



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE
PROCESSOS**

**DIFUSÃO 3D EM SÓLIDOS COM FORMA ARBITRÁRIA
USANDO COORDENADAS GENERALIZADAS**

AUTORA: Vera Solange de Oliveira Farias

ORIENTADORES: Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima
Prof. Dr. Wilton Pereira da Silva

Campina Grande, PB, abril de 2011

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE
PROCESSOS

DIFUSÃO 3D EM SÓLIDOS COM FORMA ARBITRÁRIA
USANDO COORDENADAS GENERALIZADAS

Tese de Doutorado submetida à Coordenação do Curso de Doutorado em Engenharia de Processos da Universidade Federal de Campina Grande como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Doutor em Engenharia de Processos.

AUTORA: Vera Solange de Oliveira Farias

ORIENTADORES: Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima
Prof. Dr. Wilton Pereira da Silva

Campina Grande – Paraíba

Abril, 2011

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

F224d Farias, Vera Solange de Oliveira.

Difusão 3D em sólidos com forma arbitrária usando coordenadas generalizadas / Vera Solange de Oliveira Farias. - Campina Grande, 2011. 265 f. : il. color.

Tese (Doutorado em Engenharia de Processos) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia.

Referências.

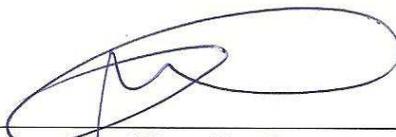
Orientadores : Prof. Dr. Wilton Pereira da Silva, Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima.

1. Regime Transiente. 2. Geometrias Complexas. 3. Coordenadas Generalizadas. 4. Materiais Porosos. 5. Volumes Finitos. 6. Malha Tridimensional Estruturada. 7. Malha não-Ortogonal. 8. Programa para Secagem. I. Título.

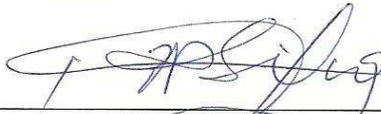
CDU - 004.414.23:66.047.41(043)

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA TESE DE DOUTORADO DE
VERA SOLANGE DE OLIVEIRA FARIAS APRESENTADA AO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS
DO CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DE CAMPINA GRANDE.

Tese de Doutorado **aprovada com distinção** em 29 de Abril de 2011



Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima
ORIENTADOR - UFCG/CCT/UAEM



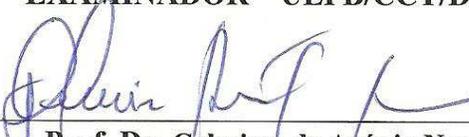
Prof. Dr. Wilton Pereira da Silva
ORIENTADOR - UFCG/CCT/DF



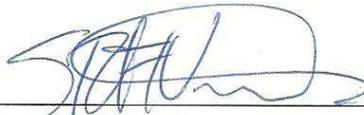
Prof. Dr. Jorge Recarte Heriquez Guerrero
EXAMINADOR - UFPE/CTG/DEMEC



Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira
EXAMINADOR - UEPB/CCT/DEQ



Prof. Dr. Gelmires de Araújo Neves
EXAMINADOR - UFCG/CCT/UAEMa



Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto
EXAMINADOR - UFCG/CCT/UAEQ

Campina Grande, Abril de 2011.
PB, Brasil

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia de Processos, defendida por Vera Solange de Oliveira Farias e aprovada pela banca em 29 de abril de 2011.

Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima (Orientador)
UFCG/ CCT/UAEM

Prof. Dr. Wilton Pereira da Silva (Orientador)
UFCG/ CCT/UAF

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho:

A Deus, todo poderoso, por ter me concedido a oportunidade de realizá-lo, dando-me sabedoria, coragem, humildade e principalmente perseverança nas adversidades encontradas pelo caminho.

A meus queridos e amados filhos Aline Maria de Oliveira Rocha, Caio Arlindo de Oliveira Rocha e Paula Isabella de Oliveira Rocha pelo carinho, amor e principalmente pela compreensão de minha ausência nos momentos dedicados a este trabalho.

A meu querido e amado esposo, Vicente de Paula Teixeira Rocha, cúmplice e companheiro de todas as horas, pelo apoio, incentivo e principalmente pela força nos momentos de desânimo.

A meus queridos e amados pais Antônio Lopes de Farias (*in memoriam*) e Maria Alice de Farias, pelo apoio incondicional durante toda a minha trajetória de vida, sempre priorizando a busca do conhecimento.

A meus queridos e amados irmãos Hamilton de Oliveira Farias (*in memoriam*), Norma Suely de Oliveira Farias, Wellington de Oliveira Farias, Jeane Valéria de Oliveira Farias, Sheila Verônica de Oliveira Farias e Shirley Cristina de Oliveira Farias, pelo convívio alegre e salutar que sempre tivemos e pelo valioso apoio, principalmente nos momentos difíceis da minha vida.

A meus queridos e amados sobrinhos Túlio, Ítalo, Larissa, Gabriel, Júlia e Letícia pela demonstração de carinho e afeto que sempre demonstraram em nossos encontros.

A toda minha família de um modo geral e a família do meu esposo, a qual abracei como minha.

AGRADECIMENTOS

Ao meu esposo Vicente de Paula Teixeira Rocha e aos meus filhos Aline Maria de Oliveira Rocha, Caio Arlindo de Oliveira Rocha e Paula Isabella de Oliveira Rocha pelo incentivo e apoio logístico, sem o qual seria impossível a realização desta pesquisa.

À minha família de um modo geral (mãe, irmãos, sobrinhos, cunhados e demais parentes) que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

Ao meu orientador Professor Dr. Wilton Pereira da Silva, pela valiosa orientação, paciência ao tirar minhas dúvidas, incentivo, dedicação e principalmente por ter acreditado na minha capacidade de realizar este trabalho.

Ao meu orientador Professor Dr. Antônio Gilson Barbosa de Lima, pelo seu valioso conhecimento e sua grande experiência, imprescindíveis para a realização deste trabalho.

Ao Professor Dr. Gelmires de Araújo Neves, que esteve sempre ao nosso dispor, oferecendo seus vastos conhecimentos, informações importantes e principalmente pelo suporte na conformação das amostras de telhas cerâmicas.

Ao Professor Dr. Romualdo Rodrigues Menezes, que gentilmente nos cedeu os resultados dos ensaios realizados para caracterizar a amostra de argila, que foi utilizada na conformação das telhas.

Aos membros da banca examinadora, os professores doutores Antônio Gilson Barbosa de Lima, Fernando Fernandes Vieira, Gelmires de Araújo Neves, Jorge Recarte Henriquez Guerrero, Severino Rodrigues de Farias Neto, Wilton Pereira da Silva, por disponibilizaram seu precioso tempo para a avaliação deste trabalho, contribuindo significativamente para a melhoria do mesmo.

Aos meus colegas de doutorado, com os quais compartilhei várias horas de estudo. Em especial a Cleide Maria Diniz Pereira da Silva e Silva, Jossyl Amorim Ribeiro e Flávio César Nunes, com o quais cursei várias disciplinas.

Aos meus professores Antônio Gilson Barbosa de Lima (Matemática aplicada à Engenharia de Processos, Escoamento em Meios Porosos, Seminário I e II), Wilton Pereira da Silva (Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional I e II, Introdução ao Visual Fortran, Seminário I e II), João Evangelista Franco do Carmo (Fenômenos de Transportes), Mário Eduardo R. M. Cavalcanti da Mata (Secagem de Produtos Agroindustriais), Marcelo Grilo (Termodinâmica), Gelmires Araújo Neves e Lisiane Navarro de Lima Santana (Processamento de Materiais Cerâmicos).

À coordenação do Programa de Pós Graduação em Engenharia de Processos, na pessoa do Professor Dr. Flávio Honorato, substituído pelo Prof. Dr. Antônio Gilson Barbosa de Lima no período de realização deste trabalho, pelo apoio e atenção.

Aos órgãos CAPES, CNPq, CT Brasil, CTPETRO, FINEP, PETROBRÁS e ANP, pelo apoio a projetos de pesquisas liderados pelo Professor Dr. Antônio Gilson Barbosa de Lima.

Ao meu amigo Wilton Pereira da Silva, pela disponibilização dos seus softwares e pelo permanente estímulo e apoio, o que muito contribuiu para a conclusão deste trabalho.

À minha amiga Cleide Maria Diniz Pereira da Silva e Silva, sempre pronta a ajudar, principalmente pelo apoio quando aconteceu meu afastamento da UFCG e também pela revisão do texto.

Ao meu amigo Jossyl Amorim Ribeiro, sempre muito prestativo, o que me ajudou muito, principalmente no processo de secagem das telhas cerâmicas.

Ao Instituto de Ciência e Tecnologia da Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, na pessoa do Professor Dr. Paulo César de Resende Andrade pelo apoio e compreensão quando precisei me afastar das atividades acadêmicas para poder dar continuidade à realização deste trabalho.

A Karenina Valadares, pela valiosa contribuição em alguns desenhos deste trabalho.

A todos que contribuíram direta ou indiretamente, na realização deste trabalho, meu muito obrigado.

“Se fui capaz de enxergar um pouco mais adiante do que outros homens, foi porque me apoiei em ombros de gigantes”.

Isaac Newton

ÍNDICE

LISTA DE FIGURAS.....	xv
LISTA DE TABELAS.....	xxx
NOMENCLATURA.....	xxxiv
RESUMO.....	xxxix
ABSTRACT.....	xl
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	6
2.1 Modelo de difusão aplicado ao processo de secagem.....	9
2.1.1 Aspectos gerais da secagem.....	9
2.1.2 Algumas aplicações da secagem.....	12
2.1.2.1 Secagem de produtos agrícolas.....	12
2.1.2.2 Secagem de produtos cerâmicos.....	14
2.2 O problema geral de transporte e a equação de difusão.....	19
2.2.1 Transporte: equações de conservação.....	20
2.2.2 A equação de difusão.....	21
2.3 Soluções para a equação de difusão.....	23
2.3.1 Soluções analíticas para a equação de difusão.....	24
2.3.1.1 Condição de contorno de equilíbrio.....	26
2.3.1.2 Condição de contorno convectiva.....	29
2.3.2 Soluções numéricas para a equação de difusão.....	33
2.4 Sistemas de eixos em coordenadas generalizadas.....	43
2.4.1 Comprimentos, áreas e volumes em coordenadas generalizadas.....	46

2.4.1.1 Comprimento ao longo de um eixo curvilíneo.....	47
2.4.1.2 Área definida por vetores elementares sobre eixos curvilíneos.....	48
2.4.1.3 Volume definido por vetores elementares sobre eixos curvilíneos.....	49
CAPÍTULO 3 – MATERIAL E MÉTODOS.....	52
3.1 Fluxo de uma grandeza através de uma área curvilínea elementar.....	52
3.2 Generalização para cálculos de volumes, áreas e distâncias em coordenadas generalizadas: interseção dos vetores elementares no ponto nodal.....	54
3.2.1 Volumes e áreas de figuras irregulares.....	55
3.2.2 Distância da face oeste ao ponto nodal P.....	58
3.3 Transformação da equação de conservação.....	60
3.4 Discretização da equação de difusão.....	62
3.4.1 Linearização do termo fonte.....	63
3.4.2 Integração das equações.....	64
3.4.3 Volumes de controle internos.....	67
3.4.3.1 Derivadas.....	67
3.4.3.2 Equação de difusão na forma discretizada (volumes internos).....	69
3.4.3.3 Coordenadas dos pontos nodais.....	73
3.4.3.4 Métricas nas faces dos volumes de controle.....	74
3.4.3.5 Coordenadas dos pontos médios das faces.....	75
3.4.3.6 Métricas no ponto nodal P.....	76
3.4.4 Volumes de controle na fronteira: condição de contorno convectiva.....	76
3.4.4.1 Fluxo e derivadas.....	77
3.4.4.2 Equação de difusão na forma discretizada (volumes de fronteira).....	80
3.5 Discretização do valor médio da variável de interesse ($\bar{\Phi}$).....	83
3.6 Avaliação de Γ^Φ nas faces dos volumes de controle.....	85
3.7 Determinação dos parâmetros de transporte Γ^Φ e h a partir de um conjunto de dados experimentais – processo de otimização.....	87
3.7.1 Cálculo do qui-quadrado relativo a uma simulação numérica.....	88
3.8 Metodologia computacional.....	90
3.8.1 Validação do código computacional desenvolvido.....	92

3.9 Softwares utilizados neste trabalho.....	94
3.10 Aplicação do código computacional desenvolvido à secagem de sólidos cerâmicos.....	95
3.11 Metodologia experimental.....	95
3.11.1 Matéria-prima.....	95
3.11.2 Conformação e secagem das telhas cerâmicas.....	96
3.12 Considerações gerais.....	99
CAPÍTULO 4 – RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	101
4.1 Validação do código computacional usando soluções analíticas da equação de difusão.....	102
4.1.1 Validação usando solução analítica para uma parede infinita: valor médio de Φ	102
4.1.2 Validação usando solução analítica para um paralelepípedo: valor médio de Φ	107
4.2 Validação do código computacional usando soluções numéricas da equação de difusão.....	110
4.2.1 Malha unidimensional: valor médio e distribuição espacial em uma parede infinita com propriedades físicas constantes.....	110
4.2.2 Malha tridimensional: valor médio e distribuição espacial em um paralelepípedo.....	121
4.2.2.1 Testes de consistência através da análise de Φ para uma geometria cúbica...	122
4.2.2.2 Validação do código computacional desenvolvido para um paralelepípedo...	127
4.2.3 Malhas estruturadas tridimensionais e não-ortogonais.....	137
4.2.3.1 Sólido gerado a partir da extrusão de um losango.....	138
4.2.3.2 Sólido gerado a partir da extrusão de um círculo.....	156
4.2.4 Validação da solução numérica considerando dimensões e difusividade variáveis.....	171
4.3 Uma aplicação à secagem de sólidos cerâmicos.....	180
4.3.1 Dados experimentais.....	180
4.3.2 Resultados da análise da cinética de secagem para telhas cerâmicas usando a solução numérica proposta.....	186
4.3.2.1 Refinamento de malha e de tempo.....	187

4.3.2.2	Análise numérica considerando difusividade efetiva e volume constantes.....	189
4.3.2.3	Análise numérica considerando difusividade efetiva e volume variáveis.....	201
4.3.2.3.1	Expressões para as dimensões das telhas.....	201
4.3.2.3.2	Expressão para a difusividade efetiva de massa.....	210
4.3.2.3.3	Secagem a 55,6 °C.....	212
4.3.2.3.4	Secagem a 69,7; 82,7 e 98,6 °C.....	220
CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....		244
5.1	Conclusões.....	244
5.1.1	Implementação do código computacional desenvolvido.....	244
5.1.2	Resultados experimentais.....	246
5.2	Sugestões para trabalhos futuros.....	248
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....		251

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2.1	Convecção na fronteira: condição de contorno de Cauchy.....	30
FIGURA 2.2	Sistemas de eixos utilizados para especificar a localização do ponto P em coordenadas cartesianas e em coordenadas generalizadas.....	43
FIGURA 2.3	Destaque para um comprimento elementar ΔL_ξ ao longo do eixo curvilíneo ξ	47
FIGURA 2.4	Área elementar ΔS definida pelos vetores elementares ΔL_ξ e ΔL_η	48
FIGURA 2.5	Paralelepípedo regular de volume elementar ΔV com arestas ΔL_ξ , ΔL_η e ΔL_γ	50
FIGURA 3.1	Área curvilínea situada no plano definido pelas linhas η e γ ($\xi = \text{cte}$), a grandeza \vec{G} e a sua componente na direção normal, G_n	53
FIGURA 3.2	Sólido de volume elementar ΔV com arestas ΔL_ξ , ΔL_η e ΔL_γ no domínio transformado: produto misto dos vetores que se interceptam no ponto nodal.....	55
FIGURA 3.3	Quadrilátero de área elementar ΔS com lados ΔL_η e ΔL_γ no plano transformado $\eta\gamma$: módulo do produto vetorial dos vetores que se cruzam no centro do plano.....	56
FIGURA 3.4	Volume de controle interno destacando a face oeste no domínio transformado, delimitados pelos planos $\xi = i$, $\xi = i+1$, $\eta = j$, $\eta = j+1$, $\gamma = k$ e $\gamma = k+1$	58
FIGURA 3.5	Perfil de um volume de controle interno de um sólido com geométrica arbitrária no domínio físico.....	59
FIGURA 3.6	Aspecto geométrico da transformação de coordenadas: (a) Sólido no domínio físico arbitrário; (b) Mapeamento do sólido no domínio transformado.....	65
FIGURA 3.7	Volumes de controle diferenciados quanto à localização numa	

	malha tridimensional no domínio transformado.....	66
FIGURA 3.8	Volume de controle interno com ponto nodal P e seus dezoito vizinhos.....	66
FIGURA 3.9	Volume de controle interno delimitado pelos planos $\xi = i, \xi = i+1, \eta = j, \eta = j+1, \gamma = k$ e $\gamma = k+1$	73
FIGURA 3.10	Ponto nodal P localizado na fronteira oeste interna e seus vizinhos.....	77
FIGURA 3.11	(a) Volume de controle localizado na fronteira oeste do domínio transformado; (b) Perfil do contorno oeste.....	77
FIGURA 3.12	Dois volumes de controle com Γ^Φ igual a: (a) Γ_P^Φ e Γ_W^Φ ; (b) Γ_{eq}^Φ	86
FIGURA 3.13	Esquema para o cálculo de $\bar{\Phi}^{sim}$ por interpolação linear.....	89
FIGURA 3.14	Amostras de telhas cerâmicas utilizadas nesta pesquisa.....	97
FIGURA 3.15	Identificando a largura e a espessura da telha.....	98
FIGURA 3.16	Medindo o comprimento da telha.....	98
FIGURA 3.17	Disposição das telhas no interior da estufa.....	99
FIGURA 4.1	Esquema (fora de escala) do paralelepípedo usado na simulação de uma parede infinita.....	103
FIGURA 4.2	Superposição das soluções obtidas via método numérico proposto para $\bar{\Phi}$ em uma parede infinita com condição de contorno prescrita para duas malhas (33 VC e 25 VC).....	104
FIGURA 4.3	Superposição das soluções obtidas via método numérico proposto para o valor médio $\bar{\Phi}$ em uma parede infinita com condição de contorno convectiva para duas discretizações no tempo ($\Delta t = 0,2725$ min e 2000 passos; $\Delta t = 0,13625$ min e 4000 passos).....	105
FIGURA 4.4	Superposição das soluções obtidas via método numérico proposto e via método analítico para o valor médio $\bar{\Phi}$ em uma parede infinita com condição de contorno prescrita.....	106
FIGURA 4.5	Superposição das soluções obtidas via método numérico proposto	

	e via método analítico para o valor médio $\bar{\Phi}$ em uma parede infinita com condição de contorno convectiva.....	107
FIGURA 4.6	Paralelepípedo (fora de escala) usado na validação da solução numérica proposta para a equação de difusão tridimensional via solução analítica: (a) domínio físico; (b) domínio computacional..	108
FIGURA 4.7	Superposição das soluções obtidas via método numérico proposto e via método analítico para o valor médio $\bar{\Phi}$ em um paralelepípedo com condição de contorno prescrita.....	109
FIGURA 4.8	Superposição das soluções obtidas via método numérico proposto e via método analítico para o valor médio $\bar{\Phi}$ em um paralelepípedo com condição de contorno convectiva.....	109
FIGURA 4.9	Geometria unidimensional usada para validar o código computacional proposto via solução numérica: (a) discretização tridimensional; (b) aproximação unidimensional.....	111
FIGURA 4.10	Superposição dos transientes de Φ , numa parede infinita, para os volumes de controle representados pelos nós 1 e 33 para condição de contorno prescrita.....	112
FIGURA 4.11	Superposição dos transientes de Φ , numa parede infinita, para os volumes de controle representados pelos nós 1 e 33 para condição de contorno convectiva.....	113
FIGURA 4.12	Distribuição espacial de Φ , numa parede infinita, para condição de contorno prescrita em $t = 27,25$ min.....	113
FIGURA 4.13	Distribuição espacial de Φ , numa parede infinita, para condição de contorno convectiva em $t = 27,25$ min.....	115
FIGURA 4.14	Superposição da distribuição espacial de Φ numa parede infinita, para condição de contorno prescrita e condição de contorno convectiva em $t = 27,25$ min.....	115
FIGURA 4.15	Superposição dos gráficos da distribuição espacial de Φ obtida com o programa computacional desenvolvido e via software 1D Heat Transfer, para condição de contorno convectiva, numa parede infinita em $t = 27,25$ min.....	117

FIGURA 4.16	Transiente de Φ , numa parede infinita, para o nó 1 empregando a condição de contorno prescrita: superposição das soluções obtidas com o programa computacional desenvolvido e com o software 1D Heat Transfer.....	118
FIGURA 4.17	Transiente de Φ , numa parede infinita, para o nó 1, empregando a condição de contorno convectiva: superposição das soluções obtidas com o código computacional desenvolvido e com o software 1D Heat Transfer.....	118
FIGURA 4.18	Transiente de Φ , numa parede infinita, para o nó central delimitado pelas linhas $\xi = 17$ e $\xi = 18$ empregando a condição de contorno prescrita: superposição das soluções obtidas com o código computacional proposto e com o software 1D Heat Transfer.....	119
FIGURA 4.19	Transiente de Φ , numa parede infinita, para o nó central delimitado pelas linhas $\xi = 17$ e $\xi = 18$, empregando a condição de contorno convectiva: superposição das soluções obtidas com o programa computacional desenvolvido e com o software 1D Heat Transfer.....	120
FIGURA 4.20	Transiente do valor médio de Φ para uma parede infinita com condição de contorno prescrita: superposição das soluções obtidas com o programa computacional desenvolvido e com o software 1D Heat Transfer.....	120
FIGURA 4.21	Transiente do valor médio de Φ , numa parede infinita com condição de contorno convectiva: superposição das soluções obtidas com o programa computacional desenvolvido e com o software 1D Heat Transfer.....	121
FIGURA 4.22	Geometria cúbica utilizada para testar a consistência da solução numérica proposta (a) domínio físico; (b) domínio transformado...	122
FIGURA 4.23	Transientes de Φ nos pontos nodais dos volumes de controle localizados no centro de cada face de uma geometria cúbica para a condição de contorno convectiva.....	124

FIGURA 4.24	Geometria cúbica discretizada: destaque para os volumes de controle localizados nos vértices do cubo.....	125
FIGURA 4.25	Geometria cúbica: transientes de Φ nos nós dos volumes de controle localizados nos vértices do cubo destacados na Figura 4.24.....	126
FIGURA 4.26	Paralelepípedo utilizado para validação do código computacional desenvolvido.....	127
FIGURA 4.27	Transientes de Φ para volumes de controle localizados no centro das faces oeste e leste do paralelepípedo da Figura 4.26.....	130
FIGURA 4.28	Transientes de Φ para volumes de controle localizados no centro das faces norte e sul do paralelepípedo da Figura 4.26.....	131
FIGURA 4.29	Transientes de Φ para volumes de controle localizados no centro das faces atrás e frente do paralelepípedo da Figura 4.26.....	131
FIGURA 4.30	Superposição dos transientes de Φ obtidos pelo programa desenvolvido e pelo software Diffusion RE em um paralelepípedo, para um volume de controle identificado por ($\xi = 16, \eta = 16, \gamma = 16$).....	132
FIGURA 4.31	Superposição dos transientes de Φ obtidos pelo programa desenvolvido e pelo software Diffusion RE em um paralelepípedo, para um volume de controle identificado por ($\xi = 1, \eta = 1, \gamma = 16$).....	133
FIGURA 4.32	Transiente do valor médio de Φ para o plano central do paralelepípedo delimitado pelos planos $\gamma = 16$ e $\gamma = 17$: superposição das soluções obtidas com o programa computacional desenvolvido e com o Diffusion RE.....	134
FIGURA 4.33	Paralelepípedo com eixos trocados para testar as conexões $\xi \eta \gamma$ do código computacional desenvolvido.....	134
FIGURA 4.34	Transiente de Φ em um volume de controle do paralelepípedo da Figura 4.33, identificado por $\xi = 16, \eta = 16, \gamma = 16$ obtido com as duas soluções numéricas.....	136
FIGURA 4.35	Transiente de Φ em um volume de controle do paralelepípedo da	

