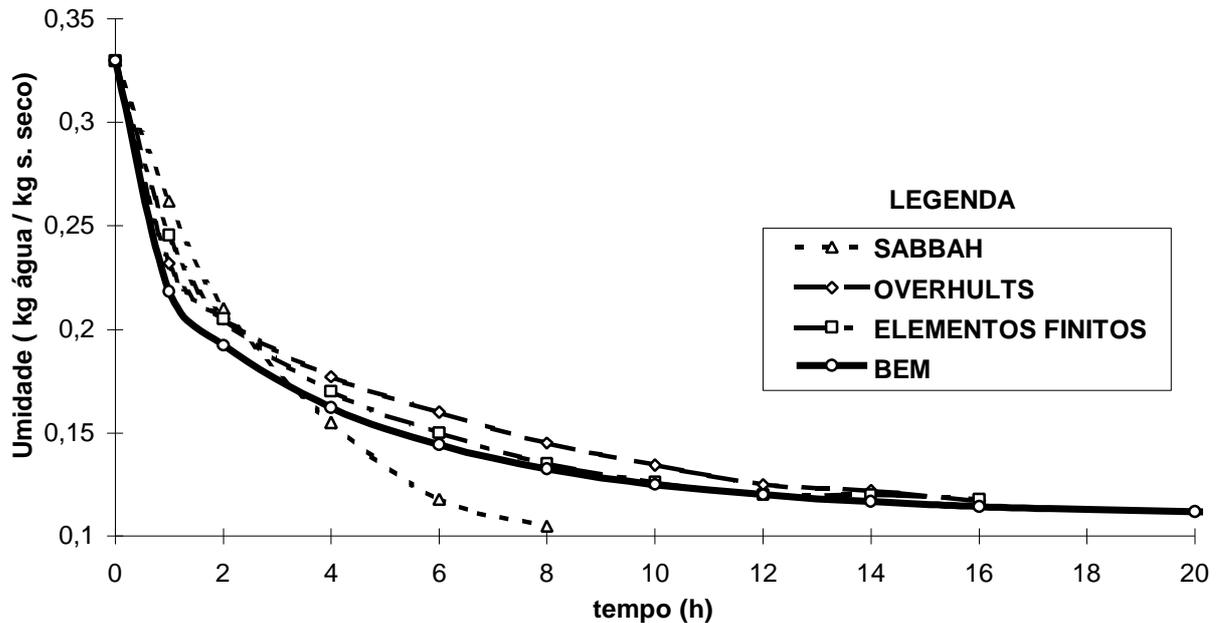


FIG. 4.10 RESULTADOS MÉDIOS DE UMIDADE DE SOJA COMPARANDO O MÉTODO DE ELEMENTOS DE CONTORNO COM RESULTADOS EXPERIMENTAIS E ELEMENTOS FINITOS, OBTIDOS DA LITERATURA.

Os resultados do método de Elementos de Contorno (BEM), para simulação de umidade, nas primeiras 4 horas de simulação, subestimaram todos os demais resultados em menos de 3%, sendo o maior desvio observado nos resultados obtidos por SHAHAB et al., (1976), (cf. Figura 4.10). A partir da 4ª hora de simulação, os resultados obtidos por SHAHAB et al., (1976) passou a ser inferior aos demais, se distanciando destes. A partir da 4ª hora de simulação, os resultados obtidos pelo BEM se aproximam mais dos obtidos nos demais métodos, e a partir da 8ª hora, os valores obtidos pelo método de Elementos Finitos e Elementos de Contorno tornam-se praticamente coincidentes.

## CAPÍTULO V

### CONCLUSÕES E SUGESTÕES

A rápida variação de temperatura no interior do grão, no início do processo, induz alguns autores a considerar que não há gradiente térmico no grão. Porém, o que há é um gradiente elevado, que inclusive é responsável pelo aparecimento de trincas no grão. Por isso, tal gradiente não pode ser desconsiderado. Agora, se este gradiente de temperatura elevado for considerado como sendo crítico, a temperatura da secagem deveria ser aumentada lentamente até se atingir a temperatura recomendada, impondo um gradiente menor ao sistema na tentativa de minimizar o dano causado pelo aquecimento brusco. Tal condição deveria ser pesquisada, em experimento de laboratório, objetivando determinar qual o maior gradiente inicial de temperatura que pode ser imposto ao sistema sem causar danos ao produto e sem aumentar muito o tempo necessário para secagem do grão. Em processo de simulação, isto poderia ser feito considerando a temperatura do ar de secagem variável com o tempo, alterando-a em cada passo de simulação nas equações existentes, comparando então esses resultados com os resultados experimentais de laboratório. Portanto, as opções de simulação do processo de

secagem não foram esgotadas, podendo ser realizadas novas pesquisas envolvendo simulação numérica e experimentos.

As restrições do modelo apresentado e os resultados alcançados sugerem que os estudos devem ter prosseguimento tanto na área teórica e computacional como no campo experimental. Assim, como sugestão para prosseguimento do estudo, é proposto:

- avaliar os perfis de temperatura e umidade considerando também o termo de acoplamento referente ao coeficiente termogradiente, na equação da difusão de umidade, no sentido de avaliar a pertinência deste coeficiente. Com essa consideração, a equação de umidade apresentará um termo de acoplamento em temperatura, e a equação de temperatura, um termo de acoplamento em umidade. Assim, as mesmas rotinas computacionais poderiam ser utilizadas com pequenas alterações.
- Análise considerando coeficientes dependentes da temperatura e da umidade, com objetivo de verificar a influência dessa dependência no processo de secagem, avaliando se o aumento de precisão advinda desta consideração justifica o acréscimo no número de equações, pois vale lembrar que as equações de Luikov, que

representam o modelo da difusão, precisariam ser alteradas.

- Repetir a simulação considerando uma temperatura inicial menor para o ar de secagem e propondo seu aumento gradual. Esta simulação deveria ser acompanhada por experimentos de laboratório para determinação da temperatura inicial adequada.
- Incluir a variação de volume na simulação. Avaliar a restrição feita no trabalho de simulação, que foi o de considerar o volume constante.
- Acoplar a análise isolada do grão no leito, ou seja, avaliar o perfil de temperatura e umidade no leito de secagem ou no próprio armazém de estocagem, avaliando neste caso, também o processo inverso, ou seja, a absorção de umidade pelo grão seco.
- Acoplar as análises com a análise de tensões para efeito de estabelecimento de uma rede de termometria no armazém.

Aqui estão alguns temas que necessitam ser estudados complementarmente e que são importantes para tornar a secagem de cereais mais segura e eficiente.

## CAPÍTULO VI

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABRAMOWITZ, M. and STEGUN, I. A. **Handbook of Mathematical Functions**. National Bureau of Standard. New York, Dover, 1965.

BIRD, R. B., STEWART, W. E. and LIGHTFOOT, E. N. **Transport Phenomena**. Wiley. New York, 1960.

BORIES, S. A. **Fundamentals of Drying of Capillary-Porous Bodies, Convective Heat and Mass Transfer in Porous Media**. Kluwer Academic Publishers. Netherlands, 1991. p. 391-434.

BREBBIA, C. A. **The boundary Element Method for Engineers**. Pentech Press. London, 1984.

BREBBIA, C. A., TELLES, J. C. F. & WROBEL, L. C. **Boundary Element Techniques: Theory and Applications in Engineering**. Springer-Verlag. Berlin, 1984.

BREBBIA, C. A. & SKERGET, P. **Non-linear Time Dependent Potential Problems Using BEM.** University of Southampton and University of Maribor. Yugoslavia, 1985.

BUTKOV, E. **Mathematical Physics**, Traduzido por CARVALHO J. B. P. F. Editora Guanabara Dois S.A., Rio de Janeiro, 1978.

CARSLAW, H. S. and JAEGER, J. C. **Conduction of Heat in Solids.** 2<sup>th</sup> edn., Oxford Clarendon Press, 1959.

CRANK, J. **The Mathematics of Diffusion.** 2<sup>th</sup> edn., Oxford Clarendon Press, 1975.

FERNANDES, J. L. M. and PINA, H. L. G. **Unsteady Heat Conduction using The Boundary Element Method.** Instituto Superior Técnico, Lisbon, Portugal, [1983].

FINLAYSON, B. A. **Nonlinear Analysis in Chemical Engineering.** McGraw-Hill Inc. United States of America, 1980.