	Figura 4.33, identificado por $\xi = 32, \eta = 16, \gamma = 16$ obtido com as duas soluções numéricas.....	136
FIGURA 4.36	Transiente do valor médio de Φ para o plano central do paralelepípedo apresentado na Figura 4.33: superposição das duas soluções.....	137
FIGURA 4.37	Sólido (fora de escala) usado na validação do programa desenvolvido para malhas não-ortogonais: (a) malha bidimensional que gerou o sólido; (b) sólido gerado pela extrusão de um losango.....	139
FIGURA 4.38	Plano central do sólido usado para validação do código computacional proposto com destaque para os volumes de controle localizados nos cantos da diagonal menor.....	140
FIGURA 4.39	Superposição dos transientes de Φ nos nós referentes aos volumes de controle localizados nos cantos da diagonal menor do plano central da Figura 4.37.....	141
FIGURA 4.40	Plano central do sólido usado para validação do código computacional desenvolvido com destaque para os volumes de controle localizados nos cantos da diagonal maior.....	141
FIGURA 4.41	Superposição dos transientes de Φ , num losango, nos nós referentes aos volumes de controle localizados nos cantos da diagonal maior do plano central do sólido.....	142
FIGURA 4.42	Transientes de Φ , num losango, para os volumes de controle identificados por $(\xi = 16, \eta = 1, \gamma = 17)$ e $(\xi = 17, \eta = 32, \gamma = 17)$, localizados no plano central do sólido.....	142
FIGURA 4.43	Transientes de Φ , num losango, para volumes de controle internos correspondentes e identificados por $(\xi = 16, \eta = 16, \gamma = 17)$ e $(\xi = 17, \eta = 17, \gamma = 17)$ localizados no plano central do sólido em estudo.....	143
FIGURA 4.44	Resultados dos transientes de Φ obtidos com o código computacional desenvolvido para um volume de controle localizado no meio do sólido, outro no canto da diagonal menor e	

	mais um, no canto da diagonal maior.....	144
FIGURA 4.45	Distribuição espacial de Φ sobre o plano central do sólido analisado: (a) $t = 0$ min; (b) $t = 10$ min; (c) $t = 20$ min; (d) $t = 40$ min; (e) $t = 70$ min; (f) $t = 110$ min e (g) $t = 200$ min.....	148
FIGURA 4.46	Superposição do transiente do volume de controle ($\xi = 1, \eta = 32, \gamma = 17$) obtido pelas duas soluções numéricas: programa desenvolvido e software Diffusion RE.....	149
FIGURA 4.47	Superposição do transiente do volume de controle ($\xi = 1, \eta = 1, \gamma = 17$) obtido pelas duas soluções numéricas: programa desenvolvido e software Diffusion RE.....	149
FIGURA 4.48	Transiente do nó ($\xi = 16, \eta = 16, \gamma = 17$) obtido pelas duas soluções numéricas: programa desenvolvido e software Diffusion RE.....	150
FIGURA 4.49	Transiente do valor médio de Φ para o plano central do sólido que possui a seção transversal na forma de um losango.....	150
FIGURA 4.50	Sólido (fora de escala) obtido a partir da extrusão de um losango ao longo do eixo y.....	151
FIGURA 4.51	Malha da seção transversal do sólido sob estudo, destacando o volume de controle que teve seu transiente analisado.....	152
FIGURA 4.52	Superposição dos transientes de Φ obtidos com o programa desenvolvido para volumes de controle correspondentes localizados nas faces norte e sul.....	152
FIGURA 4.53	Distribuição espacial de Φ sobre o plano localizado na fronteira sul do sólido analisado: (a) $t = 10$ min; (b) $t = 20$ min; (c) $t = 40$ min e (d) $t = 70$ min.....	153
FIGURA 4.54	Superposição do transiente do volume de controle ($\xi = 17, \eta = 17, \gamma = 17$) obtido pelas duas soluções numéricas: programa desenvolvido e software Diffusion RE.....	154
FIGURA 4.55	Superposição do transiente do volume de controle ($\xi = 32, \eta = 17, \gamma = 32$) obtido pelas duas soluções numéricas: programa desenvolvido e software Diffusion RE.....	155

FIGURA 4.56	Transiente do valor médio de Φ para o plano central do sólido obtido a partir da extrusão, ao longo do eixo y , de um losango no plano xz	155
FIGURA 4.57	Esquema (fora de escala) para gerar um cilindro finito (a) Malha circular utilizada para gerar o cilindro finito: (b) Cilindro finito obtido a partir da extrusão de uma malha circular.....	157
FIGURA 4.58	Malha circular localizada no plano frontal do sólido, com destaque para os volumes de controle que tiveram seus transientes analisados.....	158
FIGURA 4.59	Superposição dos transientes, em volumes de controle de um cilindro finito, identificados por $(\xi = 16, \eta = 1, \gamma = 31)$ e $(\xi = 16, \eta = 30, \gamma = 31)$	159
FIGURA 4.60	Malha circular localizada no plano central do sólido, com destaque para os volumes de controle que tiveram seus transientes analisados.....	159
FIGURA 4.61	Superposição dos transientes em volumes de controle num cilindro finito, identificados por $(\xi = 16, \eta = 17, \gamma = 16)$ e $(\xi = 16, \eta = 14, \gamma = 16)$	160
FIGURA 4.62	Transientes de Φ para um volume de fronteira e para um volume no meio do sólido, obtidos com o programa computacional desenvolvido.....	160
FIGURA 4.63	Distribuição espacial de Φ sobre o plano central do cilindro finito: a) $t = 0$ s; b) $t = 21924$ s; c) $t = 43848$ s; d) $t = 109620$ s; e) $t = 164430$ s e f) $t = 219240$ s.....	161
FIGURA 4.64	Malha retangular usada na geração de um cilindro finito.....	162
FIGURA 4.65	Superposição dos transientes do valor médio de Φ para um cilindro finito obtidos com o programa desenvolvido e com o Diffusion RE.....	163
FIGURA 4.66	Superposição das curvas da distribuição radial de Φ para um cilindro finito no instante $t = 109620$ s obtida via programa desenvolvido e via Diffusion RE.....	163

FIGURA 4.67	Cilindro obtido a partir da extrusão de um círculo ao longo do eixo y.....	164
FIGURA 4.68	Seção transversal do cilindro finito com destaque para os volumes de controle que tiveram seus transientes analisados.....	165
FIGURA 4.69	Superposição dos transientes de Φ obtidos com o programa desenvolvido para os volumes de controle destacados no plano da Figura 4.68.....	166
FIGURA 4.70	Distribuição espacial de Φ ao longo do tempo sobre o plano central do cilindro: a) $t = 21924$ s; b) $t = 43848$ s; c) $t = 109620$ s; d) $t = 164430$ s e e) $t = 219240$ s.....	166
FIGURA 4.71	Superposição do transiente de Φ para o volume de controle identificado por $(\xi = 16, \eta = 16, \gamma = 16)$ obtido com o programa desenvolvido e com o Diffusion RE.....	167
FIGURA 4.72	Esquema (fora de escala) usado para estudar os transientes dos volumes de controle destacados: (a) pelo programa desenvolvido e (b) pelo software Diffusion RE.....	168
FIGURA 4.73	Superposição dos transientes de Φ para os volumes de controle destacados na Figura 4.72 obtidos com o programa desenvolvido e com o Diffusion RE.....	168
FIGURA 4.74	Valor médio de Φ para o cilindro finito apresentado na Figura 4.67 obtido com o programa desenvolvido e o software Diffusion RE.....	169
FIGURA 4.75	Esquema (fora de escala) usado para analisar a distribuição radial de Φ : (a) destaque para os volumes de controle analisados pelo programa desenvolvido e (b) destaque para os volumes de controle analisados pelo software Diffusion RE.....	170
FIGURA 4.76	Superposição das curvas da distribuição radial de Φ para um cilindro finito no instante $t = 109620$ s obtida via programa desenvolvido e via Diffusion RE.....	170
FIGURA 4.77	Malha geratriz do cilindro infinito.....	173
FIGURA 4.78	Distribuição espacial de Φ sobre o plano que corresponde a $\gamma = 1$	

	para os instantes de tempo: a) $t = 1,218$ h; b) $t = 12,18$ h e c) $t = 48,72$ h.....	174
FIGURA 4.79	Raio do cilindro em função do tempo: superposição dos resultados obtidos pelas duas soluções.....	174
FIGURA 4.80	Destaque para o volume de controle identificado por ($\xi = 1, \eta = 1, \gamma = 1$), que teve o transiente analisado.....	175
FIGURA 4.81	Transiente do volume de controle destacado na Figura 4.80: superposição dos resultados obtidos pelas duas soluções numéricas	176
FIGURA 4.82	Superposição do valor médio de Φ obtido pelas duas soluções numéricas.....	176
FIGURA 4.83	Superposição da distribuição espacial de Γ_n^Φ , em $t = 12,18$ h, obtida via programa desenvolvido e via software Diffusion RE, para alguns volumes de controle delimitado pelos planos identificados por ($\eta = 1; \eta = 2; \gamma = 1; \gamma = 2$).....	178
FIGURA 4.84	Evolução temporal do parâmetro de transporte Γ^Φ para o ponto nodal identificado por ($\xi = 30, \eta = 30, \gamma = 30$).....	179
FIGURA 4.85	Evolução temporal da retração sofrida por uma seção reta do cilindro infinito devido à redução no raio, para os instantes: a) $t = 0$ h; b) $t = 1,218$ h; c) $t = 6,09$ h; d) $t = 9,744$ h; e) $t = 12,18$ h; f) $t = 24,36$ h e g) $t = 48,72$ h.....	179
FIGURA 4.86	Distribuição granulométrica da argila e curva cumulativa.....	181
FIGURA 4.87	Malha bidimensional 20X20 geratriz da malha 3D para as telhas cerâmicas.....	189
FIGURA 4.88	Razão de umidade média obtida com a solução proposta e os dados experimentais, considerando volume e parâmetros termofísicos constantes para uma temperatura de secagem de $55,6$ °C.....	190
FIGURA 4.89	Distribuição da razão de umidade no plano central de uma telha cerâmica, considerando parâmetros de transporte e volume constantes, para uma temperatura secagem de $55,6$ °C nos	

	seguintes instantes: (a) 4,36min; (b) 21,80min; (c) 49,05 min e (d) 109,00 min.....	191
FIGURA 4.90	Distribuição da razão de umidade de uma telha cerâmica no instante de tempo 4,36 min, considerando parâmetros de transporte e volume constantes, para uma temperatura secagem de 55,6 °C nos seguintes planos: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 5$; (c) $\gamma = 10$ e (d) $\gamma = 20$	192
FIGURA 4.91	Distribuição da razão de umidade de uma telha cerâmica no instante de tempo 109,00 min, considerando parâmetros de transporte e volume constantes, para uma temperatura de secagem de 55,6 °C nos seguintes planos: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 5$; (c) $\gamma = 10$ e (d) $\gamma = 20$	193
FIGURA 4.92	Razão de umidade média obtida com a solução proposta e os dados experimentais, considerando volume e parâmetros termofísicos constantes para uma temperatura de secagem de 69,7 °C.....	194
FIGURA 4.93	Razão de umidade média obtida com a solução proposta e os dados experimentais, considerando volume e parâmetros termofísicos constantes para uma temperatura de 82,7 °C.....	195
FIGURA 4.94	Razão de umidade média obtida com a solução proposta e os dados experimentais, considerando volume e parâmetros termofísicos constantes para uma temperatura de 98,6 °C.....	196
FIGURA 4.95	Superposição das cinéticas de secagem para as quatro temperaturas.....	197
FIGURA 4.96	Difusividade como função da temperatura: equação de Arrhenius.....	198
FIGURA 4.97	Coefficiente de transferência convectivo de massa em função da temperatura.....	199
FIGURA 4.98	Simulação da cinética de secagem para $T = 72,8$ °C com parâmetros determinados pelas Equações (4.1) e (4.2).....	200
FIGURA 4.99	Espessura normalizada da telha em função da razão de umidade	

	média para $T = 55,6 \text{ }^{\circ}\text{C}$	203
FIGURA 4.100	Espessura normalizada da telha em função da razão de umidade média para $T = 69,7 \text{ }^{\circ}\text{C}$	203
FIGURA 4.101	Espessura normalizada da telha em função da razão de umidade média para $T = 82,7 \text{ }^{\circ}\text{C}$	204
FIGURA 4.102	Espessura normalizada da telha em função da razão de umidade média para a temperatura de $98,6 \text{ }^{\circ}\text{C}$	204
FIGURA 4.103	Largura normalizada da telha em função da razão de umidade média para a temperatura de $55,6 \text{ }^{\circ}\text{C}$	205
FIGURA 4.104	Largura normalizada da telha em função da razão de umidade média para $T = 69,7 \text{ }^{\circ}\text{C}$	206
FIGURA 4.105	Largura normalizada da telha em função da razão de umidade média para $T = 82,7 \text{ }^{\circ}\text{C}$	206
FIGURA 4.106	Largura normalizada da telha em função da razão de umidade média para a temperatura de $98,6 \text{ }^{\circ}\text{C}$	207
FIGURA 4.107	Comprimento normalizado da telha em função da razão de umidade média para $T = 55,6 \text{ }^{\circ}\text{C}$	208
FIGURA 4.108	Comprimento normalizado da telha em função da razão de umidade média para a temperatura de $69,7 \text{ }^{\circ}\text{C}$	208
FIGURA 4.109	Comprimento normalizado da telha em função da razão de umidade média para $T = 82,7 \text{ }^{\circ}\text{C}$	209
FIGURA 4.110	Comprimento normalizado da telha em função da razão de umidade média para a temperatura de $98,7 \text{ }^{\circ}\text{C}$	209
FIGURA 4.111	Simulação da cinética de secagem para a temperatura de $55,6 \text{ }^{\circ}\text{C}$, considerando volume e difusividade variáveis.....	212
FIGURA 4.112	Distribuição da razão de umidade no plano central de uma telha cerâmica, considerando parâmetros de transporte e volume variáveis para uma temperatura secagem de $55,6 \text{ }^{\circ}\text{C}$ nos seguintes instantes de tempo: (a) 8,175min; (b) 13,625 min; (c) 46,325 min; (d) 79,025 min e (e) 122,625 min.....	213
FIGURA 4.113	Distribuição da razão de umidade em uma linha paralela ao eixo	

	z e identificada por ($\xi = 1$; $\eta = 10$) em $t = 122,625$ min.....	214
FIGURA 4.114	Distribuição da razão de umidade de uma telha cerâmica no instante de tempo 8,175 min, considerando parâmetros de transporte e volume variáveis, para uma temperatura de secagem de 55,6 °C nos planos: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 10$; (c) $\gamma = 15$ e (d) $\gamma = 20$	215
FIGURA 4.115	Distribuição da razão de umidade de uma telha cerâmica no instante de tempo 122,625 min, considerando parâmetros de transporte e volume variáveis, para uma temperatura de secagem de 55,6 °C nos planos: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 5$; (c) $\gamma = 10$ e (d) $\gamma = 20$	216
FIGURA 4.116	Perfis da razão de umidade: (1) ponto nodal no centro ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 1$); (2) ponto médio externo ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 20$); (3) ponto externo ($\xi = 20$; $\eta = 20$; $\gamma = 20$).....	217
FIGURA 4.117	Volume da telha em função do tempo de secagem.....	218
FIGURA 4.118	Volume normalizado em função da razão de umidade média.....	218
FIGURA 4.119	Malha bidimensional usada para gerar a malha tridimensional: detalhes do encolhimento nos instantes: (a) 5,46 min; (b) 10,92 min; (c) 16,32 min; (d) 21,84 min e (e) 46,325 min.....	219
FIGURA 4.120	Expressão determinada para D_{ef} de massa para $T = 55,6$ °C	220
FIGURA 4.121	Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 69,7 °C, considerando volume e difusividade variáveis.....	220
FIGURA 4.122	Distribuição da razão de umidade no plano central de uma telha cerâmica, considerando difusividade e volume variáveis para uma temperatura de secagem de 69,7 °C nos seguintes instantes de tempo: (a) 6,32 min; (b) 15,80 min; (c) 47,40 min; (d) 142,20 min	221
FIGURA 4.123	Distribuição da razão de umidade de uma telha cerâmica no instante de tempo 142,20 min, para uma temperatura de secagem de 69,7 °C, considerando parâmetros de transporte e volume variáveis, nos planos: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 10$; (c) $\gamma = 15$ e (d) $\gamma = 20$	222
FIGURA 4.124	Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 82,7 °C, considerando volume e difusividade variáveis.....	223
FIGURA 4.125	Distribuição da razão de umidade no plano central de uma telha	

	cerâmica, considerando difusividade e volume variáveis para uma temperatura de secagem de 82,7 °C nos seguintes instantes de tempo: (a) 5,17 min; (b) 13,16 min; (c) 23,50 min; (d) 47,00 min e (e) 117,50 min.....	224
FIGURA 4.126	Distribuição da razão de umidade de uma telha cerâmica no instante de tempo 5,17 min, para uma temperatura de secagem de 82,7 °C, considerando parâmetros de transporte e volume variáveis, nos planos: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 10$; (c) $\gamma = 15$ e (d) $\gamma = 20$	225
FIGURA 4.127	Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 98,6 °C, considerando volume e difusividade variáveis.....	226
FIGURA 4.128	Distribuição da razão de umidade no plano central de uma telha cerâmica, considerando difusividade e volume variáveis para uma temperatura de secagem de 98,6 °C nos seguintes instantes de tempo: (a) 4,367 min; (b) 11,116 min; (c) 29,775 min; (d) 39,700 min e (e) 91,310 min.....	227
FIGURA 4.129	Distribuição da razão de umidade de uma telha cerâmica no instante de tempo 91,31 min, para uma temperatura de secagem de 98,6 °C, considerando parâmetros de transporte e volume variáveis, nos planos: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 5$; (c) $\gamma = 10$; (d) $\gamma = 15$ e (e) $\gamma = 20$	228
FIGURA 4.130	Gráficos da razão de umidade em função da coordenada z para uma temperatura de secagem de 98,6 °C em (a) $t = 4,367$ min e (b) $t = 29,775$ min.....	229
FIGURA 4.131	Distribuição do teor de umidade sobre o plano central da telha, em $t = 120$ min, para as seguintes temperaturas do ar de secagem: (a) 55,6 °C; (b) 69,7 °C; (c) 82,7 °C; (d) 98,6 °C.....	230
FIGURA 4.132	Perfis da razão de umidade para uma temperatura de secagem de 69,7 °C: (1) VC no centro ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 1$); (2) ponto médio externo ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 20$); (3) ponto externo ($\xi = 20$; $\eta = 20$; $\gamma = 20$).....	231
FIGURA 4.133	Perfis da razão de umidade para uma temperatura de secagem de	

	82,7 °C: (1) VC no centro ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 1$); (2) ponto médio externo ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 20$); (3) ponto externo ($\xi = 20$; $\eta = 20$; $\gamma = 20$).....	231
FIGURA 4.134	Perfis da razão de umidade para uma temperatura de secagem de 98,6 °C: (1) VC no centro ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 1$); (2) ponto médio externo ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 20$); (3) ponto externo ($\xi = 20$; $\eta = 20$; $\gamma = 20$).....	232
FIGURA 4.135	Superposição das cinéticas de secagem para as quatro temperaturas.....	232
FIGURA 4.136	Expressão determinada para a D_{ef} de massa para a temperatura de 69,7 °C.....	233
FIGURA 4.137	Expressão determinada para a D_{ef} de massa para a temperatura de 82,7 °C.....	233
FIGURA 4.138	Expressão determinada para a D_{ef} de massa para a temperatura de 98,6 °C.....	234
FIGURA 4.139	Difusividades efetivas para as quatro temperaturas em função da razão de umidade local, considerando parâmetros variáveis.....	235
FIGURA 4.140	Difusividade efetiva em função da temperatura T e da razão de umidade MR.....	237
FIGURA 4.141	Coeficiente de transferência convectivo de massa em função da temperatura considerando variações na difusividade e nas dimensões.....	238
FIGURA 4.142	Taxa de secagem para a temperatura de 55,6 °C.....	240
FIGURA 4.143	Taxa de secagem para a temperatura de 69,7 °C.....	241
FIGURA 4.144	Taxa de secagem para a temperatura de 82,7 °C.....	242
FIGURA 4.145	Taxa de secagem para a temperatura de 98,6 °C.....	243

LISTA DE TABELAS

TABELA 4.1	Parâmetros físicos simulados para resolver a equação de difusão unidimensional.....	102
TABELA 4.2	Valor médio da grandeza em alguns instantes de tempo para as quatro malhas estudadas (7 VC, 15 VC, 25 VC e 33 VC).....	104
TABELA 4.3	Refino do intervalo de tempo para a malha tridimensional 25x25x25 em $t = 27,25$ min.....	105
TABELA 4.4	Parâmetros físicos usados na solução da equação de difusão tridimensional.....	108
TABELA 4.5	Distribuição espacial de Φ para uma parede infinita em $t = 27,25$ min obtida via código computacional proposto para condição de contorno prescrita.....	114
TABELA 4.6	Distribuição espacial de Φ para uma parede infinita em $t = 27,25$ min obtida via código computacional proposto para condição de contorno convectiva.....	114
TABELA 4.7	Distribuição espacial de Φ para uma parede infinita em $t = 27,25$ min obtida via software 1D Heat Transfer para condição de contorno convectiva.....	116
TABELA 4.8	Parâmetros físicos usados na resolução numérica da equação de difusão para uma geometria cúbica.....	123
TABELA 4.9	Identificação dos nós localizados no centro de cada face do cubo	123
TABELA 4.10	Distribuição espacial de Φ para um cubo em $t = 27,25$ min obtida via programa computacional desenvolvido, impondo-se condição de contorno convectiva.....	124
TABELA 4.11	Identificação dos pontos nodais localizados nos vértices de uma geometria cúbica.....	126
TABELA 4.12	Parâmetros físicos usados na resolução numérica da equação de difusão para um paralelepípedo.....	128
TABELA 4.13	Distribuição espacial no plano central da Figura 4.26 obtida com código computacional desenvolvido para o instante	

	t = 54,50 min.....	128
TABELA 4.14	Distribuição espacial no plano central da Figura 4.26 obtida com software Diffusion RE para o instante t = 54,50 min.....	129
TABELA 4.15	Identificação dos nós nas faces do paralelepípedo apresentado na Figura 4.26.....	130
TABELA 4.16	Distribuição espacial de Φ para o plano central da Figura 4.33 obtido com o código computacional desenvolvido para o instante t = 54,50 min.....	135
TABELA 4.17	Parâmetros físicos usados para resolver a equação de difusão em uma malha não-ortogonal para condição de contorno convectiva.	138
TABELA 4.18	Distribuição espacial de Φ para o losango que representa o plano central do sólido, obtida com o programa computacional desenvolvido para o instante t = 10 min.....	145
TABELA 4.19	Distribuição espacial de Φ para o plano central do sólido obtido com o software Diffusion RE para o instante t = 10 min.....	145
TABELA 4.20	Distribuição espacial de Φ para o plano central da Figura 4.37 obtida via programa computacional desenvolvido para t = 110 min	146
TABELA 4.21	Distribuição espacial de Φ para o plano central do sólido obtida via software Diffusion RE para t = 110 min.....	146
TABELA 4.22	Parâmetros físicos simulados para a solução da equação de difusão de uma malha cilíndrica para condição de contorno convectiva.....	158
TABELA 4.23	Informações sobre a simulação de um cilindro infinito, reportadas na literatura.....	172
TABELA 4.24	Valores de Γ_n^Φ para VC localizados na linha identificada por ($\eta = 1$; $\gamma = 1$), em t = 12,18 h, obtidos com o programa desenvolvido e com o software Diffusion RE.....	177
TABELA 4.25	Composição química da argila.....	180
TABELA 4.26	Temperatura de secagem (T); teor de umidade inicial (M_i), teor de umidade de equilíbrio (M_{eq}), e dimensões iniciais das telhas...	182

TABELA 4.27	Dados experimentais relativos à cinética de secagem para $T = 55,6 \text{ }^\circ\text{C}$	182
TABELA 4.28	Dados experimentais relativos à cinética de secagem para $T = 69,7 \text{ }^\circ\text{C}$	183
TABELA 4.29	Dados experimentais relativos à cinética de secagem para $T = 72,8 \text{ }^\circ\text{C}$	184
TABELA 4.30	Dados experimentais relativos à cinética de secagem para $T = 82,7 \text{ }^\circ\text{C}$	185
TABELA 4.31	Dados experimentais relativos à cinética de secagem para $T = 98,6 \text{ }^\circ\text{C}$	186
TABELA 4.32	Refino do intervalo de tempo para a malha tridimensional $10 \times 5 \times 10$ em $t = 5,45 \text{ min}$	187
TABELA 4.33	Refino do intervalo de tempo para a malha tridimensional $10 \times 5 \times 10$ em $t = 109,0 \text{ min}$	188
TABELA 4.34	Refino de malha com $\Delta t = 0,5450 \text{ min}$ em $t = 5,45 \text{ min}$	188
TABELA 4.35	Coefficientes de transporte considerando constantes a difusividade efetiva e o volume da telha.....	196
TABELA 4.36	Parâmetros determinados pelas Equações (4.1) e (4.2) e os erros calculados em relação aos valores ótimos da Tabela 4.35.....	199
TABELA 4.37	Expressões para a espessura das telhas em função da razão de umidade média.....	202
TABELA 4.38	Expressões para a largura das telhas em função da razão de umidade média.....	205
TABELA 4.39	Expressões para o comprimento das telhas em função da razão de umidade média.....	207
TABELA 4.40	Resultados para os parâmetros de transporte considerando volume e difusividade efetiva variáveis.....	211
TABELA 4.41	Valores para a difusividade efetiva de massa.....	234
TABELA 4.42	Estrutura dos dados para determinar uma única expressão que represente D_{ef}	236
TABELA 4.43	Taxas de secagem em função do tempo para $T = 55,6 \text{ }^\circ\text{C}$	239

TABELA 4.44	Taxas de secagem em função do tempo para $T = 69,7\text{ }^{\circ}\text{C}$	240
TABELA 4.45	Taxas de secagem em função do tempo para $T = 82,7\text{ }^{\circ}\text{C}$	241
TABELA 4.46	Taxas de secagem em função do tempo para $T = 98,6\text{ }^{\circ}\text{C}$	242

NOMENCLATURA

Letras Latinas

A_p, A_w, A_e, A_n, A_s - Coeficientes da equação de difusão discretizada.....	[-]
A_f, A_b, A_{ne}, A_{nw} - Coeficientes da equação de difusão discretizada.....	[-]
$A_{se}, A_{sw}, A_{fe}, A_{fw}$ - Coeficientes da equação de difusão discretizada.....	[-]
$A_{be}, A_{bw}, A_{fn}, A_{fs}$ - Coeficientes da equação de difusão discretizada.....	[-]
A_{bn}, A_{bs} - Coeficientes da equação de difusão discretizada.....	[-]
$\hat{A}_\ell, \hat{B}_\ell$ - Coeficientes da série infinita que dá a solução analítica da equação de difusão para um paralelepípedo com condição de contorno prescrita.....	[-]
A_0, A_1 – Parâmetros de ajuste da expressão para a difusividade efetiva	[-]
B - Termo independente de Φ na equação de difusão discretizada.....	[-]
Bi - Número de Biot.....	[-]
C – Comprimento da telha cerâmica.....	[m]
c_p – Calor específico à pressão constante.....	[Jkg ⁻¹ K ⁻¹]
\hat{C}_n, \hat{F}_n - Coeficientes de série infinita que dá a solução analítica da equação de difusão para uma parede infinita com condição de contorno convectiva.....	[-]
$\hat{D}_\ell, \hat{E}_\ell$ - Coeficientes de série infinita que dá a solução analítica da equação de difusão para um paralelepípedo com condição de contorno convectiva.....	[-]
d_1 – Diagonal menor do losango.....	[m]
d_2 – Diagonal maior do losango.....	[m]
D – Coeficiente de difusão.....	[m ² s ⁻¹]
D_{ef} – Coeficiente de difusão efetivo de massa.....	[m ² s ⁻¹]
D_0 – Fator de Arrhenius.....	[m ² s ⁻¹]

E – Espessura da telha cerâmica.....	[m]
E_a – Energia de ativação.....	[J mol ⁻¹]
$f_e, f_w, f_n, f_s, f_f, f_b, f_{ne}, f_{nw}$ – Fatores para a condição de contorno convectiva.....	[-]
$f_{se}, f_{sw}, f_{fe}, f_{fw}, f_{be}, f_{bw}$ – Fatores para condição de contorno convectiva.....	[-]
$f_{fn}, f_{fs}, f_{bn}, f_{bs}$ – Fatores para condição de contorno convectiva.....	[-]
\vec{G} - Grandeza vetorial.....	[-]
G_n – Componente de G na direção de \vec{n}	[-]
h – Coeficiente de transferência de massa por convecção.....	[m s ⁻¹]
i, j, k – Índices para uma posição de pontos na malha.....	[-]
J – Jacobiano da transformação.....	[-]
\vec{J} – Fluxo difusivo de massa.....	[kg m ⁻² s ⁻¹]
k – Condutividade térmica.....	[Wm ⁻¹ K ⁻¹]
L_1, L_2, L_3 – Dimensões de paralelepípedo.....	[m]
L_c – Comprimento característico.....	[m]
L – Espessura de parede infinita.....	[m]
L – Largura da telha cerâmica.....	[m]
L_z – Comprimento de cilindro.....	[m]
$\Delta L_\xi, \Delta L_\eta, \Delta L_\gamma$ – Distância elementar ao longo de ξ, η e γ	[m]
m – Massa da telha cerâmica.....	[kg]
m_{eq} – Massa de equilíbrio.....	[kg]
m_s – Massa seca.....	[kg]
M – Teor de umidade numa dada posição de um corpo.....	[kg kg ⁻¹]
\bar{M} – Teor de umidade médio (base seca).....	[kg kg ⁻¹]
M_i – Teor de umidade inicial (base seca).....	[kg kg ⁻¹]
M_{eq} – Teor de umidade de equilíbrio (base seca).....	[kg kg ⁻¹]
MR – Razão de umidade.....	[-]
N, S, E, W, F, B, P, – Pontos nodais.....	[-]
NE, NW, SW, SE, FE, FW, BW, NW, FN, FS, BN, BW – Pontos nodais.....	[-]
N_η – Número de linhas η no domínio.....	[-]

N_{ξ} – Número de linhas ξ no domínio.....	[-]
N_{γ} – Número de linhas γ no domínio.....	[-]
N_p – Número de pontos experimentais.....	[-]
Δn – Distância do ponto nodal à face de um volume de controle.....	[m]
\vec{n} – Vetor normal a uma área elementar.....	[-]
\vec{q} – Fluxo de calor por unidade de área.....	[J s ⁻¹ m ⁻²]
Q, E, F, G – Fatores usados na equação de transformação.....	[-]
r – Coordenada radial.....	[m]
\vec{r} – Vetor posição.....	[m]
R – Constante universal dos gases ideais.....	[J mol ⁻¹ k ⁻¹]
R – Raio de cilindro.....	[%]
R ² – Coeficiente de determinação.....	[]
ΔS – Área elementar.....	[m ²]
S – Termo fonte da equação de difusão.....	[-]
S ^Φ – Termo fonte da equação de transporte.....	[-]
t – Tempo.....	[s]
T – Temperatura.....	[°C]
\vec{v} – Velocidade do meio.....	[ms ⁻¹]
ΔV – Volume elementar.....	[m ³]
$\Delta V'_{ij}$ – Volume de volume de controle.....	[m ³]
V – Volume.....	[m ³]
\vec{VU} – Vetor unitário perpendicular a uma face.....	[-]
x, y, z – Coordenadas cartesianas.....	[-]
$x_{\xi}, y_{\xi}, z_{\xi}, x_{\eta}, y_{\eta}, z_{\eta}, x_{\gamma}, y_{\gamma}, z_{\gamma}$ – Derivadas de x, y e z em relação a ξ , η e a γ	[m]

Letras Gregas

α – Difusividade térmica.....	$[m^2 s^{-1}]$
α_{ij} – Parâmetros da equação de difusão discretizada.....	[-]
Γ^Φ – Coeficiente de transporte.....	[-]
Δ – Variação.....	[-]
λ – Coeficiente de transporte.....	[-]
$\mu_n, \hat{\mu}_n, \zeta_n, \hat{\zeta}_n$ – Raízes de equação transcendental.....	[-]
ξ, η, γ –Eixos em coordenadas generalizadas.....	[-]
$\xi_x, \xi_y, \xi_z, \eta_x, \eta_y, \eta_z, \gamma_x, \gamma_y, \gamma_z$ - Derivadas de ξ, η e γ em relação a x, y e z	[-]
ρ – Densidade (massa específica).....	$[kg m^{-3}]$
$1/\sigma_i$ – Peso estatístico do i-ésimo ponto experimental.....	[-]
τ – Tempo no domínio transformado.....	[s]
Φ - Variável de transporte.....	[-]
$\bar{\Phi}$ - Valor médio da variável de transporte.....	[-]
Φ_{eq} - Variável de transporte de equilíbrio.....	[-]
Φ_i - Valor inicial da variável de transporte.....	[-]
Φ_∞ – Variável de transporte para um fluido ambiente.....	[-]
$\bar{\Phi}_i$ - Valor do i-ésimo ponto experimental.....	[-]
$\delta\Phi_i$ - Desvio do i-ésimo ponto experimental.....	[-]
Φ^{sim} - Valor simulado de Φ	[-]
$\Phi_P, \Phi_E, \Phi_W, \Phi_N, \Phi_S$ – Variáveis dependentes na equação discretizada....	[-]
$\Phi_F, \Phi_B, \Phi_{NE}, \Phi_{NW}$ – Variáveis dependentes na equação discretizada.....	[-]
$\Phi_{SE}, \Phi_{SW}, \Phi_{FE}, \Phi_{FW}$ – Variáveis dependentes na equação discretizada.....	[-]
$\Phi_{BE}, \Phi_{BW}, \Phi_{FN}, \Phi_{FS}$ – Variáveis dependentes na equação discretizada.....	[-]
Φ_{BN}, Φ_{BS} – Variáveis dependentes na equação discretizada.....	[-]
φ' – Fluxo de Φ	[-]

ϕ'' – Fluxo de Φ por unidade de área.....	[-]
ϕ''_w – Fluxo de Φ por unidade de área no contorno oeste.....	[-]
χ^2 - Qui-quadrado.....	[-]
∇ – Operador Nabla.....	[-]
∇^2 – Laplaciano.....	[-]

Sobrescritos

- 0 – Tempo anterior
- w – Face oeste do volume de controle
- P – Nó do volume de controle em estudo
- n – Expoente da posição radial r

Subscritos

- ef – Efetiva
- eq – Equilíbrio
- e, w, n,s, f, b – Fronteiras de um volume de controle
- ne, nw,se, sw, fe, fw, be, bw, fn, fs, bn, bs – Vizinhos de um volume de controle
- i – Inicial
- s – Seco
- b.s. – Base seca

RESUMO

Este trabalho apresenta a solução numérica da equação de difusão tridimensional em regime transiente, para um domínio arbitrário. Para atingir os objetivos, a equação de difusão foi discretizada usando coordenadas generalizadas via método dos volumes finitos com uma formulação totalmente implícita, para condições de contorno de equilíbrio e convectiva. Para cada passo no tempo, o sistema de equações obtido para uma dada malha estruturada foi resolvido pelo método de Gauss-Seidel. O código computacional foi desenvolvido em FORTRAN, usando o estúdio CVF 6.6.0, na plataforma Windows Vista. A solução proposta foi validada usando soluções analíticas e numéricas da equação de difusão para várias geometrias, permitindo validar malhas ortogonais e não-ortogonais. A análise e comparação dos resultados mostraram que a solução proposta forneceu resultados coerentes para todos os casos investigados. O código computacional desenvolvido foi aplicado na simulação, a partir de dados experimentais da secagem de telhas cerâmicas para as seguintes condições experimentais: temperaturas de 55,6 °C, 69,7 °C, 82,7 °C e 98,6 °C e teor de umidade inicial variando de 0,2345 até 0,2405 (b.s.). A simulação tornou possível determinar o coeficiente de difusão efetivo em função da razão de umidade e da temperatura do ar de secagem e também o valor do coeficiente de transferência convectivo de massa correspondente para cada temperatura.

Palavras-chave: Regime transiente, geometrias complexas, coordenadas generalizadas, materiais porosos, volumes finitos, malha tridimensional estruturada e não-ortogonal

ABSTRACT

This work presents a three-dimensional numerical solution for the diffusion equation in transient state, in an arbitrary domain. The diffusion equation was discretized using the finite volume method with a fully implicit formulation and generalized coordinates, for the equilibrium and convective boundary condition. For each time step, the system of equations obtained for a given structured mesh was solved by the Gauss-Seidel method. A computational code in FORTRAN, using the CFV 6.6.0 Studio, in a Windows Vista platform was developed. The proposed solution was validated by analytical and numerical solutions of the diffusion equation for several geometries. The geometries tested enabled to validate both orthogonal and non-orthogonal meshes. The analysis and comparison of the results showed that the proposed solution provides correct results for all cases investigated. The developed computational code was applied in the simulation, using experimental data of the drying of ceramic roof tiles, for the following experimental conditions: temperature from 55.6; 69.7; 82.7; 72.8 and 98.7 °C, initial moisture content from 0.2345 up to 0.2405 (d.b.). The simulation makes it possible to determine an expression for the diffusion coefficient as a function of the moisture content and temperature of the drying air, and also the value of the convective mass transfer coefficient corresponding to each temperature.

Keywords: Unsteady state, complex geometries, generalized coordinates, porous materials, finite volume, three-dimensional structured and non-orthogonal mesh.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Fenômenos de transporte é a área da ciência que estuda sistemas em desequilíbrio, ou seja, sistemas nos quais ocorre uma distribuição não uniforme da grandeza intensiva de interesse, o que provoca um fluxo da grandeza extensiva correspondente, cuja tendência é restabelecer o equilíbrio do sistema. Dentre os vários mecanismos de transferência estudados, podem ser citados, dentre outros, a convecção, a difusão e a radiação.

A difusão é um exemplo de fenômeno de transporte de matéria, quantidade de movimento ou energia que ocorre em um meio estacionário causado pela existência de um gradiente, onde a grandeza extensiva é transportada devido ao movimento aleatório das moléculas do meio. Esses movimentos fazem com que, do ponto de vista macroscópico, a grandeza extensiva passe das zonas de gradientes mais elevados para zonas de gradientes menores. Diversas situações físicas de interesse utilizam a teoria da difusão para descrever o transporte de matéria e/ou energia em um meio. Naturalmente que o estudo do mecanismo da difusão pressupõe a proposição de um modelo matemático para a descrição do processo. Em consequência, o modelo matemático adequado para descrever o fenômeno envolve a solução da equação de difusão. É possível

encontrar, na literatura, inúmeras soluções analíticas e/ou numéricas da equação de difusão para diversas geometrias e condições de contorno, tratando os coeficientes difusivos constantes ou variáveis (Luikov, 1968; Crank, 1992; Lima, 1999; Nascimento, 2002; Lima et al., 2004; Silva et al., 2007; Hacıhafizoğlu et al., 2008; Silva et al., 2008a; Saykova et al., 2009; Farias et al., 2010a; Farias et al., 2010b).

Durante o levantamento bibliográfico, foi possível verificar a existência de um grande número de trabalhos referentes à utilização da teoria da difusão, para descrever diversos processos físicos, abrangendo as mais variadas áreas de pesquisas. Pode-se destacar, dentre outras, o aquecimento, o resfriamento e em alguns casos, o congelamento de corpos (Melo et al., 2008; Silva, W. et al., 2010b), bem como o processo de secagem de sólidos em diversos setores produtivos (Brooker et al. 1992; Lima et al., 2000; Fioreze, 2004; Salinas, et al., 2004; Chemkhi e Zagrouba, 2005; Carmo e Lima, 2005; Mellado, 2007; Amendola e Queiroz, 2007; Salomão et al., 2008; Carmo e Lima, 2008; Silva et al., 2009a; Silva et al., 2009b; Almeida, 2009; Farias et al., 2009a; Silva, C. et al., 2010).

De forma geral, secagem é um processo por meio do qual se retira água de corpos ou produtos constituídos por materiais porosos, sendo uma etapa muito importante em diversos setores de produção, abrangendo as mais diversas áreas da atividade humana, dentre as quais podem ser citadas as seguintes: armazenamento de alimentos, materiais cerâmicos, indústrias farmacêutica e de papel. O mecanismo de remoção da água do interior para a superfície de um sólido ainda não é bem entendido pelos pesquisadores. Alguns autores consideram que o transporte de água pode ocorrer na forma de líquido e/ou vapor dependendo de alguns fatores, tais como teor de umidade, temperatura e tipo do produto, enquanto outros consideram somente a difusão líquida (Lima, 1999; Nascimento, 2002; Lima et al., 2004). Portanto, o estudo de secagem torna-se especialmente importante no caso de existirem poucas informações sobre o comportamento do material submetido às diferentes condições de secagem, pois permite o

conhecimento da sua cinética e o ajuste de equações que poderão auxiliar no entendimento do fenômeno de transferência de massa.

Uma atividade industrial importante - no mundo em geral, e em particular na região nordeste - consiste na produção de materiais cerâmicos. O processo de produção de peças cerâmicas compreende diversas fases: exploração das jazidas, o tratamento prévio das matérias primas, a homogeneização, a secagem e a queima (Chiara et al., 2000; Nascimento, 2002; Boukadida e Nasrallah, 2002; Cadé et al., 2005; Silva, 2007; Batista et al., 2008; Almeida, 2009).

Uma das etapas essenciais no processo produtivo de materiais cerâmicos, tanto do ponto de vista econômico quanto da qualidade final da peça produzida, consiste na etapa da secagem. Durante essa etapa, surgem elevados gradientes de umidade e temperatura no interior do sólido. Com isso, simultaneamente, são geradas tensões térmicas e hídricas, que podem causar defeitos irreversíveis na peça produzida, diminuindo a produtividade do processo e aumentando custos operacionais. Neste contexto, é fundamental conhecer os efeitos da secagem e o seu controle, uma vez que estes alteram as propriedades físicas e químicas do produto, e tais alterações afetam sensivelmente o processo de transferência de calor e massa (Nascimento et al., 2002; Vieira et al., 2003; Almeida, 2009; Silva, J., 2009).

A necessidade de estudos de processos de secagem, com reflexos na qualidade do produto final a custos mais acessíveis, faz deste trabalho de pesquisa uma atividade importante não só para a região nordeste como também para o parque industrial brasileiro e, numa perspectiva otimista, para o parque industrial mundial.

Assim, para situar o possível avanço deste trabalho dentro da linha de pesquisa de transferência de calor e massa, deve-se observar que inúmeros trabalhos têm sido publicados na secagem de sólidos, de forma geral. Contudo, escassos são os artigos disponíveis em relação a corpos com geometria arbitrária tridimensional, particularmente nos casos em que não se pode

reduzir o problema a situações uni ou bidimensionais. Deste modo, diante da escassez de pesquisas em fenômenos de difusão de calor e de massa em sólidos, com particular referência a materiais cerâmicos, que envolvam geometrias complexas, esta pesquisa deverá conter aspectos inovadores, fornecendo subsídios iniciais para que estudos posteriores, mais detalhados e aprofundados, possam ser realizados e utilizados no processo produtivo.

Diante do exposto, o presente trabalho propõe um estudo teórico e experimental da difusão, em três dimensões, para sólidos de forma arbitrária, usando o método dos volumes finitos com uma formulação totalmente implícita. Tal solução será aplicada em processos de secagem, envolvendo difusão de massa no interior de um sólido cerâmico, incluindo o seu encolhimento.

De forma específica, o presente trabalho propõe atingir os seguintes objetivos:

- Modelar matematicamente e apresentar solução numérica em três dimensões para o problema de difusão transiente, em corpos com geometria arbitrária, baseando-se na teoria da difusão líquida e na lei de Fourier. O modelo deve considerar variações nas dimensões do sólido, nas propriedades de transporte, e prever condições de contorno convectiva e prescrita;
- Desenvolver um código computacional, através da utilização do estúdio Compaq Visual Fortran (CVF), versão 6.6.0 Professional Edition, usando a opção de programação QuickWin Application na plataforma *Windows*, para simular em três dimensões, o processo de difusão de propriedades em sólidos com forma complexa;
- Simular a distribuição do teor de umidade no interior desses sólidos e suas respectivas cinéticas de difusão, utilizando-se de modelos matemáticos a serem desenvolvidos;

- Avaliar os efeitos das considerações adotadas nos diversos modelos, incluindo o encolhimento dos corpos, sobre os coeficientes de transporte;
- Realizar experimentos de secagem para corpos de teste na forma de telhas cerâmicas para várias condições de secagem;
- Aplicar os modelos numéricos desenvolvidos no estudo da secagem de materiais cerâmicos;
- Examinar o efeito do encolhimento ocorrido durante o processo de secagem;
- Comparar os resultados da simulação numérica com os resultados experimentais, para os corpos selecionados, e determinar os coeficientes de transferência de massa: difusivo no interior e convectivo na superfície do produto, para várias condições de secagem;
- Obter correlações matemáticas para os coeficientes de transporte, como função dos parâmetros de secagem para diversas condições de secagem.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A difusão é um dos mecanismos de transporte onde a transferência de matéria ou energia ocorre pelo movimento molecular devido à existência de um gradiente de concentração de uma substância ou temperatura, enquanto o meio permanece estacionário. Este processo é representado pela equação de difusão, decorrente da equação geral de transporte (equação de conservação) que, dependendo do problema, pode ser denominada de Lei de Fick (difusão mássica) ou lei de Fourier (difusão térmica).

Durante a pesquisa bibliográfica realizada sobre processos de difusão, foi constatado que a literatura sobre este assunto é bastante extensa, incluindo diversos estudos, envolvendo as mais variadas hipóteses para resolver a equação de difusão. Soluções analíticas e/ou numéricas da equação de difusão, considerando os coeficientes de difusão como constantes ou variáveis e utilizando condições de contorno de equilíbrio ou convectiva, para diferentes geometrias, podem ser encontradas em Luikov (1968); Crank (1992); Incropera e DeWitt (1992); Brooker et al. (1992); Lima (1999); Liu et al. (2000); Bird et al. (2001); Nascimento et al. (2002); Nascimento (2002); Wu et al. (2004); Keller et al. (2004); Ohara et al. (2004); Lima et al. (2004);

Abe et al. (2004); Carmo (2004); Li et al. (2004); Cadé et al. (2005); Erdoğdu (2005); Silva (2007); Mellado (2007); Rafiee et al. (2008); Melo et al. (2008); Silva et al. (2008a); Silva et al. (2008c); Hacıhafizoglu et al. (2008); Farias et al. (2009b); Silva et al. (2009a); Silva et al. (2009c); Silva, W. et al. (2010b).

A solução da equação de difusão, em diversas situações físicas de interesse, requer muitas vezes a necessidade de se estabelecer certas hipóteses na descrição do processo físico. Uma delas está relacionada com a geometria do corpo dentro do qual ocorre o transporte de matéria ou energia. Na literatura são reportados diversos trabalhos que utilizam o modelo difusivo para descrever o processo físico e consideram a forma geométrica dos corpos objetos de estudo como cilindros, esferas ou paredes infinitas (Liu e Simpson 1999; Queiroz e Nebra, 2001; Absi et al., 2005; Baumer e Mariani, 2005; Chemkhi e Zagrouba, 2005; Lopez et al., 2005; Ukrainczyk, 2009; Silva, C., 2010; Silva, C. et al., 2010). Para essas geometrias mais simples, a equação de difusão pode ser resolvida analiticamente, o que normalmente pressupõe propriedades termofísicas constantes para o meio (Crank, 1992; Amendola e Queiroz, 2007; Saykova et al., 2009). Estas simplificações geométricas também facilitam a solução numérica da equação de difusão. Entretanto, este procedimento, embora normalmente apresente bons resultados, às vezes não descreve de forma satisfatória os processos envolvidos, caso a forma geométrica do objeto em estudo seja significativamente diferente da considerada.

Também é possível encontrar na literatura outras pesquisas sobre modelos de difusão que consideram os corpos com formas geométricas elipsoidais ou ainda tratam os sólidos como esferóides oblatos e/ou prolatos. Nessas pesquisas, são apresentadas soluções analíticas ou numéricas para a equação de difusão transiente, tratando as propriedades termofísicas variáveis ou constantes e empregando condições de contorno do primeiro tipo ou convectiva (Carmo, 2000; Lima et al., 2000; Lima e Nebra, 2000; Farias, 2002; Lima et al., 2004; Li et al., 2004; Carmo e Lima, 2005; Oliveira, 2006; Hacıhafizoglu et al., 2008; Melo et al., 2008; Carmo e Lima, 2008).

Em se tratando de solucionar a equação da difusão escrita em coordenadas cartesianas para geometrias tridimensionais e válidas apenas para parede infinita, placas retangulares ou paralelepípedos, alguns trabalhos podem ser encontradas na literatura (Ohara et al., 2004; Silva, 2005; Cadé et al., 2005; Nascimento et al., 2005; Nascimento et al., 2006; Batista et al., 2008; Rafiee et al., 2008; Almeida, 2009; Saykova et al., 2009; Silva, J., 2009; Farias et al., 2010a; Farias et al., 2010b).

Também são reportadas na literatura algumas pesquisas que levam em consideração a geometria arbitrária dos corpos e, portanto, fazem uso de coordenadas generalizadas para resolver numericamente a equação da difusão, através de modelos bidimensionais. Dentre elas, pode-se evidenciar os trabalhos de Wu et al. (2004); Salinas et al. (2004); Silva et al. (2007); Silva et al. (2008b); Silva et al. (2009a); Silva et al. (2009b); Silva et al. (2009d); Silva et al. (2009e); Silva, W. et al. (2010a).

É importante ressaltar que alguns trabalhos realizados por pesquisadores do Programa de Doutorado em Engenharia de Processos da Universidade Federal de Campina Grande estão dentro da linha de pesquisa de transferência de calor e massa. Esses pesquisadores são responsáveis por várias publicações, inclusive em revistas internacionais com alto fator de impacto. Seus trabalhos antecederam e serviram de base para a pesquisa desenvolvida e apresentada neste trabalho. Dentre eles, pode-se destacar: Lima (1999), que apresentou soluções numéricas e analíticas para a equação de difusão usando malhas ortogonais, geradas por expressões analíticas, válidas para sólidos do tipo esferoidal prolato, enquanto Nascimento (2002) apresentou vários modelos matemáticos para resolver problemas de difusão transiente em três dimensões, mas para uma geometria específica: sólidos na forma de paralelepípedos. Por sua vez, Carmo (2004) apresentou solução numérica da equação de difusão, válida para sólidos com geometria do tipo esferoidal oblata, enquanto Silva (2007) trabalhou com malhas estruturadas não-ortogonais bidimensionais, geradas numericamente, válidas para qualquer sólido com simetria de revolução.

Portanto, pode-se observar que existe uma farta literatura disponível sobre modelos de difusão. No entanto, há uma escassez de trabalhos que levam em consideração a geometria arbitrária dos corpos, através de modelos tridimensionais, o que é necessário para descrever o processo de forma mais precisa quando os corpos em estudo apresentam uma complexa forma geométrica, que é o foco principal desta pesquisa.

Observou-se, durante a revisão bibliográfica, que inúmeros pesquisadores utilizam o modelo de difusão para descrever diversos processos físicos, abrangendo as mais variadas áreas de interesse. Pode-se destacar, dentre outras, o aquecimento, o resfriamento e, em certos casos, o congelamento de corpos, bem como o processo de secagem de sólidos, assunto que será tratado na próxima seção.

2.1 Modelo de difusão aplicado ao processo de secagem

2.1.1 Aspectos gerais da secagem

Em síntese, secagem é a remoção, total ou parcial, natural ou artificial, de um fluido (líquido ou vapor) de qualquer material, envolvendo exclusivamente a transferência de calor e de massa. Apesar de secagem e desidratação serem termos similares (Fioreze, 2004), na terminologia dos pesquisadores da área, o termo secagem é utilizado principalmente quando o processo envolve duas etapas principais: uma delas é a transferência de calor, seja por condução, convecção ou radiação ou ainda por uma combinação desses processos, do meio ambiente para o produto. A outra etapa é a evaporação da água líquida contida no sólido e sua retirada na forma de vapor, em convecção natural ou forçada. Por sua vez, o termo desidratação é mais amplo e mais adequado para denominar um processo de retirada de água de um produto sem que haja

necessariamente a transferência de calor e sem evaporação de água líquida. A retirada de água de um material através da prensagem não é considerada secagem por envolver operação mecânica.

Durante a secagem, o calor é transferido ao material por convecção, através do ar, ou por condução, através do contato com uma superfície quente. Esse calor é utilizado para vaporizar o líquido na superfície do sólido ou próximo da superfície se a mudança de estado ocorrer no interior do corpo (Brooker et al., 1992). O vapor produzido é retirado pelo fluxo de ar, seja em convecção natural ou forçada. Com a retirada de água da superfície e das camadas mais externas, cria-se um gradiente de concentração internamente ao produto causando um processo migratório de umidade do centro para a superfície (Fioreze, 2004). Há ainda, em alguns casos, a vaporização da água no interior do corpo, ocorrendo, neste caso, a migração de líquido e vapor para a superfície (Lima e Nebra, 2000).

Na literatura são encontradas diversas teorias com o objetivo de explicar esse transporte de água no interior do sólido, dentre as quais se destacam, pelo maior uso entre os pesquisadores (Brooker et al., 1992; Lima, 1999; Nascimento, 2002; Carmo, 2004; Fioreze, 2004; Farias, 2006), as seguintes:

- a) movimento do líquido devido à diferença de concentração de umidade (difusão líquida);
- b) movimento de líquido devido às forças capilares;
- c) movimento de líquido devido às forças osmóticas;
- d) movimento de vapor devido à diferença de concentração de vapor (difusão de vapor);
- e) movimento do líquido devido à força gravitacional.