FORTES, M. and OKOS, M. R. **Drying Theories: Their Bases and Limitations as Applied to Food and Grains.** Drying Theories. Chapter 5. 1980. p. 119-154.

HUSAIN, A., CHEM, C. S., CLAYTON, J. T. **Simultaneous Heat and Mass Diffusion in Biological Materials.** J. Agric. Engng. Res., 1973 vol 18, p. 343-354.

KAMYAR, H., SEGERLIND, L. J. **Modeling Simultaneous Heat and Mass Transfer in an Isotropic Sphere - A Finite Element Approach.** American Society of Agricultural Engineers, vol 31 (2): March - April, 1988 p. 629-637.

LUIKOV, A. V., **Heat and Mass Transfer in Capillary - Porous Body,** in Advances, in Heat Transfer. Pergamon Press, Oxford, 1966.

PACITTI, T. e ATKINSON, C. P. **Programação e Métodos Computacionais.** volume 2. Livros Técnicos e Científicos Ed., R. J. Brasil, 1975.

PINA, H. L. G. and FERNANDES, J. L. M. **Three-Dimensional Transient Heat Conduction by The Boundary Element Method.** Instituto Superior Técnico, Lisbon, Portugal. [1983].

PLUMB, O. A. **Convective Heat and Mass Transfer in Porous Media**. Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 1991. p. 963-984.

RAMSTAD, P. E. and GEDDES, W. F. **The Respiration and Storage Behavior of Soybeans**. Univ. Minn. Agr. Expt. Sta. Tech. Bull, 1942. p. 156.

SILVA, E. A. **Secagem de Gelatina: "Análise do Perfil de Concentração e Temperatura no Interior do Gel"**. Dissertação de Mestrado, UEM - Maringá, PR. 1995.

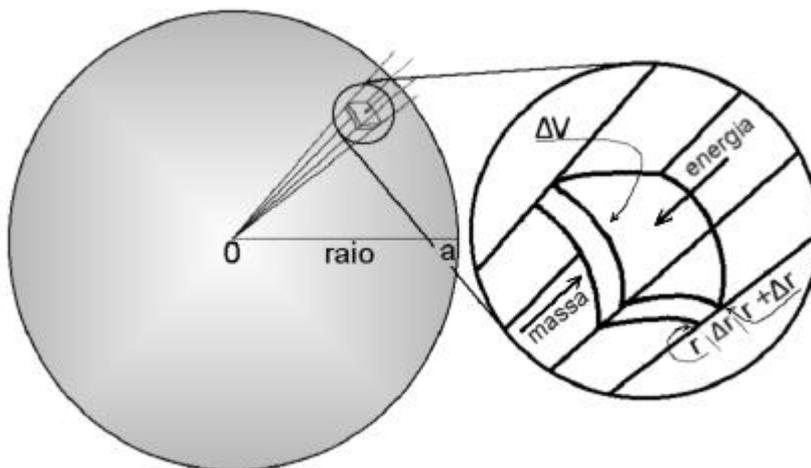
**APÊNDICE A**

**BALANÇO DE MASSA E ENERGIA EM UM CORPO POROSO ESFÉRICO**

**ISOTRÓPICO.**

**A.1 Balanço de Massa**

A seguir é apresentado um balanço de massa considerando o corpo como sendo uma partícula esférica porosa e isotrópica. O balanço é efetuado sobre um elemento de volume  $\Delta V$ , seguindo a figura ilustrativa a seguir (FIGURA 3.1), em coordenadas polares. Primeiramente é efetuado o balanço de líquido, posteriormente o balanço de vapor e finalmente são somados os dois resultados.



**FIGURA 3.1 REPRESENTAÇÃO SIMBÓLICA DO VOLUME DE CONTROLE DE UM ÚNICO GRÃO DE SOJA UTILIZADO NO BALANÇO DE MASSA E ENERGIA.**

Para fase líquida,

$$\left| \begin{array}{c} \text{Líquido que} \\ \text{entra no} \\ \text{volume } \Delta V \\ \text{em } r \end{array} \right| - \left| \begin{array}{c} \text{Líquido} \\ \text{que sai do} \\ \text{volume } \Delta V \\ \text{em } r + \Delta r \end{array} \right| - \left| \begin{array}{c} \text{Líquido que} \\ \text{desaparece por} \\ \text{evaporação em} \\ \Delta V \end{array} \right| = \left| \begin{array}{c} \text{Acúmulo} \\ \text{de} \\ \text{líquido} \\ \text{em } \Delta V \end{array} \right|$$

Desenvolvendo cada termo, tem-se,

$$\left| \begin{array}{c} \text{Líquido que} \\ \text{entra no volume} \\ \Delta V \text{ em } r \end{array} \right| = n_{\ell_{in}} \Big|_r \cdot 4pr^2 \Big|_r \quad , \quad (\text{A.1})$$

onde:

$n_{\ell_{in}}$  = Fluxo de líquido entrando em  $r$  [ $\text{kg}/\text{m}^2 \text{ s}$ ],

$4pr^2$  = Área transversal [ $\text{m}^2$ ].

$$\left| \begin{array}{c} \text{Líquido que} \\ \text{sai do volume} \\ \Delta V \text{ em } r + \Delta r \end{array} \right| = n_{\ell_{ou}} \Big|_{r+\Delta r} \cdot 4p(r + \Delta r)^2 \Big|_{r+\Delta r} \quad , \quad (\text{A.2})$$

onde:

$n_{\ell_{ou}}$  = Fluxo de líquido saindo em  $r+\Delta r$  [ $\text{kg}/\text{m}^2 \text{ s}$ ],

$4p(r+\Delta r)^2$  = Área transversal [ $\text{m}^2$ ].

$$\left| \begin{array}{l} \text{Líquido que} \\ \text{desaparece} \\ \text{por evaporação} \\ \text{em } \Delta V \end{array} \right| = \dot{m}_{\ell} 4pr^2 \Delta r \quad , \quad (\text{A.3})$$

onde:

$\dot{m}_{\ell}$  = massa evaporada por unidade de volume e tempo  
[ $\text{kg}/\text{m}^3 \text{ s}$ ],

$4pr^2 \Delta r \cong$  Volume da casca esférica  $\Delta V$  [ $\text{m}^3$ ].<sup>1</sup>

$$\left| \begin{array}{l} \text{Acúmulo} \\ \text{de} \\ \text{líquido} \\ \text{em } \Delta V \end{array} \right| = \frac{\dot{m}_{\ell}}{\dot{V}} \cdot 4pr^2 \Delta r \quad , \quad (\text{A.4})$$

---

<sup>1</sup>  $V_{\text{casca}} = \frac{4}{3} p(r + \Delta r)^3 - \frac{4}{3} pr^3 = \frac{4}{3} p(3r^2 \Delta r + 3r \Delta r^2 + \Delta r^3)$  .

$\lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{4}{3} p(3r^2 \Delta r + 3r \Delta r^2 + \Delta r^3) = \frac{4}{3} (3r^2 \Delta r)$  .

$V_{\text{casca}} = 4pr^2 \Delta r$

onde:

$r_l$  = concentração mássica de líquido no volume  $\Delta V$  [kg/m<sup>3</sup>],

$4\pi r^2 \Delta r \cong$  volume da casca esférica  $\Delta V$  [m<sup>3</sup>].

Para a fase vapor, considerado no balanço que esta fase é formada de água na fase vapor, desprezando a presença de gases inertes,

$$\left| \begin{array}{c} \text{Vapor que} \\ \text{entra no} \\ \text{volume } \Delta V \\ \text{em } r \end{array} \right| - \left| \begin{array}{c} \text{Vapor que} \\ \text{sai do} \\ \text{volume } \Delta V \\ \text{em } r + \Delta r \end{array} \right| + \left| \begin{array}{c} \text{Vapor que} \\ \text{aparece por} \\ \text{evaporação do} \\ \text{líquido em } \Delta V \end{array} \right| = \left| \begin{array}{c} \text{Acúmulo} \\ \text{de vapor} \\ \text{em } \Delta V \end{array} \right|$$

Desenvolvendo cada termo, tem-se,

$$\left| \begin{array}{c} \text{Vapor que} \\ \text{entra no} \\ \text{volume } \Delta V \\ \text{em } r \end{array} \right| = n_{v,in}|_r \cdot 4\pi r^2|_r, \quad (A.5)$$

onde:



$$\left| \begin{array}{l} \text{Acúmulo} \\ \text{de vapor} \\ \text{em } \Delta V \end{array} \right| = \frac{\rho_r}{\rho_l} \cdot 4\pi r^2 \mathbf{D}r \quad , \quad (\text{A.8})$$

onde:

$\rho_r$  = concentração mássica de vapor no volume  $\Delta V$  [kg/m<sup>3</sup>],

$4\pi r^2 \mathbf{D}r \cong$  volume da casca esférica  $\Delta V$  [m<sup>3</sup>].