Na realidade, a migração de umidade pode ocorrer por um ou por uma combinação de vários processos simultâneos. Verifica-se, no entanto, que alguns autores trabalham com a hipótese do transporte de água acontecer como uma combinação de difusão líquida e difusão de vapor, enquanto outros preferem considerar apenas a difusão de líquidos. De acordo com Brooker et al. (1992); Fioreze (2004); Park et al. (2007), o modelo que considera apenas a difusão líquida é uma simplificação para o movimento migratório da água no interior do sólido. Esse modelo, apesar de algumas críticas, vem ganhando a preferência de um grande número de pesquisadores na área de secagem, sendo amplamente utilizado no dimensionamento migratório da umidade (Lima, 1999; Carmo, 2000; Nascimento, 2002; Wu et al., 2004; Carmo, 2004; Lima et al., 2004; Salinas et al., 2004; Cadé et al., 2005; Farias, 2006; Holanda, 2007; Amendola e Queiroz, 2007; Mellado, 2007; Silva, 2007; Silva et al., 2007; Hacıhafizoğlu et al., 2008; Silva et al., 2008a; Silva et al., 2009a; Farias et al., 2009a; Silva, C. et al., 2010; Farias et al., 2010a).

Em geral, no decorrer da secagem de sólidos constituídos de material poroso, ocorre uma retração, isto é, o encolhimento dos produtos em decorrência da difusão de água, bem como uma variação nas propriedades termofísicas do material, que podem depender da temperatura, do teor de umidade e da própria estrutura física do corpo. Assim, uma correta descrição do processo deve levar em consideração estes fatores (Lima, 1999; Nascimento, 2002; Carmo, 2004).

As críticas à aplicação do modelo de difusão nos processos de secagem, referenciadas anteriormente, são decorrentes de discrepâncias observadas entre resultados teóricos e experimentais que em geral podem ser oriundas da aplicação inadequada do referido modelo, tais como (Nascimento, 2002; Carmo, 2004) considerar o coeficiente de difusão constante durante todo o processo de secagem, condições de contorno inadequadas, não considerar a redução no volume do produto, entre outros fatores. O encolhimento, por exemplo, pode ter um significativo efeito na difusividade de massa e, conseqüentemente na taxa de remoção da umidade. Considerar o volume do corpo constante durante a secagem tem gerado desvios maiores entre os dados experimentais e teóricos, em comparação com os modelos que incorporam o fenômeno do encolhimento (Lima, 1999).

2.1.2 Algumas aplicações da secagem

A secagem é uma etapa bastante delicada, complexa e extremamente importante em diversos setores, tendo finalidades específicas em algumas áreas de produção (Vieira, 2003; Fioreze, 2004). Inúmeros trabalhos são reportados na literatura com as mais diversas técnicas de secagem, empregados nos mais diversos setores produtivos, dentre os quais podem ser citados: indústria alimentícia, cerâmica vermelha, cerâmica avançada, madeira, concreto refratário, indústria química.

2.1.2.1 Secagem de produtos agrícolas

Na área da produção agrícola, por exemplo, segundo Fioreze (2004), a secagem é um dos métodos mais antigos que se tem conhecimento, usado na preservação e armazenamento de alimentos. Sua utilização, há séculos, ou mesmo milênios, ainda que de forma empírica, sem levar em consideração as diversas variáveis envolvidas no processo, tem permitido ao homem retardar a deterioração de produtos biológicos por períodos variáveis, após sua maturidade fisiológica. Os produtos são colhidos com alto teor de umidade, que facilita o aparecimento e desenvolvimento de insetos e fungos, levando a uma rápida deterioração do produto (Brooker et al., 1992; Fioreze, 2004). Portanto, a secagem feita logo após a colheita tem por objetivo principal a conservação das qualidades nutricionais dos produtos por longos períodos de armazenamento (Silva, 2007).

Na indústria alimentícia, secagem é um dos métodos mais importantes usados tanto para processar alimentos, como para armazenar grãos e sementes (Lima et al., 2004). De acordo com Brooker et al. (1992), grãos estão entre os alimentos mais básicos do mundo, tornando-se evidente, portanto, a sua preservação através da técnica de secagem. O elevado teor de umidade de grãos ou sementes pode afetar sua qualidade, tanto no período de armazenagem, quanto

durante as operações de beneficiamento, pois o excesso de água favorece os fatores que contribuem para o aparecimento e desenvolvimento de fungos e insetos, o que leva a uma rápida deterioração do produto, durante o tempo compreendido entre a maturação fisiológica e a utilização desses produtos.

Há uma farta literatura disponível sobre secagem de produtos alimentícios. Elias et al. (1996) estudaram a secagem de grão de bico em leito fixo e camada espessa para avaliar o teor de umidade de equilíbrio e as isotermas de sorção do produto. Lauriano et al. (2005) desenvolveram experimentos em camada delgada com o objetivo de realizar um estudo sobre cinética de secagem de frutos de aroeira-vermelha, considerando a forma esférica para o produto.

Amendola e Queiroz (2007) estudaram a secagem de banana e calcularam a difusividade de massa no seu interior, enquanto Hacıhafizoğlu et al. (2008) utilizaram o modelo difusivo na secagem em camada fina de arroz em casca. Silva et al. (2008a) simularam numericamente a difusão de água em sólidos cilíndricos e aplicaram o modelo matemático desenvolvido à secagem de banana e de arroz em casca, usando dados experimentais disponíveis na literatura.

Outros estudos no campo da secagem pós-colheita podem ser encontradas em Wu et al. (2004); Silva et al. (2008c); Rafiee et al. (2008); Farias et al. (2009a); Silva et al. (2009a); Silva et al. (2009c); Santos et al. (2009).

A secagem é uma das fases mais importantes na industrialização da madeira, de acordo com Fernandes et al. (2006), que fez um estudo numérico experimental para a secagem de madeira em estufa. Ainda no setor madeireiro, pode-se citar Mellado (2007), que empregou vários modelos com o objetivo de melhorar o controle do processo de secagem de madeira serrada de pinus, tomando como base a Lei de Fourier usada para modelar o fluxo de calor e a

Lei de Fick para o fluxo de massa. Por sua vez, Liu e Simpson (1999) aplicaram o modelo difusivo e o método inverso para a determinação do coeficiente de difusão de massa para o transporte de água em madeira. Pode-se destacar também Salinas et al. (2004) que simulou a secagem convencional de madeira, empregando coordenadas generalizadas.

Jung et al. (2008) reportaram um modelo matemático bidimensional para descrever a cinética de secagem da sílica gel usando a dinâmica do fluido computacional. Em seu trabalho, um modelo de secagem em camada delgada foi considerado para transferência de calor, enquanto o transporte de massa foi analisado através dos modelos da difusão interna e da evaporação de umidade.

2.1.2.2 Secagem de produtos cerâmicos

Dentre outras áreas, uma extremamente importante, na qual a secagem é uma das etapas fundamentais do processo produtivo é aquela referente à fabricação de materiais cerâmicos. Por este motivo e por ser o tema abordado neste trabalho, será feita uma breve revisão sobre o assunto.

De acordo com Barros (2003), duas das principais características que diferenciam os materiais cerâmicos, de um modo geral das outras classes de materiais, são sua alta temperatura de fusão e sua elevada dureza. Assim como em outras áreas tecnológicas, a Engenharia de Materiais busca tirar proveito destas e de outras características particulares das cerâmicas, de modo a propiciar benefícios diretos ou indiretos para o homem. Nesse sentido, os materiais cerâmicos têm proporcionado significativo avanço nos mais variados setores, abrangendo desde áreas mais tradicionais como a de revestimentos cerâmicos até indústrias de altas tecnologias como, por exemplo, aeronáutica, comunicação e informática (Rambo, 2006).

Um setor dessa área de produção que tem merecido especial atenção por parte de pesquisadores é aquela referente a concretos refratários, uma vez que esses materiais são aplicados na forma fluída, causando freqüentemente problemas de secagem na indústria. Assim, alguns trabalhos sobre aditivos de secagem têm surgido como forma de minimizar tais problemas (Innocentini et al., 2001; Ramal Jr. et al., 2004; Lopez et al., 2005; Salomão et al., 2008).

A fabricação de produtos cerâmicos compreende diversas fases: exploração das jazidas, o tratamento prévio das matérias primas, conformação, secagem e queima (Chiara et al., 2000; Batista et al., 2008). Após o beneficiamento, para se obter uma peça cerâmica, antes da conformação, diluentes são adicionados ao pó cerâmico para umidificar as partículas e gerar um meio viscoso entre elas, aumentando a consistência e permitindo moldar o produto na forma desejada. No caso de tijolos e telhas, o diluente utilizado é a água, que é adicionada a argila antes da conformação até que um determinado teor de umidade seja atingido (Cadé et al., 2005).

A água usada na conformação deve ser eliminada antes da queima e, para isso, as peças cerâmicas são submetidas ao processo de secagem, durante o qual elas experimentam as contrações devido ao surgimento de poros causado pela ausência de massa. Caso o processo não seja bem conduzido, podem ocorrer deformações e conseqüentemente trincas, afetando a qualidade final do produto. Em muitas situações, a perda do produto é verificada imediatamente após a secagem (Mačiulaitis e Malaiškien, 2009). Em outras situações, os danos causados pelo processo são observados somente após a queima (Mačiulaitis et al., 2008). Assim, a descrição detalhada do processo de secagem é importante por fornecer informações que resultam em um produto final de boa qualidade com o mínimo de desperdício.

A secagem dos materiais cerâmicos pode ser realizada de forma natural, ao vento, ou de forma artificial, em secadores controlados. Estas formas de secagem são descritas a seguir:

a) Secagem natural

As peças são colocadas em locais abertos, onde são naturalmente expostas ao vento e calor. Este tipo de secagem é demorado e, além do mais, necessita de muito espaço coberto, para colocação das peças, as quais são muito manipuladas, acarretando grandes perdas e, conseqüentemente, uma baixa qualidade no produto final. É indicada para produtos de baixo custo, pois é um processo de pouca produtividade.

b) Secagem artificial

Na secagem realizada em secadores, as peças são dispostas em prateleiras, esteiras ou no próprio piso do secador. Este tipo de secagem é rápida, uniforme e programada, com uma conseqüente melhora na relação custo-benefício e na qualidade dos produtos acabados. É indicado para processos de alta produtividade.

Vários tipos de secagem são descritas na literatura para materiais cerâmicos e, dentre os quais, podem ser citados: secagem por microondas (Skansi e Tomas, 1995), secagem utilizando o ar quente (Su, 1997; Musielak, 2001; Sander et al., 2003; Musielak e Mierzwa, 2009), método de secagem por líquido dessecante (Barati et al., 2003), radiação de calor em estufa (Itaya et al., 2005), secagem convectiva–radioativa (Boukadida e Nasrallah, 2002) e vapor superaquecido sob pressão (Looi et al., 2002). Em alguns países, como Brasil, o ar quente é normalmente usado na secagem de produtos cerâmicos, não obstante os vários tipos de secagem disponíveis.

Na literatura, particularmente para materiais cerâmicos, estão disponíveis vários modelos de secagem. Dentre esses modelos, podem ser citados: modelos empíricos (Skansi e Tomas, 1995; Sander et al., 2003), modelos de difusão (Looi et al., 2002;

Sander et al., 2003; Chemkhi e Zagrouba, 2005) e o modelo de Darcy (Su, 1997; Chemkhi e Zagrouba, 2008). Em alguns trabalhos, os períodos de secagem são descritos por diferentes modelos: período de taxa constante, período de taxa decrescente e período de difusão polimétrica (Ghosal et al., 1999). Para modelos de difusão, as condições de contorno apropriadas devem ser identificadas na descrição do processo de secagem. Embora o uso de condições de contorno do terceiro tipo seja mais comum, alguns trabalhos usando condições de contorno do primeiro tipo são também encontrados na literatura (Chemkhi e Zagrouba, 2005).

Para descrever o transporte de umidade, a geometria do sólido poroso deve ser definida. Em muitos estudos sobre secagem de produtos cerâmicos são usados corpos de prova na forma de paralelepípedo. Entre estas pesquisas pode-se citar Nascimento (2002), que direcionou seus estudos em geometrias tridimensionais usando coordenadas cartesianas para a secagem de tijolos cerâmicos moldados com argila vermelha, enquanto Cadé et al. (2005) apresentaram uma modelagem matemática tridimensional para prever o transporte de massa no interior de tijolos cerâmicos vazados durante a secagem.

Em vários trabalhos, a forma geométrica do paralelepípedo é aproximada para uma parede infinita como nas pesquisas desenvolvidas por Su (1997); Musielak (2001); Itaya et al. (2005); Chemkhi e Zagrouba (2005). Estes últimos pesquisadores estimaram o coeficiente de difusão de massa a partir de dados experimentais obtidos em diferentes condições de secagem para três amostras de argila. A solução analítica da equação de difusão unidimensional em coordenadas cartesianas foi empregada para mostrar como o coeficiente de difusão depende das condições experimentais.

Em outros trabalhos, sólidos como tijolos cerâmicos são simplificados para o caso bidimensional (Boukadida e Nasrallah, 2002).

Outras pesquisas relacionadas à secagem de materiais cerâmicos com abordagens sobre outros fatores que influenciam a qualidade final do produto podem ser mencionadas. Por exemplo, um estudo sobre a influência da secagem nas propriedades dos produtos ao final do processo foi feito por Mačiulaitis et al. (2007) com o objetivo de selecionar condições ótimas de secagem para produtos cerâmicos. Por outro lado, Batista et al. (2008) apresentaram um estudo experimental da secagem, queima e choque térmico de amostras de tijolos cerâmicos maciços e vazados de argila para cerâmica vermelha, com diferentes dimensões e umidades iniciais.

Almeida (2009) analisou o funcionamento de um secador tipo túnel utilizado pela indústria de cerâmica através de estudos experimentais e numéricos da secagem de tijolos cerâmicos vazados industriais. O objetivo foi oferecer às indústrias e/ou empresas que tenham interesse em otimizar o funcionamento de secadores industriais de tijolos cerâmicos, informações indispensáveis e raramente encontradas na literatura, segundo o autor, no processo de secagem desse produto.

Silva, J. (2009) apresentou um estudo numérico da secagem de tijolos vazados. Inicialmente foi apresentado um modelo matemático transiente para prever a transferência de calor e massa, bem como simular a distribuição do teor de umidade e temperatura no interior do sólido, considerando as propriedades termofísicas constantes durante todo processo de secagem. Neste trabalho, aspectos das tensões internas e deformações no material também foram analisados.

Na simulação do processo de secagem em geral, os parâmetros termofísicos devem ser conhecidos. Em muitas situações de interesse, tais parâmetros estão disponíveis na literatura e podem ser usados na simulação da cinética de secagem (Su, 1997; Looi et al., 2002; Chemkhi e Zagrouba, 2008). No entanto, se esses parâmetros não são conhecidos, eles devem ser determinados, por exemplo, através de otimização (Amendola e Queiroz, 2007; Mariani et al., 2008; Mariani et al., 2009; Silva et al., 2009d; Silva et al., 2009e).

2.2 O problema geral de transporte e a equação de difusão

A expressão geral da equação de transporte, na forma infinitesimal para um volume elementar, pode ser escrita do seguinte modo (Özişık, 1990; Bird et al., 2001; Maliska, 2004; Silva, 2007; Silva, W., 2009):

$$\frac{\partial (\lambda\Phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\lambda \vec{v} \Phi) = \nabla \cdot (\Gamma^\Phi \nabla \Phi) + S^\Phi \quad (2.1)$$

em que

Φ é a variável dependente de interesse,

λ e Γ^Φ são coeficientes de transporte,

\vec{v} é o vetor velocidade do meio,

S^Φ é o termo fonte.

Na Equação (2.1), o primeiro termo representa a variação temporal da grandeza sob estudo em um volume infinitesimal, sendo conhecido como termo transiente. Por outro lado, o segundo termo, denominado termo advectivo, indica o quanto a grandeza varia na unidade de tempo devido ao seu movimento junto com o meio. Ambos se movem com a velocidade \vec{v} . O terceiro termo representa a variação da grandeza na unidade de tempo por difusão (termo difusivo), enquanto o último termo, denominado de termo fonte, dá a geração (ou sorvedouro) da grandeza em um volume infinitesimal.

2.2.1 Transporte: equações de conservação

Quando se admite, na Equação (2.1): $\lambda = \rho$, $\Phi = 1$ e $S^\Phi = 0$, obtém-se a equação da continuidade (Patankar, 1980; Bird et al., 2001; Maliska, 2004; Silva, W., 2009):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.2)$$

onde ρ é a densidade do meio.

Caso as variáveis sejam substituídas por $\lambda = \rho c_p$, $\Phi = T$ e $\Gamma^\Phi = k$, a Equação (2.1) transforma-se na equação geral da conservação da energia:

$$\frac{\partial (\rho c_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} c_p T) = \nabla \cdot (k \nabla T) + S^\Phi \quad (2.3)$$

em que

T é a temperatura,

c_p é o calor específico à pressão constante,

k é a condutividade térmica do meio.

A variável dependente da Equação (2.3) é a grandeza intensiva temperatura, enquanto a energia interna é a grandeza extensiva transportada no volume de controle. O termo entre

parêntesis no segundo membro dessa mesma equação possibilita definir a taxa de transferência de calor por unidade de área (fluxo de calor por unidade de área), que é dado por:

$$\bar{q} = -k\nabla T \quad (2.4)$$

A Equação (2.4) é a forma geral da lei de Fourier e é válida quando o transporte de calor ocorre por condução.

2.2.2 A equação de difusão

A equação que descreve o fenômeno da difusão para uma variável genérica Φ é obtida diretamente da equação de transporte, fazendo com que o termo advectivo na Equação (2.1) seja igual a zero, já que neste caso o meio encontra-se em repouso (velocidade nula):

$$\frac{\partial (\lambda\Phi)}{\partial t} = \nabla \cdot (\Gamma^\Phi \nabla \Phi) + S^\Phi \quad (2.5)$$

Se a variável de interesse é a temperatura, obtém-se a equação da condução de calor:

$$\frac{\partial (\rho c_p T)}{\partial t} = \nabla \cdot (k\nabla T) + S^\Phi \quad (2.6)$$

Em algumas situações, para simplificar a solução do problema, considera-se ρ e c_p constantes. Nestes casos a Equação (2.6) pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\alpha \nabla T) + S \quad (2.7)$$

onde S é o termo fonte da equação de difusão térmica e α corresponde à difusividade térmica dada por:

$$\alpha = k/(\rho c_p) \quad (2.8)$$

Por outro lado, se na Equação (2.1) forem feitos $\lambda = 1$, $\Phi = M$, $\Gamma^\Phi = D_{ef}$ e $\vec{v} = 0$, tem-se a equação de difusão de massa:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \nabla \cdot (D_{ef} \nabla M) + S^\Phi \quad (2.9)$$

onde M é o teor de umidade (em base seca) em um volume infinitesimal, no instante t , e D_{ef} é a difusividade efetiva de massa.

Para este caso, a grandeza transportada é a água e o termo entre parênteses no segundo membro é o negativo da taxa de difusão de água por unidade de área, isto é, o fluxo de água por unidade de área em relação a um determinado referencial:

$$\vec{J} = -D_{ef} \nabla M. \quad (2.10)$$

A Equação (2.10) é conhecida como primeira lei de Fick.

2.3 Soluções para a equação de difusão

A análise de qualquer situação física dispõe, fundamentalmente, de três ferramentas para resolver o problema relacionado à situação estudada (Patankar, 1980; Bortoli, 2000; Maliska, 2004). Tais ferramentas são descritas a seguir:

I) Método Teórico

- a) Soluções analíticas;
- b) Soluções numéricas (experimentação numérica);

II) Método Experimental

- a) Experimentação em laboratório.

O método teórico (analítico ou numérico) requer um modelo matemático para descrever o fenômeno físico que resulta num conjunto de equações diferenciais, cuja complexidade está diretamente relacionada com a geometria do corpo, com as condições de contorno e inicial e com o próprio problema físico.

Em algumas situações de interesse, onde o modelo de difusão é utilizado na descrição do processo físico, a forma do corpo sob estudo pode ser aproximada para uma geometria regular e condições de contorno simples, o que requer uma menor dificuldade para se obter a solução analítica da equação. Nesses casos, os cálculos analíticos fornecem uma solução exata das equações diferenciais, num domínio contínuo e para todo ponto, a qualquer instante, pode-se saber o valor da grandeza de interesse. No entanto, tendo como base o universo das complexas equações necessárias para descrever situações reais, as soluções analíticas muitas vezes podem se distanciar demasiadamente do fenômeno físico real. Assim, para uma descrição mais precisa

dessas situações, torna-se necessário a utilização dos métodos numéricos que praticamente não apresentam restrições e podem ser aplicados em qualquer domínio para resolver problemas complexos com condições de contorno gerais e ainda considerar as propriedades termofísicas usadas no modelo como parâmetros variáveis.

Quanto à experimentação em laboratório, sua grande vantagem é o fato de tratar da configuração real do problema. No entanto, muitas vezes por razões do alto custo e de segurança, torna-se impossível a realização do experimento, como é o caso de escoamento multifásico em reservatórios de petróleo e da transferência de calor no núcleo de um reator.

2.3.1 Soluções analíticas para a equação de difusão

Apesar das limitações das soluções analíticas, o método analítico é uma ferramenta bastante utilizada e, naturalmente, não deve ser descartado, sendo uma de suas importantes aplicações, a validação das soluções numéricas. Na literatura pesquisada são encontrados importantes trabalhos nos quais a equação de difusão é resolvida analiticamente (Luikov, 1968; Crank, 1992; Brooker et al., 1992; Incropera, 1992; Bird et al., 2001; Chemkhi e Zagrouba, 2005; Silva et al., 2008c; Farias et al., 2009b; Saykova et al., 2009).

Lima et al. (2004) apresentaram uma metodologia analítica para prever o transporte de massa em elipsóides de revolução (esferóides oblatos e prolatos) usando o método de Galerkin. A equação de difusão, escrita em coordenadas cilíndricas, foi resolvida para uma condição de contorno de equilíbrio, considerando o coeficiente de difusão constante durante todo o processo. Após apresentar e analisar a distribuição do teor de umidade nos sólidos, os pesquisadores concluíram que os resultados obtidos estavam consistentes e que o modelo matemático desenvolvido pode ser empregado para resolver problemas que envolvam o processo de difusão, tais como secagem, umidificação, aquecimento e resfriamento, desde que a forma geométrica do corpo seja a de um disco circular, um cilindro infinito, uma esfera ou elipsóides.

Chemkhi e Zagrouba (2005) investigaram experimentalmente a secagem de três tipos de material argiloso variando a temperatura e a umidade relativa do ar de secagem. A finalidade da investigação foi estimar o coeficiente de difusão de massa a partir do ajuste da solução analítica da equação de difusão para uma geometria plana aos dados experimentais. Os autores concluíram que a difusividade de massa depende do teor de umidade e da estrutura física do produto, e também da temperatura ambiente.

Hacihafizoğlu et al. (2008) simularam a secagem de arroz em casca baseando-se no modelo da difusão líquida aplicada a sólidos esferoidais prolatos. A solução da equação de difusão foi ajustada aos dados experimentais e, ao compararem os resultados experimentais com os obtidos analiticamente para as formas esferoidais, esféricas e cilíndricas, concluíram que a geometria esferoidal prolata teve uma melhor concordância do que as outras geometrias.

Saykova et al. (2009) fizeram um estudo analítico para prever o coeficiente de difusão efetivo para placas retangulares e sólidos na forma de paralelepípedos a partir de curvas experimentais obtidas na secagem de materiais biológicos. O modelo matemático foi baseado na lei de Fick tridimensional em coordenadas cartesianas, empregando condições de contorno de Dirichlet. A metodologia desenvolvida estendeu as soluções analíticas unidimensionais para sistemas bi e tridimensionais pelo princípio da superposição.

Quando o corpo em estudo pode ser aproximado para uma parede infinita, retângulo ou paralelepípedo é necessário usar apenas a equação de difusão num sistema de coordenadas cartesianas. Nos casos em que a difusão ocorre em corpos com a forma cilíndrica ou esférica, deve-se usar sistemas de coordenadas onde as fronteiras da região coincidam com as superfícies coordenadas, nestes casos, coordenadas cilíndricas e esféricas, respectivamente. A análise vale para as situações uni, bi ou tridimensionais.

A equação de difusão transiente unidimensional nos sistemas de coordenadas cartesianas, cilíndricas e esféricas pode ser compactada em uma única equação (Özişik, 1990; Silva, 2007):

$$\frac{\partial(\lambda\Phi)}{\partial t} = \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^n \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) \quad (2.11)$$

em que

$n = 0$ implica coordenadas cartesianas,

$n = 1$ implica coordenadas cilíndricas,

$n = 2$ implica coordenadas esféricas,

λ e Γ^Φ são os parâmetros de transporte.

2.3.1.1 Condição de contorno de equilíbrio

Há numerosas aplicações em que a condição de contorno empregada considera conhecido o valor da grandeza de interesse na superfície do sólido. Este tipo de condição de contorno é denominada condição de contorno de equilíbrio, condição de contorno prescrita, condição de contorno de primeiro tipo ou, ainda, condição de contorno de Dirichlet. Assim, para uma dada condição inicial Φ_i e a condição de contorno dada por um valor igual a Φ_{eq} , em que Φ_{eq} é o valor da grandeza na superfície do corpo, Luikov (1968) apresenta várias soluções da Equação (2.5) para diversas geometrias. Estas soluções analíticas foram utilizadas para validar as soluções numéricas desenvolvidas nesta pesquisa, e pressupõem $\lambda = 1$, e $\Gamma^\Phi = \text{constante}$ e a grandeza inicial Φ_i uniformemente distribuída no domínio.