Como todo o vapor que se forma é devido à evaporação do líquido, tem-se,

$$\dot{m}_\ell = \dot{m}_v = \dot{m}_{ev} \quad . \quad (\text{A.9})$$

Daí, para líquido e para vapor, obtém-se,

$$n_{\ell_{in}} \cdot r^2 \Big|_r - n_{\ell_{ou}} \cdot (r + \mathbf{D}r)^2 \Big|_{r+\mathbf{D}r} - \dot{m}_{ev} \cdot r^2 \mathbf{D}r = \frac{\rho_r}{\rho_l} \cdot r^2 \mathbf{D}r \quad , \quad (\text{A.10})$$

$$n_{v_{in}} \cdot r^2 \Big|_r - n_{v_{ou}} \cdot (r + \mathbf{D}r)^2 \Big|_{r+\mathbf{D}r} + \dot{m}_{ev} \cdot r^2 \mathbf{D}r = \frac{\rho_r}{\rho_l} \cdot r^2 \mathbf{D}r \quad . \quad (\text{A.11})$$

Dividindo as equações A.10 e A.11 por  $\Delta r$ , fazendo o limite quando  $\Delta r \rightarrow 0$ , e agrupando convenientemente os termos, são obtidas,

$$\lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{n_{\ell_{in}} r^2|_r - n_{\ell_{ou}} (r + \Delta r)^2|_{r+\Delta r}}{\Delta r} - \dot{m}_{ev} \cdot r^2 = \frac{\mathfrak{I}r_{\ell}}{\mathfrak{I}t} \cdot r^2 \quad , \quad (\text{A.12})$$

$$\lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{n_{v_{in}} r^2|_r - n_{v_{ou}} (r + \Delta r)^2|_{r+\Delta r}}{\Delta r} + \dot{m}_{ev} \cdot r^2 = \frac{\mathfrak{I}r_v}{\mathfrak{I}t} \cdot r^2 \quad , \quad (\text{A.13})$$

ou seja,

$$-\frac{1}{r^2} \frac{\mathfrak{I}(r^2 \cdot n_{\ell})}{\mathfrak{I}r} - \dot{m}_{ev} = \frac{\mathfrak{I}r_{\ell}}{\mathfrak{I}t} \quad , \quad (\text{A.14})$$

$$-\frac{1}{r^2} \frac{\mathfrak{I}(r^2 \cdot n_v)}{\mathfrak{I}r} + \dot{m}_{ev} = \frac{\mathfrak{I}r_v}{\mathfrak{I}t} \quad . \quad (\text{A.15})$$

Substituindo nas equações A.14 e A.15,  $\mathbf{r}_{\ell}$  por  $\mathbf{r}_s \cdot U_{\ell}$  e  $\mathbf{r}_v$  por  $\mathbf{r}_s \cdot U_v$  e somando estas equações, resulta,

$$\mathbf{r}_s \frac{\mathfrak{I}(U_{\ell} + U_v)}{\mathfrak{I}t} = -\nabla(n_{\ell} + n_v) \quad . \quad (\text{A.16})$$

De acordo com LUIKOV, (1966),

$$n_l = -r_s k_l \tilde{N}U - r_s k_{lT} \tilde{N}T - k_f \tilde{N}p$$

e

$$n_v = -r_s k_v \tilde{N}U - r_s k_{vT} \tilde{N}T - k_{fT} \tilde{N}p \quad ,$$

onde o termo em  $\tilde{N}U$  representa o movimento do líquido devido ao gradiente de concentração, o termo em  $\tilde{N}T$  representa o movimento do líquido devido ao gradiente de temperatura e o termo em  $\tilde{N}p$  representa o movimento do líquido devido ao gradiente de pressão. O mesmo pode ser dito para o vapor. Os termos referentes ao gradiente de pressão podem ser desprezados, ou seja,  $k_f \tilde{N}p = k_{fT}$  e  $\tilde{N}p = 0$ . Daí, são obtidas,

$$n_l = -r_s k_l \tilde{N}U - r_s k_{lT} \tilde{N}T \quad , \quad (\text{A.17})$$

e

$$n_v = -r_s k_v \tilde{N}U - r_s k_{vT} \tilde{N}T \quad , \quad (\text{A.18})$$

onde:

$r_s$  = densidade do sólido seco [kg/m<sup>3</sup>],

$k_l$  = difusividade do líquido [m<sup>2</sup>/s],

$k_v$  = difusividade do vapor [m<sup>2</sup>/s],

$k_{lT}$  = difusividade térmica de umidade no estado líquido  
[m<sup>2</sup>/s],

$k_{vT}$  = difusividade térmica de umidade no estado vapor  
[m<sup>2</sup>/s],

$\tilde{N}$  ( $= \nabla(\cdot)/\nabla t$ ) = gradiente [1/m],

$U$  = fração mássica de água em forma de umidade  
[kg<sub>água</sub>/kg<sub>sólido seco</sub>].

Em um corpo poroso capilar, a concentração de umidade é o somatório das concentrações relativas de água presentes nas formas sólida, líquida e gasosa. Para condições de temperatura e pressão ambientes, a quantidade de água na fase vapor é muito menor do que a quantidade de água na fase líquida ( $\cong 10^{-3}\%$  vezes menor), e não há água no estado sólido (LUIKOV, 1988). Neste caso, pode-se considerar, com boa aproximação que,

$$U_\ell + U_v = U_\ell = U \quad , \text{ pois } U_\ell \gg U_v .$$

Então, usando a igualdade acima, e substituindo as equações A.17 e A.18 em A.16, obtém-se,

$$\mathbf{r}_s \frac{\nabla(U)}{\nabla t} = \mathbf{r}_s \nabla [k_\ell \nabla U + k_{\ell T} \nabla T + k_v \nabla U + k_{vT} \nabla T] \quad . \quad (\text{A.19})$$

Fazendo, ainda,

$$D = k_\ell + k_v \quad (\text{chamando de difusividade da partícula}),$$

$$\mathbf{d} = (k_{\ell T} + k_{vT})/D \quad (\text{chamando de coeficiente termogradiente}),$$

obtém-se,

$$\frac{\mathcal{I}U}{\mathcal{I}t} = \nabla \cdot [D(\nabla U + \mathbf{d} \cdot \nabla T)] \quad . \quad (\text{A.20})$$

Os coeficientes  $D$  e  $\mathbf{d}$  são variáveis, porém, para pequenos gradientes de temperatura e umidade, podem ser considerados como constantes (cf. FORTES e OKOS, 1980). Então:

$$\frac{\mathcal{I}U}{\mathcal{I}t} = D[\nabla \cdot \nabla U + \mathbf{d} \nabla \cdot \nabla T] \quad , \quad (\text{A.21})$$

ou seja,

$$\frac{\mathcal{I}U}{\mathcal{I}t} = D\nabla^2 U + D\mathbf{d}\nabla^2 T \quad . \quad (\text{A.22})$$

Esta equação representa a expressão da difusão mássica de um corpo esférico, poroso e isotrópico. Conforme se observa na equação A.22, a variação de umidade com o tempo é ditada por um termo relacionado ao gradiente de concentração de umidade e outro termo relacionado ao gradiente de temperatura da partícula.