Para uma parede infinita de espessura L , o valor da grandeza genérica Φ , em função das variáveis x e t , com x variando de $(-L/2)$ a $(L/2)$, é dado por:

$$\frac{\Phi(x, t) - \Phi_{eq}}{\Phi_i - \Phi_{eq}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4(-1)^{n+2}}{(2n+1)\pi} \cos\left[\frac{(2n+1)\pi}{2} \frac{x}{(L/2)}\right] \exp\left[-\left(\frac{(2n+1)\pi}{2}\right)^2 \frac{\Gamma^\Phi t}{(L/2)^2}\right] \quad (2.12)$$

Observando a Equação (2.12), verifica-se que o valor da grandeza é obtido para qualquer posição x , em qualquer instante t , isto é, pode-se conhecer o perfil de $\Phi(x,t)$ no interior do corpo. Entretanto, em muitos casos de interesse, como a secagem, por exemplo, necessita-se conhecer o valor da grandeza no corpo inteiro, ao longo do processo. Para esses casos, calcula-se o valor médio da grandeza, no espaço unidimensional, pela seguinte expressão:

$$\bar{\Phi}(t) = \frac{\int \Phi(x, t) dx}{\int dx} \quad (2.13)$$

A Equação (2.13) pode ser generalizada para geometrias bi ou tridimensionais.

Assim sendo, substituindo a Equação (2.12) na Equação (2.13), obtém-se:

$$\frac{\bar{\Phi}(t) - \Phi_{eq}}{\Phi_i - \Phi_{eq}} = \frac{8}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2} \exp\left[-\left(\frac{(2n+1)\pi}{2}\right)^2 \frac{\Gamma^\Phi t}{(L/2)^2}\right] \quad (2.14)$$

Para um paralelepípedo de dimensões L_1 , L_2 e L_3 , a grandeza genérica Φ pode ser calculada em função da posição (x , y e z) e do tempo t . Quando o sistema de coordenadas cartesianas está localizado no centro μ_m y do paralelepípedo, a solução á dada pela seguinte equação:

$$\frac{\Phi(x, y, z, t) - \Phi_{eq}}{\Phi_i - \Phi_{eq}} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \hat{A}_n \hat{A}_m \hat{A}_k \cos\left(\mu_n \frac{x}{(L_1/2)}\right) \cos\left(\mu_m \frac{y}{(L_2/2)}\right) \cos\left(\mu_k \frac{z}{(L_3/2)}\right) \times \exp\left[-\left(\frac{\mu_n^2}{(L_1/2)^2} + \frac{\mu_m^2}{(L_2/2)^2} + \frac{\mu_k^2}{(L_3/2)^2}\right) \Gamma^{\Phi} t\right] \quad (2.15)$$

em que a expressão geral para \hat{A}_ℓ pode ser escrita como:

$$\hat{A}_\ell = \frac{2(-1)^{\ell+2}}{\mu_\ell} \quad (2.16)$$

sendo μ_ℓ dado por:

$$\mu_\ell = \frac{(2\ell + 1)\pi}{2} \quad (2.17)$$

com o subscripto ℓ representando os índices n , m e k .

Após a substituição da Equação (2.15) na Equação (2.13) adaptada para o caso tridimensional, obtêm-se a expressão para o valor médio da grandeza de interesse em função do tempo:

$$\frac{\bar{\Phi}(t) - \Phi_{\text{eq}}}{\Phi_i - \Phi_{\text{eq}}} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \hat{B}_n \hat{B}_m \hat{B}_k \exp \left[- \left(\frac{\mu_n^2}{(L_1/2)^2} + \frac{\mu_m^2}{(L_2/2)^2} + \frac{\mu_k^2}{(L_3/2)^2} \right) \Gamma \Phi t \right] \quad (2.18)$$

onde

$$\hat{B}_\ell = \frac{2}{\mu_\ell^2} \quad (2.19)$$

com o subscripto ℓ representando os índices n, m e k.

2.3.1.2 Condição de contorno convectiva

Em muitas aplicações práticas, o transporte da grandeza genérica na superfície do sólido ocorre por convecção, com um coeficiente de transferência convectivo h , para um fluido ambiente com um determinado valor da grandeza dado por Φ_∞ . Esta condição de contorno é denominada condição de contorno convectiva, sendo também conhecida como condição de contorno de terceiro tipo ou condição de contorno de Cauchy e descreve de forma mais realista como ocorre o transporte de calor ou de massa na superfície de um corpo do que a condição de contorno de primeiro tipo, já que, em geral, a grandeza não assume seu valor de equilíbrio instantaneamente.

Um esquema, representando a condição de contorno convectiva, está mostrado na Figura 2.1.

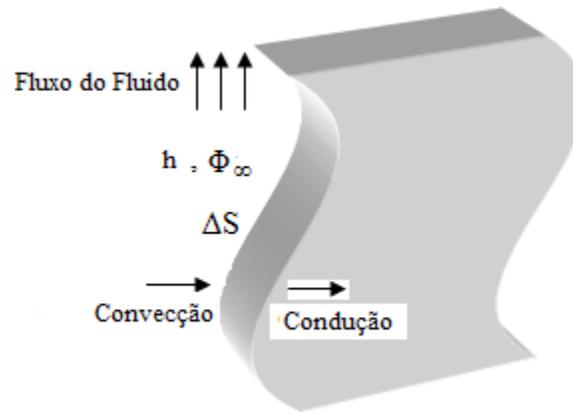


Figura 2.1 – Convecção na fronteira: condição de contorno de Cauchy.

A formulação matemática é obtida fazendo-se o balanço do transporte da grandeza Φ na fronteira, isto é, deve-se igualar o fluxo por difusão no interior da superfície com o fluxo convectivo que chega nessa mesma superfície, pelo lado externo (Özişik, 1990; Bird et al., 2001).

Assim, a condição de contorno convectiva para a situação esquematizada na Figura 2.1, pode ser representada pela Equação (2.20):

$$h(\Phi_{\infty} - \Phi|_s) = -\Gamma^{\Phi} \left. \frac{\partial \Phi}{\partial n} \right|_s \quad (2.20)$$

onde o subscrito s significa a superfície do corpo e n representa o módulo do vetor unitário perpendicular à área ΔS .

O número de Biot (Bi) é definido como a razão entre a resistência interna e a resistência externa ao fluxo na superfície. Assim, para um corpo com comprimento característico L_c , o número de Biot é calculado pela expressão:

$$\text{Bi} = \frac{hL_c}{\Gamma^\Phi} \quad (2.21)$$

Em Luikov (1968) são encontradas soluções analíticas para a equação de difusão com a condição de contorno de Cauchy para parede infinita e paralelepípedo, as quais serão apresentadas a seguir.

Para a parede infinita, a solução para $\Phi(x, t)$ é dada por:

$$\frac{\Phi(x, t) - \Phi_\infty}{\Phi_i - \Phi_\infty} = \sum_{n=1}^{\infty} \hat{C}_n \exp\left(-\zeta_n^2 \frac{\Gamma^\Phi}{(L/2)^2} t\right) \cos\left(\frac{\zeta_n}{L/2} x\right) \quad (2.22)$$

em que

$$\hat{C}_n = \frac{4 \text{sen}(\zeta_n)}{2\zeta_n + \text{sen}(2\zeta_n)} \quad (2.23)$$

onde ζ_n são as raízes positivas da equação transcendental

$$\zeta_n \text{tg}(\zeta_n) = \text{Bi} \quad (2.24)$$

O valor médio da grandeza $\bar{\Phi}(t)$ é obtido a partir da substituição da Equação (2.22) na Equação (2.13), o que resulta em:

$$\frac{\bar{\Phi}(t) - \Phi_{\text{eq}}}{\Phi_i - \Phi_{\text{eq}}} = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{F}_n \exp \left[- \left(\frac{(2n+1)\pi}{2} \right)^2 \frac{\Gamma \Phi t}{(L/2)^2} \right] \quad (2.25)$$

onde

$$\hat{F}_n = \frac{2\text{Bi}^2}{\zeta_n^2 (\text{Bi}^2 + \text{Bi} + \zeta_n^2)} \quad (2.26)$$

Para o paralelepípedo, os valores da grandeza podem ser calculados para cada ponto no espaço e para cada instante t por:

$$\begin{aligned} \frac{\Phi(x, y, z, t) - \Phi_{\text{eq}}}{\Phi_i - \Phi_{\text{eq}}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \hat{D}_n \hat{D}_m \hat{D}_k \cos \left(\hat{\zeta}_n \frac{x}{(L_1/2)} \right) \cos \left(\hat{\zeta}_m \frac{y}{(L_2/2)} \right) \cos \left(\hat{\zeta}_k \frac{z}{(L_3/2)} \right) \\ &\times \exp \left[- \left(\frac{\hat{\zeta}_n^2}{(L_1/2)^2} + \frac{\hat{\zeta}_m^2}{(L_2/2)^2} + \frac{\hat{\zeta}_k^2}{(L_3/2)^2} \right) \Gamma \Phi \times t \right] \end{aligned} \quad (2.27)$$

em que

$$\hat{D}_\ell = \frac{4 \text{sen}(\hat{\zeta}_\ell)}{2\hat{\zeta}_\ell + \text{sen}(2\hat{\zeta}_\ell)} \quad (2.28)$$

onde o subscrito ℓ representa os índices n , m e k e ζ_ℓ são as raízes positivas da equação transcendental dada abaixo:

$$\hat{\zeta}_\ell \text{tg}(\hat{\zeta}_\ell) = \text{Bi} \quad (2.29)$$

A solução para o valor médio da grandeza no caso do paralelepípedo é obtida da substituição da Equação (2.27) na Equação (2.13) devidamente adaptada para o caso tridimensional:

$$\frac{\bar{\Phi}(t) - \Phi_{eq}}{\Phi_i - \Phi_{eq}} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \hat{E}_n \hat{E}_m \hat{E}_k \times \exp \left[- \left(\frac{\hat{\zeta}_n^2}{(L_1/2)^2} + \frac{\hat{\zeta}_m^2}{(L_2/2)^2} + \frac{\hat{\zeta}_k^2}{(L_3/2)^2} \right) \Gamma^{\Phi} t \right] \quad (2.30)$$

com os coeficientes \hat{E}_ℓ dados por:

$$\hat{E}_\ell = \frac{2Bi^2}{\hat{\zeta}_\ell^2 (Bi^2 + Bi + \hat{\zeta}_\ell^2)} \quad (2.31)$$

onde o subscrito ℓ representa os índices n, m e k.

2.3.2 Soluções numéricas para a equação da difusão

O uso de técnicas numéricas para a solução de problemas complexos abrangendo as mais diversas áreas de interesse é hoje uma realidade graças ao desenvolvimento de computadores de alta velocidade e grande capacidade de armazenamento. Por isso, o desenvolvimento de métodos numéricos rápidos e precisos têm sido um dos principais desafios de inúmeros pesquisadores nas últimas décadas. Em função dessa disponibilidade computacional, e mesmo reconhecendo a importância das soluções analíticas para problemas de difusão, é crescente o número de adeptos das soluções numéricas (Bortoli, 2000; Maliska, 2004).

Um método analítico com habilidade para resolver um sistema de equações diferenciais fornece uma solução de forma fechada e é possível, então, calcular os valores das variáveis dependentes em nível infinitesimal, isto é, para um número infinito de pontos. Por sua vez, a tarefa de um método numérico é resolver uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes por expressões algébricas que envolvam a função incógnita. Ao final, obtém-se um sistema de equações onde as variáveis são os valores da grandeza a ser calculada. Assim, a solução obtida é dada para um número discreto de pontos, com um determinado erro e , quanto maior for esse número de pontos, mais perto da solução exata será a solução numérica. Uma vantagem evidente da solução numérica sobre a analítica reside na possibilidade de aproximar o modelo objeto de estudo para as condições físicas reais (Maliska, 2004; Silva, 2007; Silva, 2010).

Os métodos tradicionais para a solução numérica de equações diferenciais são os Métodos de Elementos Finitos (MEF), Diferenças Finitas (MDF) e de Volumes Finitos (MVF). A solução por diferenças finitas consiste na substituição do operador diferencial pelo seu correspondente numérico (Maliska, 2004).

Por outro lado, o método dos elementos finitos é baseado em dois conceitos principais:

- a) Solução baseada numa "Integral" da equação;
- b) Aproximação da solução por uma função definida num subdomínio resultante da discretização do domínio.

A idéia básica é que ao invés de se tentar obter a solução exata como no MDF, tenta-se obter uma solução aproximada que reduza a um mínimo o erro na aproximação da equação. A solução do problema discreto deve pertencer a um espaço de funções construído pelos valores da função variando de uma dada maneira, por exemplo, linearmente ou quadraticamente, entre os valores dos pontos nodais. Os pontos nodais, ou nós, são pontos típicos dos elementos como os vértices, os pontos médios dos lados, os pontos médios do elemento, entre outros (Campos, 2006). Existem vários métodos para se definir a forma como o erro será minimizado.

Tanto o MDF, como o MEF não trabalham com volumes de controle e sim com pontos da malha, e, conseqüentemente, não são conservativos em nível discreto (Bortoli, 2000; Maliska, 2004).

O método dos volumes finitos consiste em dividir o domínio físico sob estudo em um número finito de subdomínios de volumes elementares denominados de volumes de controle ou volumes finitos e satisfaz a conservação da propriedade em questão em nível desses volumes elementares. A discretização é feita integrando todos os termos da equação que governa o fenômeno, sobre cada volume de controle, no espaço e no tempo. A solução resultante implica que a conservação da grandeza de interesse é satisfeita em qualquer volume de controle e, conseqüentemente, em todo domínio físico estudado (Maliska, 2004; Cadé et al., 2005).

Existe, disponível na literatura, uma quantidade substancial de trabalhos que utilizam ferramentas numéricas para resolver problemas físicos nas mais diversas áreas de interesse.

Jia et al. (2001) simularam a secagem de corpos individuais bi e tridimensionais, incluindo o estudo de têmpera e análise de tensões internas. Para realizar a simulação, os pesquisadores desenvolveram um código computacional em ambiente MATLAB, empregando o método dos elementos finitos para resolver a equação de difusão de calor e massa. Segundo os autores, o código computacional desenvolvido tornou-se uma ferramenta útil para prever as distribuições de temperatura, teor de umidade e tensões internas no interior dos corpos individuais.

Nascimento (2002) estudou o fenômeno da difusão transiente em sólidos na forma de paralelepípedos e apresentou vários modelos matemáticos utilizando um sistema tridimensional em coordenadas cartesianas, com o objetivo de encontrar soluções analíticas e numéricas para a equação de difusão. Na solução numérica foi usado o método dos volumes finitos com uma formulação totalmente implícita, com a consideração das propriedades termofísicas constantes ou variáveis, com condições de contorno de primeiro e terceiro tipo, com ou sem efeito da retração

dos corpos. Essa solução foi aplicada ao estudo da secagem de tijolos cerâmicos moldados com argila vermelha e, segundo o autor, ao se comparar os dados simulados com os experimentais houve uma excelente concordância entre ambos.

Cadé et al. (2005) utilizaram coordenadas cartesianas, numa abordagem tridimensional para prever o transporte de massa durante a secagem de tijolos cerâmicos vazados. Neste estudo foi apresentada e analisada a solução numérica da equação de difusão, sendo a mesma discretizada através da técnica de volumes finitos, considerando as propriedades termofísicas e condições de contorno na superfície constantes. Os autores concluíram que a metodologia matemática utilizada foi adequada para obtenção da solução numérica.

Amendola e Queiroz (2007) calcularam o coeficiente de difusão de massa considerando a banana como um cilindro infinito, assumindo que as dimensões da fruta e a difusividade de massa permanecessem constantes durante todo o processo. Explorando a simetria axial do corpo, os pesquisadores aplicaram um modelo matemático simplificado baseado na Lei de Fick e a partir de resultados experimentais duas metodologias foram utilizadas: a primeira foi desenvolvida usando-se uma aproximação da solução analítica e a segunda, a simulação numérica, foi desenvolvida de acordo com o esquema implícito via método de diferenças finitas. Os algoritmos associados com estas metodologias foram implementados no ambiente MATLAB para calcular o coeficiente de difusão de massa. Os autores concluíram que os valores obtidos pelas duas metodologias estavam consistentes, tanto entre si, como com a literatura.

Pode-se destacar ainda o trabalho de Silva et al. (2008a) que fizeram uma simulação numérica da difusão da água em sólidos cilíndricos, admitindo que os coeficientes de transporte e o raio do cilindro variavam durante o processo. O modelo matemático desenvolvido foi aplicado para simular a secagem de bananas e arroz em casca, usando dados experimentais obtidos da literatura. Os autores concluíram que, ao considerar a difusividade de massa variável, os resultados são melhores que os obtidos supondo tal parâmetro constante.

Com o objetivo de verificar a influência das condições de secagem sobre a qualidade da soja, Rafiee et al. (2008) conduziram um estudo sobre a transferência difusiva de massa em corpos individuais, empregando o método de elementos finitos. Um modelo matemático bidimensional escrito em coordenadas cartesianas é apresentado, explorando a condição de simetria do corpo e sem considerar o encolhimento ocorrido durante a secagem. Os dados simulados foram comparados com dados experimentais obtidos a partir de experiências de secagem realizadas em camada delgada para grãos de soja para várias condições de secagem. Os autores observaram uma boa concordância entre os resultados simulados e os dados experimentais.

Na pesquisa desenvolvida por Batista et al. (2008) são oferecidas técnicas numéricas, analíticas e experimentais a problemas específicos envolvendo transferência de calor e massa, retração volumétrica e tensões oriundas de gradientes térmicos e de umidade, direcionadas ao desenvolvimento de sistemas de secagem, particularmente a secagem de materiais cerâmicos com forma de paralelepípedo (tijolos cerâmicos) nos níveis de partícula e de equipamento industrial (secador). No ambiente de secagem, várias temperaturas e umidades relativas foram usadas, obtendo-se assim várias curvas da cinética de secagem e encolhimento. Segundo os autores, o processo de secagem ocorre no período de taxa decrescente e a retração volumétrica ocorre em dois períodos. Para as condições adotadas de ensaio de choque térmico, os pesquisadores observaram que não houve danos estruturais nos corpos de prova.

Vários trabalhos para corpos de forma elíptica são reportados na literatura. Lima (1999) apresentou soluções analíticas e numéricas da equação de difusão bidimensional para sólidos esferoidais prolatos com propriedades termofísicas constantes ou variáveis e condições de contorno de equilíbrio ou convectiva, com ou sem encolhimento, usando o método dos volumes finitos. A solução numérica utilizou malhas ortogonais, geradas por expressões analíticas, válidas somente para elipsóides. Os modelos apresentados independem da natureza física do sólido. No entanto, o autor enfatizou a secagem de bananas, variedade “nanicão”. Os resultados obtidos

foram comparados com dados experimentais da literatura que, segundo o autor foram consistentes.

Carmo (2004) apresentou soluções numéricas da equação de difusão, válidas para sólidos com geometria do tipo esferoidal oblata. Utilizando o método dos volumes finitos, com uma formulação totalmente implícita, o pesquisador levou em consideração o encolhimento dos corpos, bem como a variação nas propriedades termofísicas, além da condição de contorno convectiva. Os modelos formulados foram aplicados na descrição da secagem em multipasse (têmpera) de lentilhas e o autor concluiu que os resultados são consistentes, na comparação dos dados experimentais com a simulação numérica.

Uma solução numérica da equação de difusão bidimensional transiente foi apresentada por Carmo e Lima (2008) para descrever a transferência de massa dentro de esferóides oblatos, considerando o coeficiente de difusão constante e condição de contorno convectiva. Os únicos parâmetros variáveis foram as dimensões do sólido. O modelo foi validado com resultados analíticos encontrados na literatura e segundo os autores uma boa concordância foi observada. De acordo com os autores, o modelo matemático apresentado é consistente e pode resolver outros problemas de difusão, desde que os corpos sejam aproximados para discos ou esferas e/ou outros casos com propriedades variáveis, quando pequenas modificações são feitas nos modelos.

Silva, C. (2010) apresentou soluções analíticas e numéricas da equação da difusão aplicadas a sólidos com a forma cilíndrica. Com relação à solução numérica, a equação de difusão unidimensional foi discretizada usando o método de volumes finitos, com uma formulação totalmente implícita. Como parte do estudo, foi também desenvolvido um software na plataforma Windows, utilizando a linguagem Fortran, incluindo a interface com o usuário. O software pode ser utilizado tanto para simular processos difusivos quanto para determinar parâmetros termofísicos, via técnica de otimização. O código computacional desenvolvido, incluindo programas envolvendo otimizadores, soluções analíticas e numéricas, foi aplicado na

descrição da secagem de bananas em camada fina, usando dados experimentais disponíveis na literatura. Na pesquisa, foram simulados vários modelos levando em consideração propriedades do transporte constantes ou variáveis, com ou sem encolhimento, para as condições de contorno prescrita ou convectiva. Segundo a pesquisadora, o modelo mais consistente fisicamente foi o que considerou simultaneamente dimensões e parâmetros termofísicos variáveis com condição de contorno de terceiro tipo.

Uma solução numérica da equação da difusão é apresentada por Silva et al. (2010b) visando determinar o coeficiente de transferência convectivo de calor para frutas em forma esférica, usando dados experimentais da temperatura dentro das frutas ao longo do seu resfriamento. Na metodologia proposta, assume-se que a posição do termopar dentro da fruta é desconhecida e pode ser obtida através de várias simulações, supondo diferentes posições para este sensor. A posição do termopar é então determinada através da análise do indicador estatístico qui-quadrado, permitindo calcular o coeficiente de transferência convectivo de massa. A metodologia proposta foi aplicada a figos individuais, a tomates e laranjas, sendo a cinética de resfriamento descrita em detalhe para cada fruta. Em comparação com dados disponíveis na literatura, os autores afirmaram que os resultados encontrados para os parâmetros são coerentes, já que as discrepâncias entre os valores foram pequenas.

Existem alguns trabalhos que consideram a geometria arbitrária dos corpos e que empregam coordenadas generalizadas para resolver numericamente a equação de difusão. Dentre eles, encontra-se Maliska (1998) que desenvolveu o Transcal, um software cujo objetivo foi disponibilizar à comunidade científica soluções da equação de difusão quando o problema físico envolver geometria arbitrária bidimensional. Segundo Silva (2007), este software é utilizado de uma forma geral para qualquer estudo que envolva problemas difusivos, não tendo sido observado na literatura alguma aplicação específica sobre secagem.

Wu et al. (2004) desenvolveram um modelo para descrever a difusão simultânea de calor e massa durante o processo de secagem de arroz em camada delgada. Para resolver a equação de difusão, os autores empregaram o método de volumes finitos, utilizando malhas estruturadas ortogonais e coordenadas generalizadas, válidas para elipsóides, cujas geometrias são consideradas tridimensionais. Neste estudo, os autores concluíram que o modelo apresentado pode ser usado para descrever o processo de secagem em malhas ortogonais (sem termos cruzados).

Por sua vez, Salinas et al. (2004) apresentaram uma modelagem matemática bidimensional da cinética de secagem de um secador de madeiras. As equações governantes são resolvidas numericamente através do método de volumes finitos em coordenadas generalizadas. Os autores concluíram que o método proposto permite simular satisfatoriamente a secagem de madeiras, obtendo informações transitórias detalhadas das distribuições de umidade no interior do corpo.

Silva (2007) fez um estudo do processo de difusão em geometria arbitrária, apresentando a solução numérica da equação que descreve o fenômeno para sólidos obtidos por extrusão e propondo uma solução para sólidos de revolução. Para tal, a equação de difusão, escrita em coordenadas generalizadas, foi discretizada e resolvida numericamente, via método dos volumes finitos, com uma formulação totalmente implícita. As malhas não-ortogonais bidimensionais foram geradas numericamente, sendo válidas para qualquer sólido com simetria de revolução. Diversas simulações foram realizadas, sendo os resultados consistentes e coerentes com valores esperados. O código computacional desenvolvido foi aplicado na simulação da cinética de secagem de membranas cerâmicas na forma de tubos para várias condições de secagem. Os resultados numéricos foram comparados com dados experimentais. A partir desta comparação foi determinada uma expressão para a difusividade de massa em função do teor de umidade e da temperatura do ar de secagem, assim como o valor do coeficiente de transferência convectivo de massa correspondente para cada temperatura de secagem.

Soluções numéricas da equação de difusão para sólidos obtidos através da revolução de superfícies bidimensionais arbitrárias em torno de um eixo fixo contido no plano dessas superfícies, tirando proveito de condições de simetria, podem ser encontradas em Silva et al. (2007) e Silva et al. (2009b). Para estes casos, a equação da difusão foi discretizada em coordenadas generalizadas, sendo empregado o método dos volumes finitos com uma formulação totalmente implícita e condição de contorno do primeiro tipo. Os estudos possibilitaram a descrição da secagem de corpos com geometria complexa e os resultados foram comparados com soluções analíticas conhecidas. Segundo os autores, houve uma boa concordância entre os resultados obtidos através da solução proposta e aqueles obtidos através de soluções disponíveis na literatura.

Estudos semelhantes aos descritos no parágrafo anterior foram feitos por Silva et al. (2008b) e Silva et al. (2010a), só que a condição de contorno utilizada foi a de terceiro tipo. A condição de simetria explorada na solução proposta permite reduzir o esforço computacional exigido nos métodos tradicionais com o uso de malhas tridimensionais. Segundo os autores do primeiro trabalho citado neste parágrafo, a comparação dos dados simulados com aqueles obtidos através de soluções analíticas permitiu observar uma boa concordância para os casos analisados. Com relação ao segundo trabalho, foram feitas três aplicações. A primeira delas foi a secagem de banana, cuja geometria foi obtida pela revolução de uma malha elipsoidal, enquanto a segunda e a terceira aplicações foram direcionadas ao resfriamento de pepino e à secagem de arroz, respectivamente. Em ambas, a geometria foi considerada a de um cilindro finito; obtido a partir da revolução de um retângulo em torno do eixo y . Os autores concluíram que a solução numérica proposta produziu resultados compatíveis em todos os casos analisados.

Silva et al. (2009a) determinaram uma expressão para a difusividade da água constante ou variável, utilizando o método inverso e pressupondo que o transporte de água no interior de um sólido ocorra unicamente por difusão líquida. Com o uso de coordenadas generalizadas e condição de contorno de primeiro tipo, a equação de difusão foi discretizada e resolvida numericamente para sólidos obtidos por revolução de áreas bidimensionais arbitrárias. A partir de

dados da literatura, uma aplicação da metodologia à secagem de bananas, considerada como um cilindro finito, indicou que o algoritmo desenvolvido foi eficiente na determinação de uma expressão para a difusividade efetiva e, conseqüentemente, na descrição da cinética de secagem do produto.

Para estudar a influência da geometria na cinética de secagem de bananas, Silva et al. (2009d) consideraram que o modelo difusivo descreve de forma satisfatória o processo de secagem com condição de contorno de primeiro tipo e a difusividade como uma função do teor de umidade local. As geometrias usadas para representar a banana foram: cilindro infinito, cilindro finito e elipsóide. A fim de simular a cinética de secagem, a equação de difusão foi resolvida através do método de volumes finitos com uma formulação totalmente implícita, usando coordenadas cilíndricas e coordenadas generalizadas. Na análise foram utilizados dados disponíveis na literatura e as expressões para a difusividade foram determinadas por otimização, usando método inverso. Segundo os autores, o melhor modelo para representar geometricamente a banana foi o elipsóide.

Existem, disponíveis para a comunidade científica, os grandes pacotes comerciais destinados ao estudo computacional da dinâmica dos fluidos, os chamados CFD's (Computational Fluid Dynamics) como, por exemplo, o ALGOR, o ANSYS CFX e o PHOENIX. No entanto, na área de secagem, apesar de alguns trabalhos disponíveis, esta não parece ser a ferramenta mais empregada pelos pesquisadores (Silva et al., 2007).

Portanto, para situar a importância deste trabalho dentro da linha de pesquisa de transferência de calor e massa, deve-se observar que no levantamento bibliográfico realizado, não foi encontrado nenhum trabalho abordando difusão tridimensional em corpos com geometria arbitrária usando coordenadas generalizadas e malhas não-ortogonais através do método dos volumes finitos. Assim, diante do exposto, esta pesquisa deverá disponibilizar para a comunidade científica, importantes subsídios sobre a difusão 3D em sólidos com geometria complexa.

2.4 Sistemas de eixos em coordenadas generalizadas

Para que a equação de difusão possa ser resolvida numericamente, levando em consideração a forma arbitrária de um corpo, é necessário criar um sistema de coordenadas que seja adaptável a sua geometria. Para tal, deve-se fazer um estudo, cujo objetivo é generalizar o sistema de eixos coordenados, admitindo que os mesmos possam ser curvilíneos e deve-se, ainda, eliminar a restrição de que eles sejam ortogonais (Butkov, 1978; Boas, 1983; Maliska, 2004; Silva, 2007; Silva, W., 2009). Uma revisão detalhada dos fundamentos sobre coordenadas generalizadas pode ser encontrada em Maliska (2004); Silva (2007) e Silva, W. (2009).

Observando a situação descrita na Figura 2.2, verifica-se que o ponto P pode ser identificado através de dois sistemas de eixos, sendo que um deles é um sistema de eixos ortogonais em que a posição do ponto P é definida pelas coordenadas cartesianas x , y e z , enquanto o outro é um sistema de eixos em coordenadas generalizadas $\xi\eta\gamma$. Como pode ser visto na Figura 2.2, o sistema de eixos em coordenadas generalizadas, também denominado de sistema transformado, possui eixos curvilíneos que podem ser dispostos em qualquer direção.

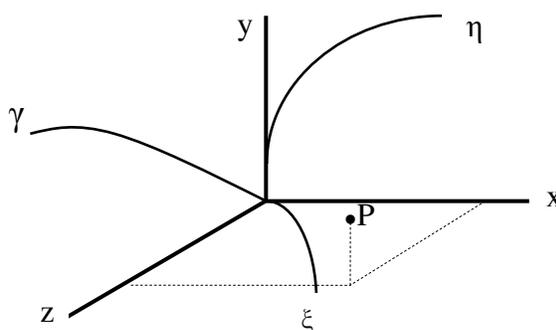


Figura 2.2 - Sistemas de eixos utilizados para especificar a localização do ponto P em coordenadas cartesianas e em coordenadas generalizadas.

As coordenadas curvilíneas do ponto P da Figura 2.2 podem se relacionar às coordenadas cartesianas pelas equações de transformação dadas a seguir:

$$\xi = \xi(x, y, z) \quad (2.32)$$

$$\eta = \eta(x, y, z) \quad (2.33)$$

$$\gamma = \gamma(x, y, z) \quad (2.34)$$

A propósito, as Equações (2.32) a (2.34) embutem uma simplificação que consiste na suposição de que o novo sistema de eixos não apresenta mudanças com o tempo.

Expressões matemáticas dos diferenciais em cada eixo coordenado no domínio transformado podem ser relacionadas com as expressões para os diferenciais em cada eixo no domínio físico, para se obter as métricas de transformação das coordenadas cartesianas (x, y, z) em coordenadas curvilíneas (ξ, η, γ) , dadas a seguir:

$$\xi_x = J(y_\eta z_\gamma - y_\gamma z_\eta) \quad (2.35)$$

$$\xi_y = -J(x_\eta z_\gamma - x_\gamma z_\eta) \quad (2.36)$$

$$\xi_z = J(x_\eta y_\gamma - x_\gamma y_\eta) \quad (2.37)$$

$$\eta_x = -J(y_\xi z_\gamma - y_\gamma z_\xi) \quad (2.38)$$

$$\eta_y = J(x_\xi z_\gamma - x_\gamma z_\xi) \quad (2.39)$$

$$\eta_z = -J(x_\xi y_\gamma - x_\gamma y_\xi) \quad (2.40)$$

$$\gamma_x = \mathbf{J}(y_\xi z_\eta - y_\eta z_\xi) \quad (2.41)$$

$$\gamma_y = -\mathbf{J}(x_\xi z_\eta - x_\eta z_\xi) \quad (2.42)$$

$$\gamma_z = \mathbf{J}(x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi) \quad (2.43)$$

em que a notação o_ℓ significa a derivada de o em relação a ℓ e \mathbf{J} é o Jacobiano da transformação definido como:

$$\frac{1}{\mathbf{J}} = \det \begin{bmatrix} x_\xi & x_\eta & x_\gamma \\ y_\xi & y_\eta & y_\gamma \\ z_\xi & z_\eta & z_\gamma \end{bmatrix} \quad (2.44)$$

ou ainda

$$\frac{1}{\mathbf{J}} = \left[x_\xi (y_\eta z_\gamma - y_\gamma z_\eta) - x_\eta (y_\xi z_\gamma - y_\gamma z_\xi) + x_\gamma (y_\xi z_\eta - y_\eta z_\xi) \right] \quad (2.45)$$

O teorema da função inversa admite a existência da inversa da transformação, permitindo calcular as métricas da transformação inversa, dadas por:

$$x_\xi = \frac{\eta_\gamma \gamma_z - \eta_z \gamma_y}{\mathbf{J}} \quad (2.46)$$

$$x_\eta = -\frac{\xi_\gamma \gamma_z - \xi_z \gamma_y}{\mathbf{J}} \quad (2.47)$$

$$x_\gamma = \frac{\xi_\gamma \eta_z - \xi_z \eta_y}{\mathbf{J}} \quad (2.48)$$

$$y_{\xi} = -\frac{\eta_x \gamma_z - \eta_z \gamma_x}{J} \quad (2.49)$$

$$y_{\eta} = \frac{\xi_x \gamma_z - \xi_z \gamma_x}{J} \quad (2.50)$$

$$y_{\gamma} = -\frac{\xi_x \eta_z - \xi_z \eta_x}{J} \quad (2.51)$$

$$z_{\xi} = \frac{\eta_x \gamma_y - \eta_y \gamma_x}{J} \quad (2.52)$$

$$z_{\eta} = -\frac{\xi_x \gamma_y - \xi_y \gamma_x}{J} \quad (2.53)$$

$$z_{\gamma} = \frac{\xi_x \eta_y - \xi_y \eta_x}{J} \quad (2.54)$$

Uma vez que foram estabelecidas as equações de transformação através das quais um sistema de coordenadas cartesianas pode ser convertido num sistema de coordenadas curvilíneas, e vice-versa, torna-se necessário encontrar expressões gerais que calculem comprimentos, áreas e volumes, bem como a distância de um ponto a um plano nesse novo sistema de coordenadas generalizadas.

2.4.1 Comprimentos, áreas e volumes em coordenadas generalizadas

Em Maliska (2004), Silva (2007) e Silva, W. (2009), são encontradas deduções detalhadas para equações que calculam comprimentos, áreas e volumes em coordenadas generalizadas, conforme o resumo feito a seguir.

2.4.1.1 Comprimento ao longo de um eixo curvilíneo

A Figura 2.3 destaca um dado segmento situado na direção do eixo curvilíneo ξ .

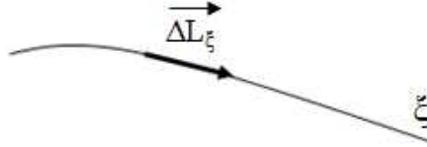


Figura 2.3 - Destaque para um comprimento elementar ΔL_ξ ao longo do eixo curvilíneo ξ .

A expressão para o cálculo do seu comprimento é dada por:

$$\Delta L_\xi = \sqrt{(x_\xi)^2 + (y_\xi)^2 + (z_\xi)^2} \Delta \xi \quad (2.55)$$

onde ΔL_ξ é o comprimento de um segmento ao longo do eixo ξ .

De maneira semelhante podem ser calculadas as distâncias elementares ΔL_η e ΔL_γ ao longo dos eixos η e γ , respectivamente. As expressões podem ser observadas através das Equações (2.56) e (2.57).

$$\Delta L_\eta = \sqrt{(x_\eta)^2 + (y_\eta)^2 + (z_\eta)^2} \Delta \eta \quad (2.56)$$

$$\Delta L_\gamma = \sqrt{(x_\gamma)^2 + (y_\gamma)^2 + (z_\gamma)^2} \Delta \gamma \quad (2.57)$$

em que

ΔL_η é o comprimento de um segmento ao longo do eixo η .

ΔL_γ é o comprimento de um segmento ao longo do eixo γ .

2.4.1.2 Área definida por vetores elementares sobre eixos curvilíneos

Dados dois vetores num plano, a área da superfície por eles definida pode ser calculada como o módulo do produto vetorial entre eles.

A Figura 2.4 mostra detalhes de como determinar o valor de uma área definida por dois vetores elementares localizados no plano transformado $\xi\eta$ que está coincidindo com o plano físico xy .

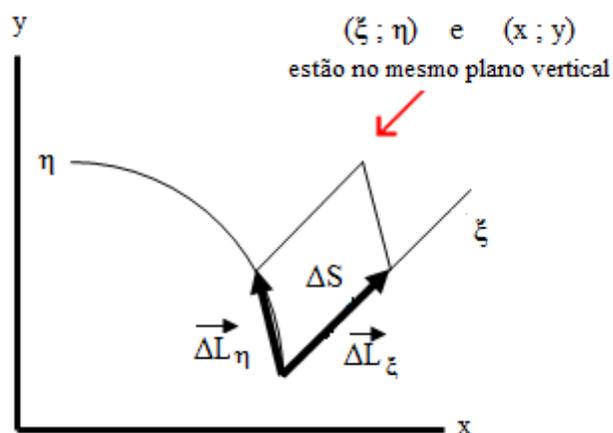


Figura 2.4 - Área elementar ΔS definida pelos vetores elementares ΔL_ξ e ΔL_η .

A expressão para a área do paralelogramo é mostrada a seguir:

$$\Delta S = \left| \vec{\Delta L}_\xi \times \vec{\Delta L}_\eta \right| \quad (2.58)$$

Da Equação (2.58), pode-se escrever:

$$\Delta S = (x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi) \Delta \xi \Delta \eta \quad (2.59)$$

Pode ser observado que o termo entre parêntesis é o inverso do Jacobiano para uma situação bidimensional. Portanto a área pode ser expressa da seguinte forma:

$$\Delta S = \frac{1}{J} \Delta \xi \Delta \eta \quad (2.60)$$

e $\Delta \xi \Delta \eta$ pode ser definido como a área no domínio transformado.

2.4.1.3 Volume definido por vetores elementares sobre eixos curvilíneos

O volume pode ser calculado como o produto misto dos três vetores definidos nas arestas de um sólido, conforme pode ser visto na Figura 2.5, que mostra os detalhes de um paralelepípedo de arestas ΔL_ξ , ΔL_η e ΔL_γ .

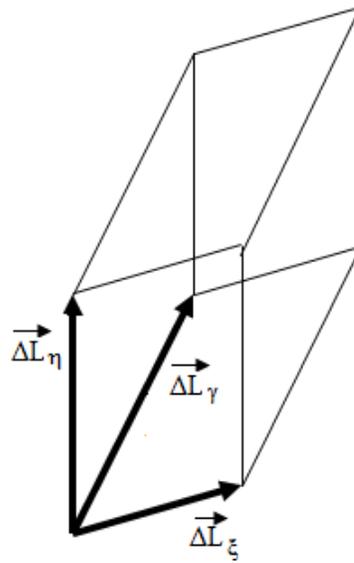


Figura 2.5 - Paralelepípedo regular de volume elementar ΔV com arestas ΔL_ξ , ΔL_η e ΔL_γ .

Assim, o volume do sólido pode ser dado pela expressão abaixo:

$$\Delta V = \left| \vec{\Delta L}_\xi \cdot (\vec{\Delta L}_\eta \times \vec{\Delta L}_\gamma) \right| \quad (2.61)$$

A Equação (2.61) pode ser reescrita como:

$$\Delta V = \begin{vmatrix} x_\xi & x_\eta & x_\gamma \\ y_\xi & y_\eta & y_\gamma \\ z_\xi & z_\eta & z_\gamma \end{vmatrix} \Delta \xi \Delta \eta \Delta \gamma \quad (2.62)$$

Pode-se identificar o determinante acima como o inverso do Jacobiano e dessa forma a expressão para o volume pode ser reescrita do seguinte modo:

$$\Delta V = \frac{1}{J} \Delta \xi \Delta \eta \Delta \gamma \quad (2.63)$$

e $\Delta \xi \Delta \eta \Delta \gamma$ pode ser definido como o volume no domínio transformado.

Uma interpretação geométrica importante pode ser extraída das Equações (2.60) e (2.63). Frequentemente, as linhas ξ , η e γ no domínio transformado são identificados por inteiros consecutivos e, portanto, $\Delta \xi$, $\Delta \eta$ e $\Delta \gamma$ são iguais a unidade em todas as equações que eles aparecem. Assim, pode-se constatar que o inverso do jacobiano representa o valor da área ou do volume no domínio físico, para os casos bi ou tridimensionais, respectivamente.

Vale salientar ainda que Maliska (2004) calcula volumes e áreas quando os vetores estão dispostos sobre os eixos curvilíneos e localizados na origem, ou seja, são os lados ou arestas das figuras geométricas. Portanto, a intersecção dos vetores elementares que definem a região de interesse a ser trabalhada coincide com o cruzamento das linhas que delimitam a referida região, tornando-a uma figura regular. Assim, para o caso de áreas, o quadrilátero está localizado no plano físico xy , que por sua vez coincide com o plano transformado $\xi\eta$. Torna-se necessário, então, generalizar esses cálculos para uma figura irregular qualquer, para que seja possível calcular o volume ou a área de corpos com qualquer forma geométrica. Uma abordagem dessa natureza não foi encontrada na literatura. Assim, uma modelagem matemática foi desenvolvida durante esta pesquisa para efetuar os referidos cálculos e será apresentada no Capítulo 3.

CAPÍTULO 3

MATERIAL E MÉTODOS

3.1 Fluxo de uma grandeza através de uma área curvilínea elementar

A expressão geral para o fluxo φ' de uma grandeza vetorial \vec{G} através de uma área ΔS é dada a seguir:

$$\varphi' = \int_{\Delta S} \vec{G} \cdot \hat{n} dS \quad (3.1)$$

onde \hat{n} é o vetor unitário perpendicular à área ΔS .

Com a finalidade de utilizar o conceito de fluxo no sistema de eixos em coordenadas generalizadas (ver, por exemplo, Maliska, 2004; Silva, 2007; Silva, W., 2009) estabelecido pela Equação (3.1) é apresentado na Figura 3.1 a grandeza vetorial \vec{G} e a sua componente G_n , perpendicular a uma área curvilínea situada na superfície definida pelas linhas η e γ ($\xi = \text{cte}$).

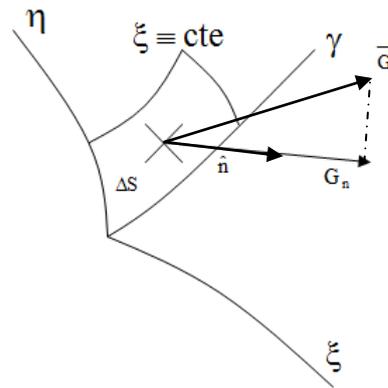


Figura 3.1 - Área curvilínea situada na superfície definida pelas linhas η e γ ($\xi = \text{cte}$), a grandeza \vec{G} e a sua componente na direção normal, G_n .

Através de uma inspeção na Figura 3.1 é possível observar que a projeção de \vec{G} na direção \hat{n} perpendicular ao plano formado por η e γ é dada por:

$$G_n = \vec{G} \cdot \hat{n} \quad (3.2)$$

Uma vez estabelecido o conceito geral para fluxo através da Equação (3.1), pode-se concluir que a Equação (3.2) fornece o fluxo φ'' por unidade de área, isto é:

$$\varphi'' = G_n = \vec{G} \cdot \hat{n} \quad (3.3)$$

Assim, o fluxo da grandeza \vec{G} para uma área elementar ΔS pode ser calculado por:

$$\varphi' = \varphi'' \Delta S = \vec{G} \cdot \hat{n} \Delta S \quad (3.4)$$

No presente estudo, a componente G_n de interesse é o fluxo difusivo por unidade de área, da grandeza definida pela variável Φ , dada por:

$$G_n = \varphi'' = -\Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial n} \quad (3.5)$$

Logo, o fluxo por difusão da grandeza Φ numa área elementar ΔS pode ser reescrito como:

$$\varphi' = -\Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial n} \Delta S \quad (3.6)$$

3.2 Generalização para cálculos de volumes, áreas e distâncias em coordenadas generalizadas: interseção dos vetores elementares no ponto nodal

Na Seção 2.4 do Capítulo 2 foram apresentadas as relações de transformação através das quais as coordenadas de um sistema cartesiano podem ser convertidas em coordenadas generalizadas. Além disso, foram apresentadas, também, as expressões para cálculos de comprimentos, áreas e volumes de figuras regulares representadas nesse sistema de eixos curvilíneos. Entretanto, a expressão dada para a área através da Equação (2.60) possui limitações, pois ela pressupõe que ξ e η são funções apenas de x e y , isto é:

$$\xi = \xi(x, y) \quad (3.7)$$

$$\eta = \eta(x, y) \quad (3.8)$$

As transformações dadas pelas Equações (3.7) e (3.8) servem apenas para o caso onde o quadrilátero regular está localizado no plano xy , que por sua vez coincide com o plano $\xi\eta$ e os vetores que definem áreas ou volumes são os lados ou as arestas das figuras geométricas, respectivamente.

Torna-se necessário, portanto, a generalização para cálculos de volumes e áreas quando ξ , η e γ são funções de x , y e z , que é o caso abordado no presente trabalho (ver as Equações 2.32 a 2.34 do Capítulo 2).

3.2.1 Volumes e áreas de figuras irregulares

Para essas situações mais gerais, o quadrilátero em estudo está localizado num plano situado em qualquer parte do espaço e os vetores que definem o plano são direcionados do ponto médio de um dos lados ao ponto médio do lado oposto. Em se tratando de sólidos, os vetores que definem o volume se originam do ponto médio de uma das faces e terminam no ponto médio da face oposta, conforme é mostrado na Figura 3.2. Nesses casos, a figura geométrica (superfície ou sólido) pode ser regular ou irregular, o que permite calcular áreas e volumes para corpos com qualquer forma geométrica.

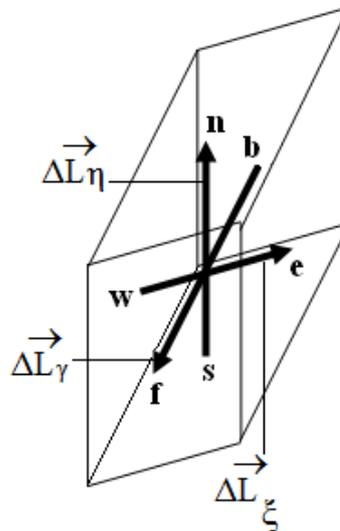


Figura 3.2 - Sólido de volume elementar ΔV no domínio transformado: produto misto dos vetores $\overrightarrow{\Delta L}_\xi$, $\overrightarrow{\Delta L}_\eta$ e $\overrightarrow{\Delta L}_\gamma$ que se interceptam no ponto nodal.

A partir da Figura 3.2, pode-se calcular o volume de um volume de controle usando coordenadas generalizadas, observando que a interseção dos vetores que definem as três direções no domínio transformado não coincide com nenhum vértice do volume de controle, mas ocorre no centro geométrico, que é o ponto nodal do volume de controle.

As expressões para os vetores $\overrightarrow{\Delta L}_\xi$, $\overrightarrow{\Delta L}_\eta$ e $\overrightarrow{\Delta L}_\gamma$ nas direções ξ , η e γ , respectivamente, são dadas por:

oeste – leste

$$\vec{\Delta L}_\xi = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \vec{i} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \vec{j} + \frac{\partial z}{\partial \xi} \vec{k} \right) \Delta \xi \quad (3.9)$$

sul – norte

$$\vec{\Delta L}_\eta = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \vec{i} + \frac{\partial y}{\partial \eta} \vec{j} + \frac{\partial z}{\partial \eta} \vec{k} \right) \Delta \eta \quad (3.10)$$

atrás – frente

$$\vec{\Delta L}_\gamma = \left(\frac{\partial x}{\partial \gamma} \vec{i} + \frac{\partial y}{\partial \gamma} \vec{j} + \frac{\partial z}{\partial \gamma} \vec{k} \right) \Delta \gamma \quad (3.11)$$

O módulo do produto misto dos três vetores é interpretado como o volume do sólido definido pelos três vetores. Logo, o seu valor é calculado pela Equação (3.12):

$$\Delta V = \left| \vec{\Delta L}_\xi \cdot (\vec{\Delta L}_\eta \times \vec{\Delta L}_\gamma) \right| \quad (3.12)$$

Para calcular a área de uma figura geométrica plana qualquer, deve-se observar na Figura 3.3, o quadrilátero situado no plano transformado definido pelas linhas η e γ .

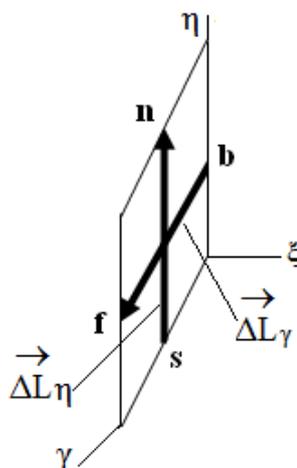


Figura 3.3 - Quadrilátero de área elementar ΔS no plano transformado $\eta \gamma$: módulo do produto

vetorial dos vetores $\vec{\Delta L}_\eta$ e $\vec{\Delta L}_\gamma$ que se cruzam no centro do plano.

Os vetores elementares que definem a área, $\vec{\Delta L}_\eta$ e $\vec{\Delta L}_\gamma$, estão localizados no centro da figura geométrica, e são representados pelas Equações (3.13) e (3.14). Deve-se ressaltar que esta superfície pode estar situada em qualquer plano do espaço no domínio físico.

sul – norte

$$\vec{\Delta L}_\eta = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \vec{i} + \frac{\partial y}{\partial \eta} \vec{j} + \frac{\partial z}{\partial \eta} \vec{k} \right) \Delta \eta \quad (3.13)$$

atrás – frente

$$\vec{\Delta L}_\gamma = \left(\frac{\partial x}{\partial \gamma} \vec{i} + \frac{\partial y}{\partial \gamma} \vec{j} + \frac{\partial z}{\partial \gamma} \vec{k} \right) \Delta \gamma \quad (3.14)$$

O produto vetorial dos vetores definidos pelas Equações (3.13) e (3.14) é dado por:

$$\vec{\Delta L}_\eta \times \vec{\Delta L}_\gamma = (y_\eta z_\gamma - z_\eta y_\gamma) \Delta \eta \Delta \gamma \vec{i} + (z_\eta x_\gamma - x_\eta z_\gamma) \Delta \eta \Delta \gamma \vec{j} + (x_\eta y_\gamma - y_\eta x_\gamma) \Delta \eta \Delta \gamma \vec{k} \quad (3.15)$$

Assim, para qualquer quadrilátero, situado em qualquer parte do espaço, formado por linhas η e γ , a área pode ser calculada como segue:

$$\Delta S = \left| \vec{\Delta L}_\eta \times \vec{\Delta L}_\gamma \right| \quad (3.16)$$

Logo, a expressão final para o cálculo da área é dada pela Equação (3.17):

$$\Delta S = \sqrt{(y_\eta z_\gamma - z_\eta y_\gamma)^2 + (z_\eta x_\gamma - x_\eta z_\gamma)^2 + (x_\eta y_\gamma - y_\eta x_\gamma)^2} \Delta \eta \Delta \gamma \quad (3.17)$$

Convém ressaltar que os conceitos físicos não podem ser modificados devido a uma transformação de um sistema de referência para outro. As alterações ocorrem apenas no formalismo matemático. Observe que o volume continua sendo interpretado pelo módulo do

produto misto dos três vetores elementares, enquanto o módulo do produto vetorial dos dois vetores elementares que definem um quadrilátero fornece a área dessa figura.

3.2.2 Distância da face oeste ao ponto nodal P

Para calcular a distância entre uma das faces e o ponto nodal P, convém observar a situação descrita na Figura 3.4.