## A.2 Balanço de Energia.

Levando em consideração as mesmas restrições do balanço de massa. A energia envolvida no processo, pode ser representada pela que é trocada por condução, por convecção e a envolvida na mudança de fase dentro da partícula. Então, tem-se:

$$E_{total} = E_{condução} + E_{convecção}$$

Do balanço de energia por condução, efetuado sobre o elemento de volume  $\Delta V$ , em coordenadas polares numa partícula esférica, porosa e isotrópica, obtém-se,

Energia que		Energia		Ganho de		Acúmulo
entra no		que sai do		energia por		de
volume $\Delta V$	-	volume $\Delta V$	+	mudança de	=	energia
em r		em $r+\Delta r$		fase em $\Delta V$		em $\Delta V$

Desenvolvendo cada termo, tem-se,

$$\left| \begin{array}{l} \text{Energia que} \\ \text{entra no volume} \\ \Delta V \text{ em } r \end{array} \right| = q_r \Big|_r \cdot 4pr^2 \Big|_r \quad , \quad (\text{A.23})$$

onde:

$q_r$  = Fluxo radial de energia entrando em  $r$  [kcal/m<sup>2</sup>s],

$4pr^2$  = Área transversal [m<sup>2</sup>].

$$\left| \begin{array}{l} \text{Energia que} \\ \text{sai do volume} \\ \Delta V \text{ em } r+\Delta r \end{array} \right| = q_r \Big|_{r+\Delta r} \cdot 4p(r+\Delta r)^2 \Big|_{r+\Delta r} \quad , \quad (\text{A.24})$$

onde:

$q_r$  = Fluxo radial de energia saindo em  $r+\Delta r$  [kcal/m<sup>2</sup>s],

$4p(r+\Delta r)^2$  = Área transversal [m<sup>2</sup>].

$$\left| \begin{array}{l} \text{Ganho de} \\ \text{energia por} \\ \text{mudança de} \\ \text{fase em } \Delta V \end{array} \right| = \dot{m}_{ev} \cdot 4pr^2 \Delta r \cdot L \quad , \quad (\text{A.25})$$

onde:

$\dot{m}_{ev}$  = massa evaporada por volume e por tempo [kg/m<sup>3</sup>s],

$4pr^2 \Delta r$  = volume da casca esférica  $\Delta V$  [m<sup>3</sup>],

$L$  = calor latente de evaporação ( $h_v - h_l$ ) [kcal/kg].

$$\left. \begin{array}{l} \text{Acúmulo} \\ \text{de} \\ \text{energia} \\ \text{em } \Delta V \end{array} \right| = \frac{\mathcal{V}}{\mathcal{V}t} (r_s C_p T) \cdot 4\pi r^2 Dr \quad , \quad (\text{A.26})$$

onde:

$r_s$  = densidade do sólido seco no elemento  $\Delta V$  [kg/m<sup>3</sup>],

$C_p$  = capacidade calorífica da partícula [kcal/kg °C].

Dessa forma, tem-se,

$$\begin{aligned} & q_r|_r \cdot 4\pi r^2|_{r+Dr} - q_r|_{r+Dr} \cdot 4\pi (r + Dr)^2|_{r+Dr} + \\ & + \dot{m}_{ev} \cdot 4\pi r^2 Dr \cdot L = \frac{\mathcal{V}}{\mathcal{V}t} (r_s C_p T) \cdot 4\pi r^2 Dr \quad . \quad (\text{A.27}) \end{aligned}$$

Simplificando os termos desta equação, dividindo-a por  $Dr$ , e fazendo o limite quando  $Dr \rightarrow 0$ , a equação A.27, fornece,

$$\lim_{Dr \rightarrow 0} \frac{q_r|_r \cdot r^2 - q_r|_{r+Dr} \cdot (r + Dr)^2}{Dr} + \dot{m}_{ev} \cdot r^2 \cdot L = r_s \cdot Cp \cdot r^2 \frac{\mathcal{I}T}{\mathcal{I}t} , \quad (\text{A.28})$$

ou seja,

$$- \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}r} \left( r^2 \cdot q_r \right) + \dot{m}_{ev} \cdot r^2 \cdot L = r_s Cp r^2 \frac{\mathcal{I}T}{\mathcal{I}t} . \quad (\text{A.29})$$

De acordo com a lei de Fourier (cf. ABRAMOWITZ and STEGUN, 1965), tem-se,

$$q_r = -K_T \nabla T , \quad (\text{A.30})$$

onde,  $K_T$  é função de temperatura e umidade. Porém, para pequenos gradientes de temperatura e umidade,  $K_T$  pode ser considerado constante conforme FORTES e OKOS, (1980), resultando para a equação A.29,

$$K_T \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}r} \left( r^2 \cdot \frac{\mathcal{I}T}{\mathcal{I}r} \right) + \dot{m}_{ev} \cdot r^2 \cdot L = r_s Cp r^2 \frac{\mathcal{I}T}{\mathcal{I}t} . \quad (\text{A.31})$$

Em processos transientes,  $\dot{m}_{ev}$  representa a massa de líquido que desaparece ou a massa de vapor que se forma; e pode ser representada por:

$$\dot{m}_{ev} = e r_s \frac{\mathcal{U}}{\mathcal{t}} \quad , \quad (\text{A.32})$$

onde:

$e$  = Fator de tortuosidade, que leva em consideração a dificuldade de difusão de vapor em meios porosos,

$r_s$  = densidade do sólido seco [kg/m<sup>3</sup>].

Substituindo a equação A.32 na equação A.31, obtém-se,

$$K_T \frac{\mathcal{U}}{\mathcal{r}} \left( r^2 \frac{\mathcal{U}}{\mathcal{r}} \right) + r^2 L e r_s \frac{\mathcal{U}}{\mathcal{t}} = r_s C_p r^2 \frac{\mathcal{U}}{\mathcal{t}} \quad . \quad (\text{A.33})$$

A energia que é transferida por convecção representa a energia transportada com o movimento de líquido e vapor dentro da partícula. Assim, a partir do balanço de massa, obtém-se,

$$E_{conv} = n_\ell C_{p_\ell} \sqrt{V} T + n_v C_{p_v} \sqrt{V} T \quad , \quad (\text{A.34})$$

ou seja,

$$E_{conv} = (n_\ell c_{p_\ell} + n_v c_{p_v}) \nabla T \quad . \quad (A.35)$$

Adicionando as energias envolvidas no processo, isto é, somando as equações A.33 e A.35, obtém-se,

$$\begin{aligned} K_T \frac{\nabla}{\nabla r} \left( r^2 \cdot \frac{\nabla T}{\nabla r} \right) + r^2 L \mathbf{e} \mathbf{r}_s \frac{\nabla U}{\nabla t} + (n_\ell c_{p_\ell} + n_v c_{p_v}) \nabla T = \\ \mathbf{r}_s c_p r^2 \frac{\nabla T}{\nabla t} \quad . \end{aligned} \quad (A.36)$$

Rearranjando a equação A.36, vem,

$$\begin{aligned} \frac{K_T}{\mathbf{r}_s c_p} \cdot \frac{1}{r^2} \left[ \frac{\nabla}{\nabla r} \left( r^2 \cdot \frac{\nabla T}{\nabla r} \right) \right] + \frac{r^2 L \mathbf{e} \mathbf{r}_s}{\mathbf{r}_s c_p r^2} \frac{\nabla U}{\nabla t} + \\ \frac{(n_\ell c_{p_\ell} + n_v c_{p_v})}{\mathbf{r}_s c_p r^2} \nabla T = \frac{\nabla T}{\nabla t} \quad . \end{aligned} \quad (A.37)$$

Normalmente, o termo convectivo é muito pequeno em relação ao termo condutivo, sendo portanto desprezado, conforme indicado em FORTES e OKOS, (1980) e BORIES, (1991). Então, simplificando a equação A.37, resulta:

$$\frac{K_T}{r_s C_p} \cdot \frac{1}{r^2} \left[ \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}_r} \left( r^2 \cdot \frac{\mathcal{I}T}{\mathcal{I}_r} \right) \right] + \frac{L e}{C_p} \frac{\mathcal{I}U}{\mathcal{I}t} = \frac{\mathcal{I}T}{\mathcal{I}t} \quad , \quad (\text{A.38})$$

onde:

$$\frac{K_T}{r_s C_p} = \mathbf{a} \quad . \quad (\text{A.39})$$

Sabendo que, para o caso de esfera isotrópica e da independência das condições inicial e de contorno em relação às coordenadas  $\mathbf{q}$  e  $\mathbf{f}$ ,  $T$  também não depende das coordenadas  $\mathbf{q}$  e  $\mathbf{f}$ , ou seja,  $T$  é função apenas de ' $r$ ' e de ' $t$ '. Desta forma, pode-se escrever,

$$\frac{K_T}{r_s C_p} \cdot \frac{1}{r^2} \left[ \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}_r} \left( r^2 \cdot \frac{\mathcal{I}T}{\mathcal{I}_r} \right) \right] = \mathbf{a} \cdot \nabla^2 T \quad . \quad (\text{A.40})$$

Então, substituindo a equação A.22 e A.40 em A.38, resulta,

$$\frac{\mathcal{I}T}{\mathcal{I}t} = \mathbf{a} \cdot \nabla^2 T + \frac{L e}{C_p} \cdot \left( D \cdot \nabla^2 U + D \mathbf{d} \cdot \nabla^2 T \right) \quad , \quad (\text{A.41})$$

ou ainda,

$$\frac{\mathcal{I}T}{\mathcal{I}t} = \frac{L e}{C_p} D \cdot \nabla^2 U + \left( \mathbf{a} + \frac{L e \mathbf{d}}{C_p} D \right) \cdot \nabla^2 T \quad . \quad (\text{A.42})$$

A equação A.42 representa a expressão da difusão térmica de um corpo esférico, poroso e isotrópico. Conforme se observa nessa equação, a variação de temperatura do corpo com o tempo é ditada por um termo relacionado ao gradiente de concentração de umidade e outro termo relacionado ao gradiente de temperatura.

As equações A.22 e A.41 representam as equações da difusão obtidas dos balanços de massa e energia e serão utilizadas no presente estudo. Elas foram deduzidas também por *Luikov*, conforme relatado por FORTES e OKOS, (1980). Em seu trabalho, LUIKOV, (1966) considerando transferência simultânea de calor e massa em um corpo poroso capilar e admitindo constante as propriedades físicas do corpo,  $\alpha$ ,  $D$ ,  $d$ ,  $C_p$  e  $e$ , obteve as seguintes equações:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = K_{11} \cdot \nabla^2 U + K_{12} \cdot \nabla^2 T \quad , \quad (\text{A.43})$$

e

$$\frac{\partial T}{\partial t} = K_{21} \cdot \nabla^2 U + K_{22} \cdot \nabla^2 T \quad . \quad (\text{A.44})$$

Nestas equações, os termos  $K_{11}$  e  $K_{22}$  foram denominados de coeficientes fenomenológicos; e,  $K_{12}$  e  $K_{21}$  coeficientes de acoplamento (cf. FORTES e OKOS, 1980). Estes termos são descritos à seguir:

$K_{11} = D$  @ Difusividade mássica da partícula,

$K_{12} = D\mathbf{d}$  → Corresponde ao termo de acoplamento,

$K_{21} = LeD/Cp$  → Corresponde ao termo de acoplamento,

$K_{22} = \mathbf{a} + Le\mathbf{d}/Cp$  → Corresponde ao termo de Difusividade  
térmica e mudança de estado físico,

$\mathbf{d} = (k_{1T} + k_{vT})/D$  → coeficiente termogradiante,

$L = (h_v - h_l)$  → Calor latente de evaporação de umidade,

$\mathbf{a} = K_T/r_s Cp$  → Difusividade térmica da partícula,

$Cp$  → Calor específico do corpo,

$K_T$  → Condutividade térmica do corpo,

$r_s$  → Densidade do sólido seco,

$e$  → Fator de tortuosidade para difusão de gases em meios  
porosos capilares (adimensional).

As equações A.22 e A.42 são portanto as mesmas obtidas por *Luikov* em seus estudos, bastando que se considere  $\mathbf{a}$ ,  $L$ ,  $e$ ,  $Cp$ ,  $D$  e  $\mathbf{d}$  constantes para o grão de soja.

**APÊNDICE B****SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO SEM TERMO DE  
ACOPLAMENTO**

Partindo das equações da difusão mássica e de energia, e das condições inicial e de contorno pertinentes ao problema, considerando os fenômenos independentes, ou seja, sem os termos de acoplamento na equação de balanço de energia e condição de contorno, neste apêndice é obtida a solução analítica, em coordenadas esféricas, para efeito de comparação com os resultados obtidos anteriormente.

**B.1 Resolução Analítica da Equação de Difusão Mássica.**

A seguir são apresentadas a equação de difusão mássica,

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D \nabla^2 U \quad , \text{ em } W,$$

a condição inicial,

$$\text{CI: } U(r,0) = U_0 \quad ,$$

e condições de contorno, em  $r = a$ ,

$$\text{CC: } \frac{\partial U(a,t)}{\partial r} = -w(U(a,t) - U_c) \quad ,$$

e em  $r = 0$ ,

$$\frac{\partial U(0,t)}{\partial r} = 0 \quad .$$

A equação de difusão na forma aberta em coordenadas esféricas com  $U = U(r,t)$ , fica sendo (cf. APÊNDICE B.2),

$$\frac{\partial U(r,t)}{\partial t} = D \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial U(r,t)}{\partial r} \right) \quad . \quad (\text{B.1})$$

Resolvendo (B.1) com as condições inicial e de contornos pelo método de separação de variáveis,

$$\frac{1}{DQ} \frac{dQ}{dt} = \frac{1}{R} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) \right] = -\mathbf{l}^2 .$$

Portanto, tem-se que,

$$\frac{dQ}{dt} = -D\mathbf{l}^2 Q \quad , \quad (\text{B.2})$$

e

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[ r^2 \frac{dR}{dr} \right] = -\mathbf{l}^2 R \quad . \quad (\text{B.3})$$

Rearranjando a equação B.3, obtém-se,

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \mathbf{l}^2 r^2 R = 0 \quad , \quad (\text{B.4})$$

ou, escrevendo de outra forma,

$$r^2 R'' + 2rR' + \mathbf{l}^2 r^2 R = 0 \quad . \quad (\text{B.5})$$

A equação diferencial parcial (B.5) apresenta o mesmo aspecto da equação esférica de *Bessel* (BUTKOV, 1978),

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + [k^2 r^2 - \ell(\ell + 1)]R = 0 \quad . \quad (\text{B.6})$$

Para o caso de  $\ell(\ell + 1) = 0$ , sua solução é (cf. ABRAMOWITZ e STEGUN, 1965),

$$R(r) = A.J_0(kr) + B.Y_0(kr) \quad , \quad (\text{B.7})$$

onde:

$J_0$  ® função esférica de *Bessel* de ordem 1/2,

$Y_0$  ® função esférica de *Neumann* de ordem 1/2,

$A$  e  $B$  ® coeficientes da função de *Bessel*.

Como a função tem que ser finita em  $r = 0$ , faz-se,  $B = 0$ . Daí, a solução para a equação B.5 assume a forma,

$$R(r) = J_0(\mathbf{1}r) \quad , \quad (\text{B.8})$$

que também pode ser escrita como sendo (ABRAMOWITZ & STEGUN, 1965),

$$R(r) = \frac{\text{sen}(lr)}{lr} .$$

A condição de contorno,

$$D \frac{\mathcal{I}U(a, t)}{\mathcal{I}r} = -w (U(a, t) - U_c) ,$$

não homogênea, será modificada para,

$$\frac{\mathcal{I}u(a, t)}{\mathcal{I}r} = - \frac{w}{D} u(a, t) ,$$

fazendo,

$$U(a, t) - U_c = u(a, t) .$$

Daí, fazendo  $u(r, t) = R(r) \cdot Q(t)$ , tem-se que a solução  $J_0(lr)$  deve satisfazer também a condição de contorno para  $u$ . Então,

$$\frac{d\mathbf{u}(r,t)}{dr} = \mathbf{Q}(t) \frac{dR(r)}{dr} \quad ,$$

que ao ser substituída na condição de contorno, fornece,

$$\mathbf{Q}(t) \frac{d(R(r))}{dr} + h(R(r)) \cdot \mathbf{Q}(t) = 0 \quad , \quad (\text{B.9})$$

onde fez-se  $w/D = h$ . Simplificando, vem,

$$\frac{dR(a)}{dr} + h \cdot R(a) = 0 \quad .$$

Substituindo, então,

$$R(r)|_{r=a} = J_0(lr)|_a = \frac{\text{sen}(lr)}{lr} |_a \quad ,$$

na condição de contorno, tem-se,

$$- \frac{\text{sen } l a}{l a^2} + \frac{\text{cos } l a}{a} + h \frac{\text{sen } l a}{l a} = 0 \quad . \quad (\text{B.10})$$

Dividindo esta equação por  $\cos l a$  e rearranjando os termos resulta,

$$\frac{\operatorname{tg} l a}{l a} = \frac{1}{(1 - ha)} \quad . \quad (\text{B.11})$$

Os autovalores  $l_n$  são obtidos resolvendo a equação,

$$\frac{\operatorname{tg} l_n a}{l_n a} = \frac{1}{(1 - ha)} \quad , \quad \text{para } n = \text{ímpar} \quad . \quad (\text{B.12})$$

Aqui, os autovalores, fornecidos pela equação B.12, foram obtidos numericamente pelo método de *Newton Raphson* (FINLAYSON, 1980).

Com os autovalores, a solução  $u(r, t)$  pode ser escrita em forma de série, isto é,

$$u(r, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \frac{\operatorname{sen} l_n r}{l_n r} e^{-D l_n^2 t} \quad , \quad (\text{B.13})$$

onde  $A_n$  será obtido a partir da condição inicial,

$$U(r,0) = U_0 .$$

Sendo assim,

$$U_0 - U_c = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \frac{\text{sen } \mathbf{I}_n r}{\mathbf{I}_n r} = \sum_{n=1}^{\infty} A_n J_0(\mathbf{I}_n r) . \quad (\text{B.14})$$

Da equação diferencial, satisfeita por  $J_0(\mathbf{I}_n r)$ , segue-se que estas funções são ortogonais no intervalo  $(0, a)$ , com relação ao produto interno,

$$f \cdot g = \int_0^a r^2 f(r) \cdot g(r) dr .$$

Dessa forma, multiplicando ambos os lados de (B.14) por  $r^2 J_0(\mathbf{I}_n r)$  e integrando no intervalo de  $[0, a]$ , obtém-se,

$$\int_0^a [U_0 - U_c] r^2 J_0(\mathbf{I}_n r) dr = A_n \int_0^a r^2 [J_0(\mathbf{I}_n r)]^2 dr .$$

Utilizando as funções trigonométricas, vem,

$$\begin{aligned} \int_0^a r^2 [J_0(l_n r)] dr &= \int_0^a r^2 \frac{\text{sen}^2 l_n r}{l_n^2 r^2} dr = \frac{1}{l_n^2} \int_0^a \text{sen}^2 l_n r dr = \\ \frac{1}{l_n^2} \left[ \frac{r}{2} - \frac{\text{sen } 2l_n r}{4l_n} \right]_0^a &= \frac{1}{4l_n^3} [2l_n a - \text{sen } 2l_n a] . \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Então,

$$\int_0^a [U_0 - U_c] r^2 J_0(l_n r) dr = A_n \frac{1}{4l_n^3} [2l_n a - \text{sen } 2l_n a] , \quad (\text{B.16})$$

ou seja,

$$A_n = \frac{4l_n^3 \int_0^a [U_0 - U_c] r^2 J_0(l_n r) dr}{2l_n a - \text{sen } 2l_n a} . \quad (\text{B.17})$$

Finalmente, a solução é apresentada na forma,

$$U(r, t) = U_c + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \frac{\text{sen } l_n r}{l_n r} e^{-D l_n^2 t} , \quad (\text{B.18})$$

com  $A_n$  calculado por B.17 ou por,

$$A_n = \frac{4I_n[U_0 - U_c]}{2I_n a - \text{sen } 2I_n a} \left[ \frac{1}{I_n} \text{sen } I_n a - R \cos I_n a \right] , \quad (\text{B.19})$$

onde  $I_n$  são os autovalores da expressão B.12. Aqui, trocou-se  $J_0$  por sua representação trigonométrica e foi feito,

$$k_n = \frac{4I_n^2[U_0 - U_c]}{2I_n a - \text{sen } 2I_n a} .$$

## B.2 Equação da Difusão em Coordenadas Esféricas

Dá-se o nome de Difusão ao fenômeno de transferência de alguma forma de energia (calor, massa) causado pelo movimento aleatório das moléculas em um corpo. Em forma operacional, de acordo com CRANK, (1975) a difusão pode ser expressa por,

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \text{div}(k \cdot \text{grad } m) , \quad (\text{B.20})$$

onde:

$k$  é denominado coeficiente de difusão,

$m$  é a concentração da espécie difundida.

O coeficiente  $k$ , em sua forma mais geral, pode ser função de  $m$ , da posição e do tempo -  $k = k(m, r, t)$ . Em algumas situações,  $k$  pode ser considerado como constante e daí a expressão B.20 assume a forma,

$$\frac{\partial m}{\partial t} = k \cdot \nabla^2 m . \quad (\text{B.21})$$

A equação B.21 é denominada de 2ª Lei de *Fick* para difusão, com coeficiente constante. Escrevendo esta equação na forma aberta, em coordenadas esféricas (cf. BIRD, STEWART e LIGHTFOOT, 1960), obtém-se,

$$\frac{1}{k} \frac{\partial m}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial m}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial m}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 m}{\partial \phi^2} \right] . \quad (\text{B.22})$$

Limitando B.22 ao caso onde a difusão ocorre apenas na direção radial, tem-se,

$$\frac{1}{k} \frac{\mathcal{J}m}{\mathcal{J}t} = \frac{1}{r^2} \left[ \frac{\mathcal{J}l}{\mathcal{J}r} \left( r^2 \frac{\mathcal{J}m}{\mathcal{J}r} \right) \right], \quad (\text{B.23})$$

ou ainda,

$$\frac{1}{k} \frac{\mathcal{J}m}{\mathcal{J}t} = \left( \frac{\mathcal{J}l^2 m}{\mathcal{J}r^2} + \frac{2}{r} \frac{\mathcal{J}m}{\mathcal{J}r} \right). \quad (\text{B.24})$$

### APÊNDICE C

#### RESOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO DE CALOR SEM O TERMO DE ACOPLAMENTO DE UMIDADE.

Resolve-se a equação de difusão de calor sem o termo de acoplamento de umidade, com o objetivo de comparar estes resultados com os resultados obtidos com acoplamento, avaliando portanto a pertinência destes termos de acoplamento e sua influência na secagem de grãos.

A equação da difusão térmica considerada neste trabalho é a mesma obtida do balanço de energia em um corpo esférico isotrópico (cf. APÊNDICE A), ou seja,

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \left( \frac{LeD}{C_p} \right) \cdot \nabla^2 U + \mathbf{a} \cdot \nabla^2 T \quad . \quad (3.4)$$

Ao não se considerar o acoplamento de umidade, despreza-se o termo da umidade, o que torna a equação na forma,

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \mathbf{a} \cdot \nabla^2 T \quad . \quad (C.1)$$

As condições inicial e de contorno também são mudadas para,

$$CI.: \quad r \in a, t = 0 \quad \textcircled{*} \quad T = T_0 \quad , \quad (C.2)$$

$$CC1: \quad r = a \quad , \quad t > 0,$$

$$\textcircled{*} \quad -k_T \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + h_c [T_\infty - T(a)] = 0 \quad . \quad (C.3)$$

$$CC2: \quad r = 0, t > 0,$$

$$\textcircled{*} \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0$$

Daí, a equação de temperatura fica semelhante à equação de umidade, apresentando a mesma solução no contorno (cf. BREBBIA, 1980),

$$C(\mathbf{z}) \mathbb{I}(\mathbf{z}, t_F) -$$

$$a \int_{t_0}^{t_F} [T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) \mathcal{Q}_2(a, t) - T(a, t) \mathcal{Q}_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t)] a^2 dt =$$

$$\int_0^a T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_0) \mathbb{I}(r, t_0) r^2 dr \quad , \quad (C.4)$$

onde:

$$C(\mathbf{z}) = \frac{1}{2}, \quad \mathbf{z} \in \mathbf{G} \quad , \quad C(\mathbf{z}) = 1, \quad \mathbf{z} \in \mathbf{W} \quad ,$$

$$q_2(a, t) = \frac{\int_{\Gamma} (a, t)}{\int_{\Omega}} \quad ,$$

$$q_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) = \frac{\int_{\Gamma}^* (a, \mathbf{z}, t_F, t)}{\int_{\Omega}} \quad ,$$

$$r \in \mathbf{W} \quad ,$$

$$a \in \mathbf{G} .$$

O tratamento numérico da equação (C.4) no contorno, foi feito adotando-se o mesmo tratamento dado à equação com acoplamento, 3.46 e 3.47 na seção 3.3, isto é, a equação C.4 também foi resolvida numericamente utilizando-se uma malha de discretização de 11 nós e usando o método de colocação para resolver o problema na direção radial. No tempo, foi adotado o procedimento de marcha passo a passo (SILVA, 1995), como antes. As variáveis  $T(a, t)$  e  $q_2(a, t)$ , que pertencem apenas ao contorno ( $\mathbf{G}$ ) , foram aproximadas por meio de funções de interpolação lineares no tempo, ou seja,

$$T(a, t) = T(a, t_{F-1})\mathbf{f}_1(t) + T(a, t_F)\mathbf{f}_2(t) \quad , \quad (3.49)$$

$$q_2(a, t) = q_2(a, t_{F-1})\mathbf{f}_1(t) + q_2(a, t_F)\mathbf{f}_2(t) \quad , \quad (3.51)$$

onde:

$$\mathbf{f}_1(t) = \frac{(t_F - t)}{h} ,$$

$$\mathbf{f}_2(t) = \frac{(t - t_{F-1})}{h} ,$$

$$t_{F-1} \leq t < t_F ,$$

e

$$h = t_F - t_{F-1} .$$

Substituindo as equações 3.49 e 3.51 na C.4, adequando os limites de integração para cada intervalo de tempo, vem,

$$\begin{aligned} & C(\mathbf{z}) T(\mathbf{z}, t_F) - \mathbf{a} a^2 [q_2(a, t_{F-1})] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt - \\ & \mathbf{a} a^2 [q_2(a, t_F)] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_2(t) T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt + \\ & \mathbf{a} a^2 [T(a, t_{F-1})] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) q_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt + \\ & \mathbf{a} a^2 [T(a, t_F)] \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_2(t) q_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt = \\ & \int_0^a T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) T(r, t_{F-1}) r^2 dr . \end{aligned} \tag{C.5}$$

Na equação C.5, a incógnita é  $T(\mathbf{z}, t_F)$  e representa a temperatura do grão de soja no instante  $t_F$ , em cada ponto de

discretização do raio.  $T(a, t_F)$  e  $q_2(a, t_F)$  são temperatura e fluxo radial no contorno do grão no instante  $t_F$ , obtidos da condição de contorno;  $T(a, t_{F-1})$  e  $q_2(a, t_{F-1})$  são temperatura e fluxo no contorno já calculados no instante anterior.

Chamando:

$$G_{T1} = a^2 \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt \quad , \quad (3.58)$$

$$G_{T2} = a^2 \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_2(t) T^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt \quad , \quad (3.59)$$

$$H_{T1} = a^2 \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_1(t) q_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt \quad , \quad (3.60)$$

e

$$H_{T2} = a^2 \int_{t_{F-1}}^{t_F} \mathbf{f}_2(t) q_2^*(a, \mathbf{z}, t_F, t) dt \quad , \quad (3.61)$$

e substituindo 3.58 a 3.61 na equação C.5, vem,

$$\begin{aligned}
& C(\mathbf{z}) \mathbb{I}(\mathbf{z}, t_F) - \mathbf{a} G_{T1} q_2(a, t_{F-1}) - \mathbf{a} G_{T2} q_2(a, t_F) + \\
& \mathbf{a} H_{T1} T(a, t_{F-1}) + \mathbf{a} H_{T2} T(a, t_F) = \\
& \int_0^a T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) \mathbb{I}(r, t_{F-1}) r^2 dr \quad . \quad (C.6)
\end{aligned}$$

A equação C.6, apresenta ainda o termo  $T(r, t_{F-1})$  no domínio, que precisa ser discretizado. Para tanto, utilizou-se funções de interpolação quadráticas (SILVA, 1995). O número de elementos, 'e', foi escolhido também igual a 5, conforme representado na Figura 3.4, seção 3.3.

Desta forma, pode-se escrever,

$$T(r, t_{F-1}) = \sum_{e=1}^E [X_1^{(e)} T_{i,F-1} + X_2^{(e)} T_{i+1,F-1} + X_3^{(e)} T_{i+2,F-1}] \quad , \quad (3.65)$$

onde:

$$i = 2(e - 1) + 1 \quad ,$$

$$\mathbf{D}r = \frac{a}{2E - 1} \quad ,$$

$$r_i = (i - 1)\mathbf{D}r \quad ,$$

$$T_{i,F-1} = T(r_i, t_{F-1}) \quad ,$$

$$X_1^{(e)}(r) = \mathbf{j}(r)^{(e)} \left[ \frac{r_{i+1} \cdot r_{i+2}}{\mathbf{D}i} - \frac{(r_{i+1} + r_{i+2})}{\mathbf{D}i} r + \frac{r^2}{\mathbf{D}i} \right] ,$$

$$X_2^{(e)}(r) = \mathbf{j}(r)^{(e)} \left[ \frac{r_i \cdot r_{i+2}}{\mathbf{D}i + 1} - \frac{(r_i + r_{i+2})}{\mathbf{D}i + 1} r + \frac{r^2}{\mathbf{D}i + 1} \right] ,$$

$$X_3^{(e)}(r) = \mathbf{j}(r)^{(e)} \left[ \frac{r_i \cdot r_{i+1}}{\mathbf{D}i + 2} - \frac{(r_i + r_{i+1})}{\mathbf{D}i + 2} r + \frac{r^2}{\mathbf{D}i + 2} \right] ,$$

$$\mathbf{j}(r)^{(e)} = \begin{cases} 0 & \text{se } r < r_i \text{ ou } r > r_{i+2} \\ 1 & \text{se } r_i \leq r \leq r_{i+2} \end{cases} ,$$

$$\mathbf{D}i = (r_{i+1} - r_i) * (r_{i+2} - r_i) ,$$

$$\mathbf{D}i + 1 = (r_i - r_{i+1}) * (r_{i+2} - r_{i+1}) ,$$

$$\mathbf{D}i + 2 = (r_{i+2} - r_{i+1}) * (r_{i+2} - r_i) .$$

Substituindo então 3.65 em C.6 resulta,

$$\mathcal{C}(\mathbf{z}) \mathcal{I}(\mathbf{z}, t_F) - \mathbf{a} G_{T1} q_2(a, t_{F-1}) - \mathbf{a} G_{T2} q_2(a, t_F) +$$

$$\mathbf{a} H_{T1} \mathcal{I}(a, t_{F-1}) + \mathbf{a} H_{T2} \mathcal{I}(a, t_F) =$$

$$\sum_{e=1}^E \int_0^a [X_1^{(e)}, X_2^{(e)}, X_3^{(e)}] \begin{bmatrix} T_{i,F-1} \\ T_{i+1,F-1} \\ T_{i+2,F-1} \end{bmatrix} T^*(\mathbf{a}, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) r^2 dr . \quad (\text{C.7})$$

Fazendo,

$$\sum_{e=1}^E \int_0^a [X_1^{(e)}, X_2^{(e)}, X_3^{(e)}] \begin{bmatrix} T_{i,F-1} \\ T_{i+1,F-1} \\ T_{i+2,F-1} \end{bmatrix} T^*(r, \mathbf{z}, t_F, t_{F-1}) r^2 dr = B_{Ti,F-1} \quad ,$$

e substituindo na equação C.7, tem-se,

$$\begin{aligned} C(\mathbf{z}) T(\mathbf{z}, t_F) - \mathbf{a} G_{T1} q_2(a, t_{F-1}) - \mathbf{a} G_{T2} q_2(a, t_F) + \\ \mathbf{a} H_{T1} T(a, t_{F-1}) + \mathbf{a} H_{T2} T(a, t_F) = B_{Ti,F-1} \quad . \end{aligned} \quad (C.8)$$

Para resolver a equação C.8, definida no domínio  $\mathbf{W}$  e no contorno  $\mathbf{G}$ , adota-se o seguinte procedimento: primeiro, a condição de contorno, C.3, é inserida na equação C.11. Em seguida, coloca-se a formulação integral no contorno, fazendo  $\mathbf{z} = a \hat{\mathbf{I}} \mathbf{G}$ , obtendo-se,

$$\begin{aligned} T(a, t_F) = [\mathbf{a} G_{T1} q_2(a, t_{F-1}) - \mathbf{a} H_{T1} T(a, t_{F-1}) + \\ \frac{\mathbf{a}}{k_T} H_c G_{T2} T_{ar} + B_T(a, t_{F-1})] / \left( \frac{1}{2} + \mathbf{a} H_{T2} + \frac{\mathbf{a}}{k_T} H_c G_{T2} \right) \quad , \end{aligned} \quad (C.9)$$

onde, os valores de  $q_2$  são calculados por meio de,

$$q_2(\mathbf{a}, t_F) = -\frac{h_c}{k_T} [T_{ar} - T(\mathbf{a}, t_F)] . \quad (\text{C.10})$$

Com os valores de  $T$  e  $q_2$  determinados no contorno, os valores no domínio podem ser obtidos por meio da equação,

$$T(\mathbf{z}, t_F) = \mathbf{a}G_{T1}(\mathbf{z}) q_2(\mathbf{a}, t_{F-1}) + \mathbf{a}G_{T2}(\mathbf{z}) q_2(\mathbf{a}, t_F) - \mathbf{a}H_{T1}(\mathbf{z}) T(\mathbf{a}, t_{F-1}) - \mathbf{a}H_{T2}(\mathbf{z}) T(\mathbf{a}, t_F) + B_{Ti, F-1}(\mathbf{z}) , \quad (\text{C.11})$$

onde os coeficientes  $G_{T1}$ ,  $G_{T2}$ ,  $H_{T1}$ ,  $H_{T2}$  e  $B_{Ti, F-1}$  são calculados pelas equações 3.83, 3.84, 3.85, 3.86 e 3.88, já mencionadas no item 3.5.

## APÊNDICE D

### OBTENÇÃO DA SOLUÇÃO FUNDAMENTAL EM COORDENADAS ESFÉRICAS.

Neste apêndice é obtida a solução fundamental em coordenadas esféricas partindo-se da solução em coordenadas cartesianas, deduzida por CARSLAW & JAEGER, (1959).

Seja  $L$  o operador diferencial definido operacionalmente por,

$$L(.) = \nabla^2(.) - \frac{1}{k} \frac{\mathcal{I}(.)}{\mathcal{I}t} , \quad (\text{D.1})$$

onde:

$k = a =$  constante, para equação do balanço de energia,

$k = D =$  constante, para equação do balanço de massa.

Como pode ser mostrado, o operador adjunto de  $L$  é o operador  $L^*$ , na forma,

$$L^*(\cdot) = \nabla^2(\cdot) + \frac{1}{k} \frac{\mathfrak{f}(\cdot)}{\mathfrak{f}t} . \quad (\text{D.2})$$

Uma função  $v$ , solução da equação expressa por,

$$L^*(v) = \nabla^2(v) + \frac{1}{k} \frac{\mathfrak{f}(v)}{\mathfrak{f}t} = \mathbf{d}(\mathbf{h}, \mathbf{z}) , \quad (\text{D.3})$$

onde:

$\mathbf{h}$  e  $\mathbf{z}$  são coordenadas do domínio  $W$ ,

$\mathbf{d}(\mathbf{h}, \mathbf{z})$  é a distribuição de Dirac aplicada em ' $\mathbf{h}-\mathbf{z}$ ',

é denominada de *solução fundamental* do operador adjunto  $L^*$ .

Em coordenadas cartesianas, a equação D.3 se torna,

$$L^*(v) = \frac{\mathfrak{f}^2 v}{\mathfrak{f}k^2} + \frac{\mathfrak{f}^2 v}{\mathfrak{f}y^2} + \frac{\mathfrak{f}^2 v}{\mathfrak{f}z^2} + \frac{1}{k} \frac{\mathfrak{f}v}{\mathfrak{f}t} = \mathbf{d}(\mathbf{h}, \mathbf{z}) . \quad (\text{D.4})$$

A solução fundamental  $v$  do operador  $L^*$ , definido pela equação D.4, segundo CARSLAW & JAEGER, (1959), é dada por,

$$v = \frac{P}{8(\rho k t)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[-\frac{\left[(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2\right]}{4 * k * t}\right] \quad (\text{D.5})$$

onde:

$P$  - intensidade do potencial aplicado,

$t=(t-t_0)$  - tempo considerado,

$\mathbf{h} = (x', y', z')$  - são as coordenadas do ponto de aplicação do potencial,

$\mathbf{z} = (x, y, z)$  - são as coordenadas onde se deseja a solução.

Quando  $t \rightarrow 0$ , 'v' tende para zero em todos os pontos exceto no ponto de coordenada  $x', y', z'$ , onde cresce infinitamente.

Em difusão, esta solução fundamental pode ser interpretada como a resposta no instante  $t > t_0$  no ponto de coordenadas  $x, y, z$  de um potencial instantâneo de intensidade infinita, aplicado no instante  $t = t_0$ , no ponto de coordenadas  $x', y', z'$ .

Partindo da solução da equação de difusão em coordenadas cartesianas (EQUAÇÃO D.5),

$$v = \frac{P}{8(\rho kt)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{d^2}{4kt}} , \quad (\text{D.6})$$

onde:

$d$  - distância entre os pontos  $\mathbf{h}$  e  $\mathbf{z}$ ,

sabendo-se que em coordenadas esféricas,

$$d^2 = \mathbf{h}^2 + \mathbf{z}^2 - 2\mathbf{z}\mathbf{h} \cdot \cos \mathbf{q}' ,$$

onde:  $\mathbf{q}'$  é o ângulo formado pelos vetores posição dos pontos  $\mathbf{h}$   
e  $\mathbf{z}$ ,

considerando,

$$P' = P \cdot \mathbf{z} \cdot \sin \mathbf{q}' \, d\mathbf{q}' \, d\mathbf{f}' ,$$

no ponto de coordenadas  $\mathbf{z}$ ,  $\mathbf{q}'$ ,  $\mathbf{f}'$  na esfera e integrando em  $\mathbf{f}'$ ,  
vem,

$$v = \frac{2pz}{8(kt)^{\frac{3}{2}}} \int_0^p e^{-\frac{(h^2+z^2-2zh \cos q')}{4kt}} \operatorname{sen} q' dq' \quad , \quad (\text{D.7})$$

ou seja,

$$v = \frac{pz}{4p^{0.5}(kt)^{1.5}} e^{-\frac{(h^2+z^2)p}{4kt}} \int_0^p e^{-\frac{zh \cos q'}{2kt}} \operatorname{sen} q' dq' \quad , \quad (\text{D.8})$$

onde:  $m = \cos q'$  ,

então,

$$dm = d(\cos q') = -\operatorname{sen} q' dq' .$$

Analisando os limites de integração tem-se,

$$q' \hat{I} (0, p), \text{ enquanto que, } m \hat{I} (1, -1).$$

Fazendo a troca de variável proposta, a equação D.8, fica sendo,

$$v = \frac{Pz}{4p^{0.5}(kt)^{1.5}} e^{-\frac{(h^2+z^2)}{4kt}} \int_{-1}^{+1} e^{-\left(\frac{zh}{2kt}\right)m} (-dm) \quad . \quad (D.9)$$

Resolvendo a integral, tem-se que,

$$\int_{-1}^{+1} e^{am} dm = \frac{1}{a} e^{am} \Big|_{-1}^{+1} = \frac{e^a}{a} - \frac{e^{-a}}{a} = \frac{e^a - e^{-a}}{a} \quad . \quad (D.10)$$

Fazendo as substituições necessárias em D.9, resulta,

$$v = \frac{Pze^{-\frac{(h^2+z^2)}{4kt}}}{4p^{0.5}(kt)^{1.5}} \cdot \frac{e^{\left(\frac{hz}{2kt}\right)} - e^{-\left(\frac{hz}{2kt}\right)}}{\left(\frac{hz}{2kt}\right)} \quad , \quad (D.11)$$

que após simplificações fornece,

$$v = \frac{P}{2hz(pk)^{0.5}} \left[ e^{-\frac{(h^2+z^2)}{4kt}} \cdot e^{\frac{hz}{2kt}} - e^{-\frac{(h^2+z^2)}{4kt}} \cdot e^{-\frac{hz}{2kt}} \right] \quad , \quad (D.12)$$

ou ainda,

$$v = \frac{P}{2hz(\rho kt)^{0.5}} \left[ e^{-\frac{(h-z)^2}{4kt}} - e^{-\frac{(h+z)^2}{4kt}} \right] . \quad (\text{D.13})$$

Para o caso em questão, supõe-se que  $P$  é unitário. Daí finalmente,

$$v = \frac{1}{2hz(\rho kt)^{0.5}} \left[ e^{-\frac{(h-z)^2}{4kt}} - e^{-\frac{(h+z)^2}{4kt}} \right] . \quad (\text{D.14})$$