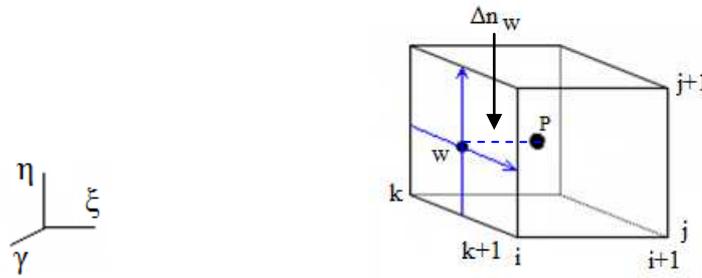


Figura 3.4 - Volume de controle interno no domínio transformado delimitado pelos planos $\xi = i$, $\xi = i+1$, $\eta = j$, $\eta = j+1$, $\gamma = k$ e $\gamma = k+1$: destaque para a distância entre a face oeste e o ponto nodal P

Na Figura 3.4 é apresentado um volume de controle, destacando a face oeste no domínio transformado, delimitado pelas linhas $\xi = i$, $\xi = i+1$, $\eta = j$, $\eta = j+1$, $\gamma = k$ e $\gamma = k+1$. Para calcular a área da face oeste deve-se utilizar a Equação (3.16) devidamente adaptada:

$$\Delta S_w = \left| \vec{\Delta L}_\eta^w \times \vec{\Delta L}_\gamma^w \right| \quad (3.18)$$

que resulta em:

$$\Delta S_w = \sqrt{(y_\eta^w z_\gamma^w - z_\eta^w y_\gamma^w)^2 + (z_\eta^w x_\gamma^w - x_\eta^w z_\gamma^w)^2 + (x_\eta^w y_\gamma^w - y_\eta^w x_\gamma^w)^2} \Delta \eta \Delta \gamma \quad (3.19)$$

onde o subscrito w no membro da esquerda e o sobrescrito w no membro da direita representam a face oeste.

Assim, o vetor unitário perpendicular à face oeste pode ser calculado como:

$$\vec{VU}_w = \frac{\vec{\Delta L}_\eta^w \times \vec{\Delta L}_\gamma^w}{\left| \vec{\Delta L}_\eta^w \times \vec{\Delta L}_\gamma^w \right|} \quad (3.20)$$

Identificando o denominador como a área da face oeste, obtém-se:

$$\vec{VU}_w = \frac{\vec{\Delta L}_\eta^w \times \vec{\Delta L}_\gamma^w}{\Delta S_w} \quad (3.21)$$

A distância da face oeste ao ponto nodal P, representada por Δn_w , pode ser observada na Figura 3.5 que mostra, no domínio físico, o perfil de um volume de controle interno de um corpo com forma geométrica arbitrária.

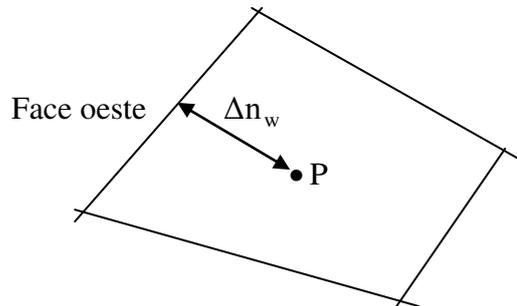


Figura 3.5 - Perfil de um volume de controle interno de um sólido com geometria arbitrária no domínio físico.

O valor de Δn_w é calculado a partir do produto escalar apresentado na Equação (3.22):

$$\Delta n_w = \left| \vec{r}_{Pw} \cdot \vec{VU}_w \right| \quad (3.22)$$

em que \vec{r}_{Pw} representa o vetor distância entre um ponto qualquer da face oeste e o ponto nodal P dado por:

$$\vec{r}_{Pw} = (x^w - x^P) \vec{i} + (y^w - y^P) \vec{j} + (z^w - z^P) \vec{k} \quad (3.23)$$

Substituindo as Equações (3.21) e (3.23) na Equação (3.22), obtém-se a expressão final para Δn_w :

$$\Delta n_w = \left| (x^w - x^P)(y_\eta^w z_\gamma^w - z_\eta^w y_\gamma^w) + (y^w - y^P)(z_\eta^w x_\gamma^w - x_\eta^w z_\gamma^w) + (z^w - z^P)(x_\eta^w y_\gamma^w - y_\eta^w x_\gamma^w) \right| \frac{\Delta\eta\Delta\gamma}{\Delta S_w} \quad (3.24)$$

Apesar da Equação (3.24) ter sido deduzida para a face oeste, naturalmente que ela pode ser adaptada e utilizada para calcular a distância de qualquer ponto nodal a qualquer face.

Uma vez estabelecido a generalização para o cálculo de volumes, áreas e distâncias, o próximo passo é transformar a equação de conservação do sistema de coordenadas cartesianas para o sistema de coordenadas generalizadas, tema abordado na próxima seção.

3.3 Transformação da equação de conservação

A Equação (2.5) do Capítulo 2, que descreve um problema de transporte puramente difusivo, na forma diferencial, pode ser escrita em coordenadas cartesianas, tendo como resultado a equação abaixo:

$$\frac{\partial(\lambda\Phi)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right) + S^\Phi \quad (3.25)$$

Esta equação pode ser reescrita da seguinte forma (Maliska, 2004; Silva, W. 2009):

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} + \frac{\partial G}{\partial z} = S^\Phi \quad (3.26)$$

em que

$$Q = \lambda\Phi \quad (3.27)$$

$$E = -\Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x} \quad (3.28)$$

$$F = -\Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial y} \quad (3.29)$$

$$G = -\Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \quad (3.30)$$

Deve-se observar que, nas Equações (3.25) a (3.30), a variável dependente é a grandeza genérica Φ , enquanto x , y , z e t são as variáveis independentes. Assim, a Equação (3.25) corresponde à equação de difusão tridimensional no domínio físico, escrita em coordenadas cartesianas. Para escrever a equação de conservação no domínio transformado, definido pelas variáveis independentes ξ , η , γ e τ , onde τ é o tempo, torna-se necessário lançar mão das relações de transformação dadas pelas métricas descritas pelas Equações (2.35) a (2.54) do Capítulo 2. Os detalhes dessas transformações podem ser encontrados em Maliska (2004), Silva (2007) e Silva, W. (2009).

Realizadas as devidas transformações seguidas de algumas manipulações matemáticas, obtém-se a equação de difusão em coordenadas generalizadas, no espaço transformado 3D:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\lambda \Phi}{J} \right) &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\left(\alpha_{11} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{12} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{13} \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \right) J \Gamma^\Phi \right] + \\ &\frac{\partial}{\partial \eta} \left[\left(\alpha_{21} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{22} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{23} \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \right) J \Gamma^\Phi \right] + \\ &\frac{\partial}{\partial \gamma} \left[\left(\alpha_{31} \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{32} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{33} \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \right) J \Gamma^\Phi \right] + \frac{S^\Phi}{J} \end{aligned} \quad (3.31)$$

em que

$$\alpha_{11} = \frac{\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2}{J^2} \quad (3.32)$$

$$\alpha_{22} = \frac{\eta_x^2 + \eta_y^2 + \eta_z^2}{J^2} \quad (3.33)$$

$$\alpha_{33} = \frac{\gamma_x^2 + \gamma_y^2 + \gamma_z^2}{J^2} \quad (3.34)$$

$$\alpha_{12} = \alpha_{21} = \frac{\xi_x \eta_x + \xi_y \eta_y + \xi_z \eta_z}{J^2} \quad (3.35)$$

$$\alpha_{13} = \alpha_{31} = \frac{\xi_x \gamma_x + \xi_y \gamma_y + \xi_z \gamma_z}{J^2} \quad (3.36)$$

$$\alpha_{23} = \alpha_{32} = \frac{\eta_x \gamma_x + \eta_y \gamma_y + \eta_z \gamma_z}{J^2} \quad (3.37)$$

Observa-se que os termos que contém α_{ij} , com i diferente de j , são termos difusivos oriundos da não-ortogonalidade da malha. Vale salientar, também, que o jacobiano J que aparece nas Equações (3.31) a (3.37) é definido pela Equação (2.45) do Capítulo 2, enquanto todos os termos α_{ij} são definidos pelas métricas de transformação expressas pelas Equações (2.35) a (2.43). Assim, a Equação (3.31) está completamente definida e pronta para ser discretizada, o que será feito na próxima seção.

3.4 Discretização da equação de difusão

O método empregado na discretização das equações foi o método de volumes finitos, que consiste em dividir o domínio estudado em pequenos volumes elementares denominados volumes de controle, com cada volume de controle sendo representado por um ponto nodal, P . A equação diferencial é integrada sobre o volume elementar, no espaço e no tempo e o resultado é a equação discretizada contendo o valor de Φ nos pontos nodais de cada volume de controle (Patankar, 1980; Maliska, 2004). Assim sendo, a equação discretizada obtida

desta forma satisfaz a conservação da propriedade em questão (por exemplo, massa ou energia) em nível de volumes elementares. A formulação utilizada foi a totalmente implícita, isto é, a variável Φ de todos os volumes de controle deve ser avaliada no instante de interesse, ou seja, o instante atual. A razão da escolha desta formulação é que a solução torna-se incondicionalmente estável para qualquer intervalo de tempo.

3.4.1 Linearização do termo fonte

A representação das equações de conservação muitas vezes desloca termos importantes para o termo fonte S^Φ . Nesses casos, cuidados especiais devem ser tomados para que o processo iterativo de solução dos sistemas de equações não divirja. A primeira regra a ser seguida é procurar fazer com que o termo fonte seja levado em consideração o mais implicitamente possível. Isso significa não o manter constante ao longo do passo iterativo ou passo no tempo. Uma forma de fazer isso é linearizá-lo, tal que a variável em questão, presente no termo fonte, atue implicitamente e não seja apenas substituída pelo seu último valor disponível (Maliska, 2004). Assim, dado um termo fonte:

$$S^\Phi = f(\Phi) \quad (3.38)$$

a sua linearização pode ser feita por expansão em série de Taylor. Os detalhes do procedimento matemático podem ser encontrados em Silva, W. (2009). O objetivo é encontrar uma linearização do tipo:

$$S^\Phi = S_C + S_P \Phi \quad (3.39)$$

em que S_C e S_P são dados por:

$$S_C = f(\Phi^*) - \left. \frac{df(\Phi)}{d\Phi} \right|_{\Phi=\Phi^*} \quad (3.40)$$

$$S_P = \left. \frac{df(\Phi)}{d\Phi} \right|_{\Phi=\Phi^*} \quad (3.41)$$

A segunda regra é a imposição de que S_P seja negativo. Caso S_P seja positivo, é necessário criar artificialmente uma linearização impondo um valor negativo para S_P .

3.4.2 Integração das equações

Após a substituição da Equação (3.39) na Equação (3.31), o resultado da sua integração no espaço e no tempo para um volume de controle elementar $\Delta\xi\Delta\eta\Delta\gamma$, com ponto nodal P, num intervalo de tempo $\Delta\tau$, é apresentado na Equação (3.42):

$$\begin{aligned}
\frac{\lambda_P\Phi_P - \lambda_P^0\Phi_P^0}{J_P} \frac{\Delta\xi\Delta\eta\Delta\gamma}{\Delta\tau} = & \alpha_{11e}J_e\Gamma_e^\Phi\Delta\eta\Delta\gamma \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\xi} \right|_e + \alpha_{12e}J_e\Gamma_e^\Phi\Delta\eta\Delta\gamma \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\eta} \right|_e + \\
& \alpha_{13e}J_e\Gamma_e^\Phi\Delta\eta\Delta\gamma \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\gamma} \right|_e - \alpha_{11w}J_w\Gamma_w^\Phi\Delta\eta\Delta\gamma \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\xi} \right|_w - \alpha_{12w}J_w\Gamma_w^\Phi\Delta\eta\Delta\gamma \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\eta} \right|_w - \\
& \alpha_{13w}J_w\Gamma_w^\Phi\Delta\eta\Delta\gamma \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\gamma} \right|_w + \alpha_{21n}J_n\Gamma_n^\Phi\Delta\xi\Delta\gamma \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\xi} \right|_n + \alpha_{22n}J_n\Gamma_n^\Phi\Delta\xi\Delta\gamma \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\eta} \right|_n + \\
& \alpha_{23n}J_n\Gamma_n^\Phi\Delta\xi\Delta\gamma \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\gamma} \right|_n - \alpha_{21s}J_s\Gamma_s^\Phi\Delta\xi\Delta\gamma \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\xi} \right|_s - \alpha_{22s}J_s\Gamma_s^\Phi\Delta\xi\Delta\gamma \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\eta} \right|_s - \\
& \alpha_{23s}J_s\Gamma_s^\Phi\Delta\xi\Delta\eta \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\gamma} \right|_s + \alpha_{31f}J_f\Gamma_f^\Phi\Delta\xi\Delta\eta \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\xi} \right|_f + \alpha_{32f}J_f\Gamma_f^\Phi\Delta\xi\Delta\eta \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\eta} \right|_f + \\
& \alpha_{33f}J_f\Gamma_f^\Phi\Delta\xi\Delta\eta \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\gamma} \right|_f - \alpha_{31b}J_b\Gamma_b^\Phi\Delta\xi\Delta\eta \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\xi} \right|_b - \alpha_{32b}J_b\Gamma_b^\Phi\Delta\xi\Delta\eta \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\eta} \right|_b - \\
& \alpha_{33b}J_b\Gamma_b^\Phi\Delta\xi\Delta\eta \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\gamma} \right|_b + \frac{S_P\Phi_P}{J_P}\Delta\xi\Delta\eta\Delta\gamma + \frac{S_C}{J_P}\Delta\xi\Delta\eta\Delta\gamma
\end{aligned} \tag{3.42}$$

onde o sobrescrito zero significa que o termo deve ser avaliado no tempo anterior ao tempo de interesse, enquanto que os termos sem sobrescrito são avaliados no tempo de interesse. Ainda com relação à Equação (3.42), os subscritos “e”, “w”, “n”, “s”, “f” e “b” significam, respectivamente, as faces leste, oeste, norte, sul, frente e atrás de um volume de controle considerado, enquanto P é o ponto nodal deste volume.

Neste ponto, é importante ressaltar que, qualquer que seja a geometria irregular do sólido no espaço físico, a sua representação no domínio transformado será sempre a de um paralelepípedo, para o caso tridimensional, conforme pode ser visto na Figura 3.6. Em outras palavras, as geometrias são distintas, mas possuem um mesmo domínio transformado ou computacional, sendo essa a grande vantagem, do ponto de vista de implementação do programa, em se usar coordenadas generalizadas (Maliska, 2004).

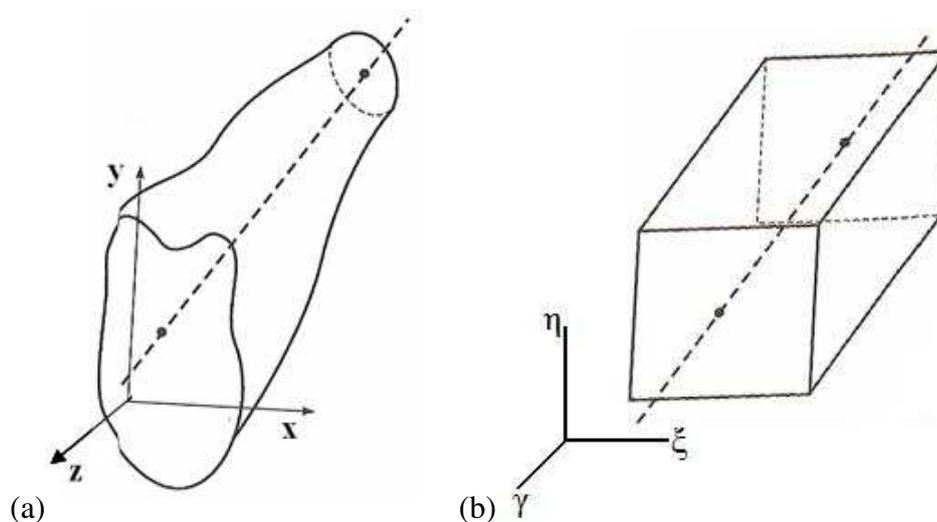


Figura 3.6 – Aspecto geométrico da transformação de coordenadas:

(a) Sólido no domínio físico arbitrário; (b) Mapeamento do sólido no domínio transformado.

Para o propósito de resolver a Equação (3.42), torna-se necessário definir os volumes de controle para os quais as derivadas serão calculadas. Assim, o domínio transformado tridimensional é dividido numa malha, na qual os volumes de controle são diferenciados um do outro pela localização na referida malha. A distinção entre os volumes de controle se dá pelo número de faces que cada um possui em contato com o meio externo. Alguns volumes de controle (vértices do domínio) têm três faces em contato com o meio, são os volumes pintados na cor cinza da Figura 3.7; outros possuem duas faces (arestas do domínio), são os volumes amarelos, verdes e azuis da mesma figura. Por outro lado, os volumes de controle localizados nas faces do domínio têm apenas uma de suas faces em contato com o exterior, são os volumes vermelhos e rosas da Figura 3.7. Os volumes de controle internos não apresentam nenhuma face em contato com o meio.

Pode-se distinguir, portanto, vinte e sete tipos distintos de volume de controle posicionados diferentemente numa malha tridimensional, conforme está mostrado na Figura 3.7.

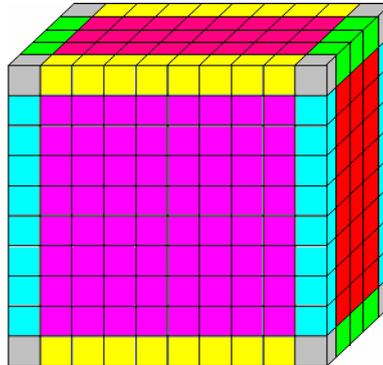


Figura 3.7 - Volumes de controle diferenciados quanto à localização numa malha tridimensional no domínio transformado (Fonte: Silva, W., 2009).

Na Figura 3.8 são apresentadas as conexões entre o ponto nodal P e seus vizinhos (Silva, W., 2009). É possível observar que, para um problema tridimensional, o volume de controle interno, identificado pelo ponto nodal P, está ligado a dezoito volumes de controle vizinhos, gerando, portanto, uma matriz com estrutura de dezenove diagonais.

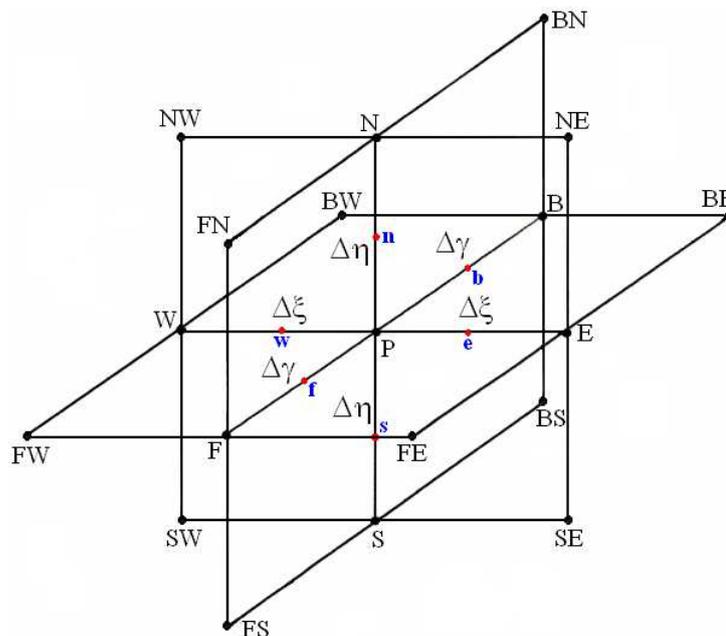


Figura 3.8 - Volume de controle elementar interno com ponto nodal P e seus dezoito vizinhos (Fonte: Silva, W., 2009).

3.4.3 Volumes de controle internos

3.4.3.1 Derivadas

Para os volumes de controle internos, as expressões para as derivadas da Equação (3.42) podem ser definidas a partir de uma inspeção da Figura 3.8, e podem ser divididas em derivadas diretas e derivadas cruzadas. As derivadas diretas são dadas pelas expressões a seguir, para a formulação totalmente implícita:

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_e = \frac{\Phi_E - \Phi_P}{\Delta \xi} \quad (3.43)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_w = \frac{\Phi_P - \Phi_W}{\Delta \xi} \quad (3.44)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right|_n = \frac{\Phi_N - \Phi_P}{\Delta \eta} \quad (3.45)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right|_s = \frac{\Phi_P - \Phi_S}{\Delta \eta} \quad (3.46)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \right|_f = \frac{\Phi_F - \Phi_P}{\Delta \gamma} \quad (3.47)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \right|_b = \frac{\Phi_P - \Phi_B}{\Delta \gamma} \quad (3.48)$$

As expressões das derivadas cruzadas são definidas do seguinte modo:

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right|_e = \frac{\frac{\Phi_N + \Phi_{NE}}{2} - \frac{\Phi_S + \Phi_{SE}}{2}}{2\Delta \eta} \Rightarrow \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right|_e = \frac{\Phi_N + \Phi_{NE} - \Phi_S - \Phi_{SE}}{4\Delta \eta} \quad (3.49)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right|_w = \frac{\frac{\Phi_N + \Phi_{NW}}{2} - \frac{\Phi_S + \Phi_{SW}}{2}}{2\Delta\eta} \Rightarrow \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right|_w = \frac{\Phi_N + \Phi_{NW} - \Phi_S - \Phi_{SW}}{4\Delta\eta} \quad (3.50)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right|_f = \frac{\frac{\Phi_N + \Phi_{FN}}{2} - \frac{\Phi_S + \Phi_{FS}}{2}}{2\Delta\eta} \Rightarrow \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right|_f = \frac{\Phi_N + \Phi_{FN} - \Phi_S - \Phi_{FS}}{4\Delta\eta} \quad (3.51)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right|_b = \frac{\frac{\Phi_N + \Phi_{BN}}{2} - \frac{\Phi_S + \Phi_{BS}}{2}}{2\Delta\eta} \Rightarrow \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right|_b = \frac{\Phi_N + \Phi_{BN} - \Phi_S - \Phi_{BS}}{4\Delta\eta} \quad (3.52)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_n = \frac{\frac{\Phi_E + \Phi_{NE}}{2} - \frac{\Phi_W + \Phi_{NW}}{2}}{2\Delta\xi} \Rightarrow \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_n = \frac{\Phi_E + \Phi_{NE} - \Phi_W - \Phi_{NW}}{4\Delta\xi} \quad (3.53)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_s = \frac{\frac{\Phi_E + \Phi_{SE}}{2} - \frac{\Phi_W + \Phi_{SW}}{2}}{2\Delta\xi} \Rightarrow \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_s = \frac{\Phi_E + \Phi_{SE} - \Phi_W - \Phi_{SW}}{4\Delta\xi} \quad (3.54)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_f = \frac{\frac{\Phi_E + \Phi_{FE}}{2} - \frac{\Phi_W + \Phi_{FW}}{2}}{2\Delta\xi} \Rightarrow \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_f = \frac{\Phi_E + \Phi_{FE} - \Phi_W - \Phi_{FW}}{4\Delta\xi} \quad (3.55)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_b = \frac{\frac{\Phi_E + \Phi_{BE}}{2} - \frac{\Phi_W + \Phi_{BW}}{2}}{2\Delta\xi} \Rightarrow \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_b = \frac{\Phi_E + \Phi_{BE} - \Phi_W - \Phi_{BW}}{4\Delta\xi} \quad (3.56)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \right|_e = \frac{\frac{\Phi_F + \Phi_{FE}}{2} - \frac{\Phi_B + \Phi_{BE}}{2}}{2\Delta\gamma} \Rightarrow \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \right|_e = \frac{\Phi_F + \Phi_{FE} - \Phi_B - \Phi_{BE}}{4\Delta\gamma} \quad (3.57)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \right|_w = \frac{\frac{\Phi_F + \Phi_{FW}}{2} - \frac{\Phi_B + \Phi_{BW}}{2}}{2\Delta\gamma} \Rightarrow \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \right|_w = \frac{\Phi_F + \Phi_{FW} - \Phi_B - \Phi_{BW}}{4\Delta\gamma} \quad (3.58)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \right|_n = \frac{\frac{\Phi_F + \Phi_{FN}}{2} - \frac{\Phi_B + \Phi_{BN}}{2}}{2\Delta\gamma} \Rightarrow \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \right|_n = \frac{\Phi_F + \Phi_{FN} - \Phi_B - \Phi_{BN}}{4\Delta\gamma} \quad (3.59)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \right|_s = \frac{\frac{\Phi_F + \Phi_{FS}}{2} - \frac{\Phi_B + \Phi_{BS}}{2}}{2\Delta\gamma} \Rightarrow \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \right|_s = \frac{\Phi_F + \Phi_{FS} - \Phi_B - \Phi_{BS}}{4\Delta\gamma} \quad (3.60)$$

3.4.3.2 Equação de difusão na forma discretizada (volumes internos)

Para se obter a equação de difusão na forma discretizada, substitui-se as Equações (3.43) a (3.60) na Equação (3.42), e divide-se a expressão obtida por $\Delta\tau$, de tal forma que se pode escrever:

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_P \Phi_P}{J_P} \frac{\Delta\xi \Delta\eta \Delta\gamma}{\Delta\tau} &= \alpha_{11e} J_e \Gamma_e^\Phi \Delta\eta \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_E - \Phi_P}{\Delta\xi} \right) + \alpha_{12e} J_e \Gamma_e^\Phi \Delta\eta \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_N + \Phi_{NE} - \Phi_S - \Phi_{SE}}{4\Delta\eta} \right) + \\ &+ \alpha_{13e} J_e \Gamma_e^\Phi \Delta\eta \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_F + \Phi_{FE} - \Phi_B - \Phi_{BE}}{4\Delta\gamma} \right) - \alpha_{11w} J_w \Gamma_w^\Phi \Delta\eta \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_P - \Phi_W}{\Delta\xi} \right) - \\ &- \alpha_{12w} J_w \Gamma_w^\Phi \Delta\eta \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_N + \Phi_{NW} - \Phi_S - \Phi_{SW}}{4\Delta\eta} \right) - \alpha_{13w} J_w \Gamma_w^\Phi \Delta\eta \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_F + \Phi_{FW} - \Phi_B - \Phi_{BW}}{4\Delta\gamma} \right) + \\ &+ \alpha_{21n} J_n \Gamma_n^\Phi \Delta\xi \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_E + \Phi_{NE} - \Phi_W - \Phi_{NW}}{4\Delta\xi} \right) + \alpha_{22n} J_n \Gamma_n^\Phi \Delta\xi \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_N - \Phi_P}{\Delta\eta} \right) + \\ &+ \alpha_{23n} J_n \Gamma_n^\Phi \Delta\xi \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_F + \Phi_{FN} - \Phi_B - \Phi_{BN}}{4\Delta\gamma} \right) - \alpha_{21s} J_s \Gamma_s^\Phi \Delta\xi \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_E + \Phi_{SE} - \Phi_W - \Phi_{SW}}{4\Delta\xi} \right) - \\ &- \alpha_{22s} J_s \Gamma_s^\Phi \Delta\xi \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_P - \Phi_S}{\Delta\eta} \right) - \alpha_{23s} J_s \Gamma_s^\Phi \Delta\xi \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_F + \Phi_{FS} - \Phi_B - \Phi_{BS}}{4\Delta\gamma} \right) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \alpha_{31f} J_f \Gamma_f^\Phi \Delta \xi \Delta \eta \left(\frac{\Phi_E + \Phi_{FE} - \Phi_W - \Phi_{FW}}{4 \Delta \xi} \right) + \alpha_{32f} J_f \Gamma_f^\Phi \Delta \xi \Delta \eta \left(\frac{\Phi_N + \Phi_{FN} - \Phi_S - \Phi_{FS}}{4 \Delta \eta} \right) + \\
& + \alpha_{33f} J_f \Gamma_f^\Phi \Delta \xi \Delta \eta \left(\frac{\Phi_F - \Phi_P}{\Delta \gamma} \right) - \alpha_{31b} J_b \Gamma_b^\Phi \Delta \xi \Delta \eta \left(\frac{\Phi_E + \Phi_{BE} - \Phi_W - \Phi_{BW}}{4 \Delta \xi} \right) - \\
& - \alpha_{32b} J_b \Gamma_b^\Phi \Delta \xi \Delta \eta \left(\frac{\Phi_N + \Phi_{BN} - \Phi_S - \Phi_{BS}}{4 \Delta \eta} \right) - \alpha_{33b} J_b \Gamma_b^\Phi \Delta \xi \Delta \eta \left(\frac{\Phi_P - \Phi_B}{\Delta \gamma} \right) + \frac{S_P \Phi_P}{J_P} \Delta \xi \Delta \eta \Delta \gamma + \\
& + \frac{S_C}{J_P} \Delta \xi \Delta \eta \Delta \gamma + \frac{\lambda_P^0 \Phi_P^0}{J_P} \frac{\Delta \xi \Delta \eta \Delta \gamma}{\Delta \tau}
\end{aligned} \tag{3.61}$$

Organizando os termos da Equação (3.61) de forma apropriada, obtém-se uma equação algébrica para os volumes de controle internos, dada por:

$$\begin{aligned}
A_P \Phi_P = & A_e \Phi_E + A_w \Phi_W + A_n \Phi_N + A_s \Phi_S + A_f \Phi_F + A_b \Phi_B + A_{ne} \Phi_{NE} + A_{nw} \Phi_{NW} + \\
& + A_{se} \Phi_{SE} + A_{sw} \Phi_{SW} + A_{fe} \Phi_{FE} + A_{fw} \Phi_{FW} + A_{be} \Phi_{BE} + A_{bw} \Phi_{BW} + A_{fn} \Phi_{FN} + \\
& + A_{fs} \Phi_{FS} + A_{bn} \Phi_{BN} + A_{bs} \Phi_{BS} + B
\end{aligned} \tag{3.62}$$

em que os coeficientes são dados por:

$$\begin{aligned}
A_P = & \frac{\lambda_P}{J_P} \frac{\Delta \xi \Delta \eta \Delta \gamma}{\Delta \tau} + \frac{\Delta \eta \Delta \gamma}{\Delta \xi} \alpha_{11e} J_e \Gamma_e^\Phi + \frac{\Delta \eta \Delta \gamma}{\Delta \xi} \alpha_{11w} J_w \Gamma_w^\Phi + \frac{\Delta \xi \Delta \gamma}{\Delta \eta} \alpha_{22n} J_n \Gamma_n^\Phi + \\
& + \frac{\Delta \xi \Delta \gamma}{\Delta \eta} \alpha_{22s} J_s \Gamma_s^\Phi + \frac{\Delta \xi \Delta \eta}{\Delta \gamma} \alpha_{33f} J_f \Gamma_f^\Phi + \frac{\Delta \xi \Delta \eta}{\Delta \gamma} \alpha_{33b} J_b \Gamma_b^\Phi - \frac{S_P}{J_P} \Delta \xi \Delta \eta \Delta \gamma
\end{aligned} \tag{3.63}$$

$$A_e = \frac{\Delta \eta \Delta \gamma}{\Delta \xi} \alpha_{11e} J_e \Gamma_e^\Phi + \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{21n} J_n \Gamma_n^\Phi - \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{21s} J_s \Gamma_s^\Phi + \frac{\Delta \eta}{4} \alpha_{31f} J_f \Gamma_f^\Phi - \frac{\Delta \eta}{4} \alpha_{31b} J_b \Gamma_b^\Phi \tag{3.64}$$

$$A_w = \frac{\Delta\eta\Delta\gamma}{\Delta\xi} \alpha_{11w} J_w \Gamma_w^\Phi - \frac{\Delta\gamma}{4} \alpha_{21n} J_n \Gamma_n^\Phi + \frac{\Delta\gamma}{4} \alpha_{21s} J_s \Gamma_s^\Phi - \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{31f} J_f \Gamma_f^\Phi + \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{31b} J_b \Gamma_b^\Phi \quad (3.65)$$

$$A_n = \frac{\Delta\xi\Delta\gamma}{\Delta\eta} \alpha_{22n} J_n \Gamma_n^\Phi + \frac{\Delta\gamma}{4} \alpha_{12e} J_e \Gamma_e^\Phi - \frac{\Delta\gamma}{4} \alpha_{12w} J_w \Gamma_w^\Phi + \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{32f} J_f \Gamma_f^\Phi - \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{32b} J_b \Gamma_b^\Phi \quad (3.66)$$

$$A_s = \frac{\Delta\xi\Delta\gamma}{\Delta\eta} \alpha_{22s} J_s \Gamma_s^\Phi - \frac{\Delta\gamma}{4} \alpha_{12e} J_e \Gamma_e^\Phi + \frac{\Delta\gamma}{4} \alpha_{12w} J_w \Gamma_w^\Phi - \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{32f} J_f \Gamma_f^\Phi + \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{32b} J_b \Gamma_b^\Phi \quad (3.67)$$

$$A_f = \frac{\Delta\xi\Delta\eta}{\Delta\gamma} \alpha_{33f} J_f \Gamma_f^\Phi + \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{13e} J_e \Gamma_e^\Phi - \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{13w} J_w \Gamma_w^\Phi + \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{23n} J_n \Gamma_n^\Phi - \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{23s} J_s \Gamma_s^\Phi \quad (3.68)$$

$$A_b = \frac{\Delta\xi\Delta\eta}{\Delta\gamma} \alpha_{33b} J_b \Gamma_b^\Phi - \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{13e} J_e \Gamma_e^\Phi + \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{13w} J_w \Gamma_w^\Phi - \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{23n} J_n \Gamma_n^\Phi + \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{23s} J_s \Gamma_s^\Phi \quad (3.69)$$

$$A_{nc} = \frac{\Delta\gamma}{4} \alpha_{12e} J_e \Gamma_e^\Phi + \frac{\Delta\gamma}{4} \alpha_{21n} J_n \Gamma_n^\Phi \quad (3.70)$$

$$A_{nw} = -\frac{\Delta\gamma}{4} \alpha_{12w} J_w \Gamma_w^\Phi - \frac{\Delta\gamma}{4} \alpha_{21n} J_n \Gamma_n^\Phi \quad (3.71)$$

$$A_{se} = -\frac{\Delta\gamma}{4} \alpha_{12e} J_e \Gamma_e^\Phi - \frac{\Delta\gamma}{4} \alpha_{21s} J_s \Gamma_s^\Phi \quad (3.72)$$

$$A_{sw} = \frac{\Delta\gamma}{4} \alpha_{12w} J_w \Gamma_w^\Phi + \frac{\Delta\gamma}{4} \alpha_{21s} J_s \Gamma_s^\Phi \quad (3.73)$$

$$A_{fe} = \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{13e} J_e \Gamma_e^\Phi + \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{31f} J_f \Gamma_f^\Phi \quad (3.74)$$

$$A_{fw} = -\frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{13w} J_w \Gamma_w^\Phi - \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{31f} J_f \Gamma_f^\Phi \quad (3.75)$$

$$A_{be} = -\frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{13e} J_e \Gamma_e^\Phi - \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{31b} J_b \Gamma_b^\Phi \quad (3.76)$$

$$A_{bw} = \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{13w} J_w \Gamma_w^\Phi + \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{31b} J_b \Gamma_b^\Phi \quad (3.77)$$

$$A_{fn} = \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{23n} J_n \Gamma_n^\Phi + \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{32f} J_f \Gamma_f^\Phi \quad (3.78)$$

$$A_{fs} = -\frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{23s} J_s \Gamma_s^\Phi - \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{32f} J_f \Gamma_f^\Phi \quad (3.79)$$

$$A_{bn} = -\frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{23n} J_n \Gamma_n^\Phi - \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{32b} J_b \Gamma_b^\Phi \quad (3.80)$$

$$A_{bs} = \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{23s} J_s \Gamma_s^\Phi + \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{32b} J_b \Gamma_b^\Phi \quad (3.81)$$

$$B = \frac{\lambda_P^0 \Phi_P^0}{J_P} \frac{\Delta\xi \Delta\eta \Delta\gamma}{\Delta\tau} + \frac{S_C}{J_P} \Delta\xi \Delta\eta \Delta\gamma \quad (3.82)$$

Uma observação da Equação (3.61) indica que o termo que representa o Jacobiano J e os termos α_{ij} devem ser calculados tanto para o ponto nodal P de cada volume de controle quanto para as faces leste, oeste, norte, sul, frente e atrás do mesmo volume de controle. Portanto, para a determinação destes termos, é pressuposto o conhecimento das métricas de transformação, visto que eles são calculados a partir das métricas inversas, que por sua vez devem ser determinadas pelas derivadas parciais $x_\xi, x_\eta, x_\gamma, y_\xi, y_\eta, y_\gamma, z_\xi, z_\eta$ e z_γ . Dessa forma, devem ser estabelecidas expressões para estas derivadas, tanto para o ponto nodal P quanto para os seus dezoito vizinhos. Vale salientar que o termo fonte também deverá ser aproximado numericamente.

3.4.3.3 Coordenadas dos pontos nodais (volumes internos)

Inicialmente, será mostrado como se calcula as coordenadas cartesianas dos pontos nodais no domínio físico para volumes de controle internos, lembrando que na geração de malha os pontos conhecidos são aqueles oriundos dos cruzamentos das linhas ξ , η e γ .

Observando a Figura 3.9, pode-se perceber que qualquer volume de controle interno é limitado no domínio transformado pelos planos $\xi = i$, $\xi = i+1$, $\eta = j$, $\eta = j+1$, $\gamma = k$ e $\gamma = k+1$, em que j , i e k são índices que identificam os planos ξ , η , e γ , respectivamente.

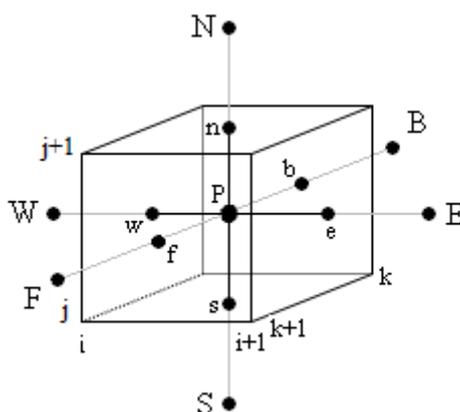


Figura 3.9 - Volume de controle interno delimitado pelos planos $\xi = i$, $\xi = i+1$, $\eta = j$, $\eta = j+1$, $\gamma = k$ e $\gamma = k+1$.

Como no estudo que está sendo apresentado pressupõe-se não existir expressões analíticas para $x(\xi, \eta, \gamma)$, $y(\xi, \eta, \gamma)$ e $z(\xi, \eta, \gamma)$, as métricas deverão ser calculadas numericamente. Portanto, cada coordenada do ponto central P, denominado de ponto nodal, pode ser calculada pela média aritmética dos oito (8) vértices do paralelepípedo que representa o volume de controle, no domínio transformado. Assim:

$$x_P = \frac{1}{8} [x_{i,j,k} + x_{i,j+1,k} + x_{i,j+1,k+1} + x_{i,j,k+1} + x_{i+1,j,k+1} + x_{i+1,j,k} + x_{i+1,j+1,k} + x_{i+1,j+1,k+1}] \quad (3.83)$$

$$y_P = \frac{1}{8} [y_{i,j,k} + y_{i,j+1,k} + y_{i,j+1,k+1} + y_{i,j,k+1} + y_{i+1,j,k+1} + y_{i+1,j,k} + y_{i+1,j+1,k} + y_{i+1,j+1,k+1}] \quad (3.84)$$

$$z_P = \frac{1}{8} [z_{i,j,k} + z_{i,j+1,k} + z_{i,j+1,k+1} + z_{i,j,k+1} + z_{i+1,j,k+1} + z_{i+1,j,k} + z_{i+1,j+1,k} + z_{i+1,j+1,k+1}] \quad (3.85)$$

De maneira semelhante, isto é, a partir da média aritmética dos oito (8) vértices de cada volume de controle, pode-se calcular as coordenadas de todos os pontos nodais.

3.4.3.4 Métricas nas faces dos volumes de controle (volumes internos)

Uma vez conhecidas as coordenadas dos pontos nodais, a partir da malha que foi gerada, as métricas nas faces dos volumes de controle podem ser determinadas, conforme será mostrado nesta seção. Para a face leste, nove (9) métricas devem ser calculadas, a saber:

- a) Três equações que representam as derivadas de x , y e z em relação a ξ na face leste (e):

$$x_\xi^e = \frac{x_E - x_P}{\Delta\xi} = \frac{1}{2\Delta\xi} \left[\frac{x_{i+2,j,k} + x_{i+2,j+1,k} + x_{i+2,j+1,k+1} + x_{i+2,j,k+1}}{4} - \frac{x_{i,j,k+1} + x_{i,j+1,k+1} + x_{i,j+1,k} + x_{i,j,k}}{4} \right] \quad (3.86)$$

De forma semelhante, encontra-se as outras duas equações para y_ξ^e e z_ξ^e .

- b) Mais três equações são encontradas para as derivadas de x , y e z em relação a η na face leste (e):

$$x_\eta^e = \frac{1}{\Delta\eta} \left[\frac{x_{i+1,j+1,k+1} + x_{i+1,j+1,k}}{2} - \frac{x_{i+1,j,k+1} + x_{i+1,j,k}}{2} \right] \quad (3.87)$$

Utilizando o mesmo raciocínio, pode-se determinar as expressões para as derivadas de y_η^e e z_η^e .

- c) Finalmente, as três últimas equações para completar as métricas da face leste (e), que são as derivadas de x, y e z em relação a γ nesta face, podem ser escritas como segue:

$$x_{\gamma}^e = \frac{1}{\Delta\gamma} \left[\frac{x_{i+1,j,k+1} + x_{i+1,j+1,k+1}}{2} - \frac{x_{i+1,j+1,k} + x_{i+1,j,k}}{2} \right] \quad (3.88)$$

As derivadas de y e z em relação a γ na face leste (e) podem ser encontradas de forma semelhante.

Com o mesmo raciocínio, pode-se obter as derivadas de x, y e z em relação a ξ , η e γ nas faces localizadas a oeste, norte, sul, frente e atrás do volume de controle.

3.4.3.5 Coordenadas dos pontos médios das faces (volumes internos)

Para se obter as coordenadas dos pontos centrais das faces que delimitam um volume de controle, calcula-se média aritmética dos quatro (4) vértices que formam o quadrilátero da face. Assim, para a face leste, por exemplo, tem-se:

$$x_e = \frac{x_{i+1,j,k+1} + x_{i+1,j,k} + x_{i+1,j+1,k} + x_{i+1,j+1,k+1}}{4} \quad (3.89)$$

$$y_e = \frac{y_{i+1,j,k+1} + y_{i+1,j,k} + y_{i+1,j+1,k} + y_{i+1,j+1,k+1}}{4} \quad (3.90)$$

$$z_e = \frac{z_{i+1,j,k+1} + z_{i+1,j,k} + z_{i+1,j+1,k} + z_{i+1,j+1,k+1}}{4} \quad (3.91)$$

Expressões semelhantes podem ser encontradas para calcular as coordenadas dos pontos médios das faces oeste, norte, sul, frente e atrás.

3.4.3.6 Métricas no ponto nodal P (volumes internos)

Uma vez conhecidas as coordenadas dos pontos médios das faces, pode-se determinar as derivadas no ponto nodal P, da seguinte forma:

$$x_{\xi}^P = \frac{x_e - x_w}{\Delta\xi} \quad (3.92)$$

$$x_{\eta}^P = \frac{x_n - x_s}{\Delta\eta} \quad (3.93)$$

$$x_{\gamma}^P = \frac{x_f - x_b}{\Delta\gamma} \quad (3.94)$$

As derivadas y_{ξ}^P , y_{η}^P , y_{γ}^P , z_{ξ}^P , z_{η}^P e z_{γ}^P são obtidas seguindo os mesmos passos das Equações (3.92) a (3.94). As coordenadas dos pontos médios das faces do volume de controle são calculadas da maneira mostrada na Seção 3.4.3.5.

3.4.4 Volumes de controle na fronteira: condição de contorno convectiva

Para facilitar a compreensão a respeito da discretização da equação de difusão tridimensional para os volumes localizados no contorno, será utilizado, como exemplo, um volume de controle situado na fronteira interna do lado oeste. O ponto nodal P destes volumes, bem como os seus vizinhos, podem ser observados na Figura 3.10.

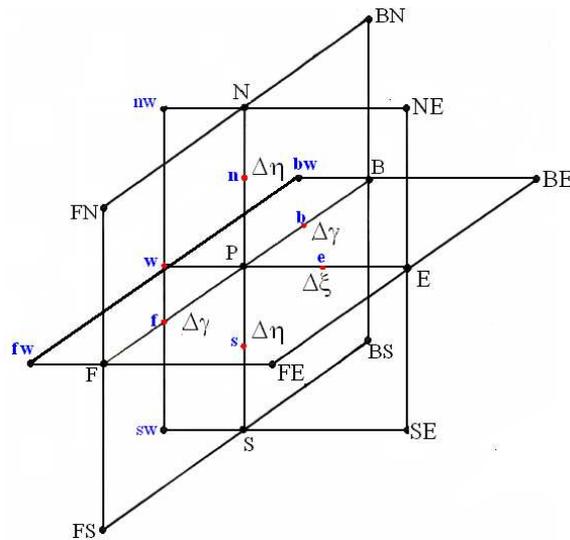


Figura 3.10 - Ponto nodal P localizado na fronteira oeste interna e seus vizinhos.

A Figura 3.11a mostra o volume de controle localizado na parte interna da face oeste, enquanto na Figura 3.11b aparece o perfil do contorno oeste.

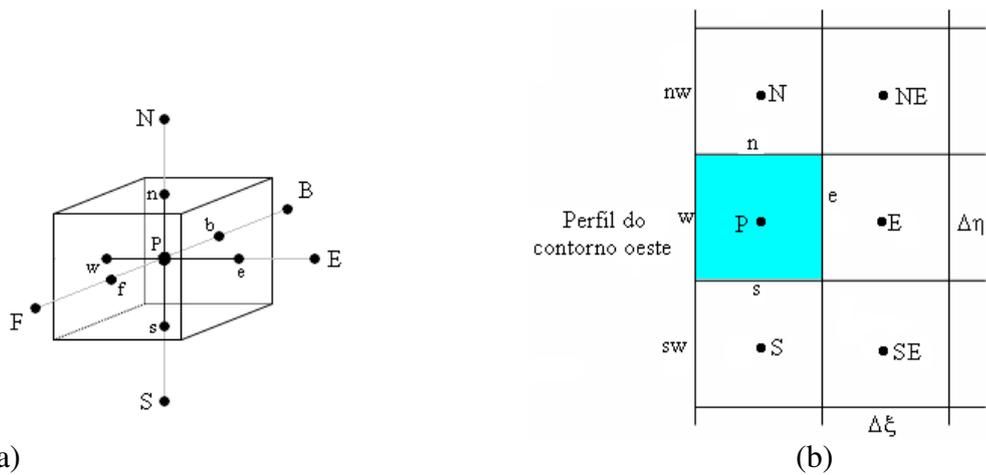


Figura 3.11 - (a) Volume de controle localizado na fronteira oeste do domínio transformado; (b) Perfil do contorno oeste.

3.4.4.1 Fluxo e derivadas

Deve-se observar que para os volumes de controle localizados na face oeste da malha, a condição de contorno convectiva na forma discretizada impõe a seguinte igualdade:

$$-\Gamma_w^\Phi \frac{\Phi_P - \Phi_w}{\Delta n_w} = h_w (\Phi_{\infty w} - \Phi_w) \quad (3.95)$$

onde h_w é o coeficiente de transferência convectivo de calor ou de massa na face oeste do volume de controle e $\Phi_{\infty w}$ é o valor da variável genérica referente ao fluido na vizinhança externa do corpo em estudo, na mesma fronteira e Δn_w é definido pela Equação (3.24).

O valor da variável Φ no contorno oeste, Φ_w , pode ser obtido a partir da Equação (3.95), sendo dada pela seguinte expressão:

$$\Phi_w = \frac{\Phi_P + f_w \Phi_{\infty w}}{1 + f_w} \quad (3.96)$$

Por analogia, expressões semelhantes são obtidas para os seus vizinhos e os resultados são apresentados abaixo:

$$\Phi_{nw} = \frac{\Phi_N + f_{nw} \Phi_{\infty nw}}{1 + f_{nw}} \quad (3.97)$$

$$\Phi_{sw} = \frac{\Phi_S + f_{sw} \Phi_{\infty sw}}{1 + f_{sw}} \quad (3.98)$$

$$\Phi_{fw} = \frac{\Phi_F + f_{fw} \Phi_{\infty fw}}{1 + f_{fw}} \quad (3.99)$$

$$\Phi_{bw} = \frac{\Phi_B + f_{bw} \Phi_{\infty bw}}{1 + f_{bw}} \quad (3.100)$$

onde a forma genérica do fator f é a seguinte:

$$f = \frac{h \Delta n}{\Gamma^\Phi} \quad (3.101)$$

em que Δn representa a distância física genérica entre o ponto nodal de cada volume de controle e uma das faces e pode ser determinado pela Equação (3.24) devidamente adaptada para cada face.

O fluxo por unidade de área no contorno oeste do volume de controle em estudo pode ser obtido pela substituição da Equação (3.96) em um dos membros da Equação (3.95), de tal forma que se obtém:

$$\phi_w'' = \frac{\Phi_{\infty w} - \Phi_P}{\frac{1}{h_w} + \frac{\Delta n_w}{\Gamma_w^\Phi}} \quad (3.102)$$

Por outro lado, na equação de difusão na forma discretizada, é possível identificar a expressão para o fluxo na face oeste, como sendo:

$$\phi_w'' \Delta S_w = -\alpha_{11w} J_w \Gamma_w^\Phi \Delta \eta \Delta \gamma \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_w - \alpha_{12w} J_w \Gamma_w^\Phi \Delta \eta \Delta \gamma \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right|_w - \alpha_{13w} J_w \Gamma_w^\Phi \Delta \eta \Delta \gamma \left. \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} \right|_w \quad (3.103)$$

onde ΔS_w é a área da face oeste.

As derivadas que diferem daquelas determinadas para os volumes internos (Equações 3.53 a 3.56) são as que dependem do valor de Φ no contorno oeste e podem ser escritas como:

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_n = \frac{1}{4\Delta \xi} \left[-\frac{(1-f_w)}{1+f_w} \Phi_P - \frac{(1-f_{nw})}{1+f_{nw}} \Phi_N + \Phi_E + \Phi_{NE} - 2 \left(\frac{f_w}{1+f_w} \Phi_{\infty w} + \frac{f_{nw}}{1+f_{nw}} \Phi_{\infty nw} \right) \right] \quad (3.104)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_s = \frac{1}{4\Delta \xi} \left[-\frac{(1-f_w)}{1+f_w} \Phi_P - \frac{(1-f_{sw})}{1+f_{sw}} \Phi_S + \Phi_E + \Phi_{SE} - 2 \left(\frac{f_w}{1+f_w} \Phi_{\infty w} + \frac{f_{sw}}{1+f_{sw}} \Phi_{\infty sw} \right) \right] \quad (3.105)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_f = \frac{1}{4\Delta\xi} \left[-\frac{(1-f_w)}{1+f_w} \Phi_P - \frac{(1-f_{fw})}{1+f_{fw}} \Phi_F + \Phi_E + \Phi_{FE} - 2 \left(\frac{f_w}{1+f_w} \Phi_{\infty w} + \frac{f_{fw}}{1+f_{fw}} \Phi_{\infty fw} \right) \right] \quad (3.106)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right|_b = \frac{1}{4\Delta\xi} \left[-\frac{(1-f_w)}{1+f_w} \Phi_P - \frac{(1-f_{bw})}{1+f_{bw}} \Phi_B + \Phi_E + \Phi_{BE} - 2 \left(\frac{f_w}{1+f_w} \Phi_{\infty w} + \frac{f_{bw}}{1+f_{bw}} \Phi_{\infty bw} \right) \right] \quad (3.107)$$

As demais derivadas permanecem dadas pelas Equações (3.43) a (3.60), excetuando-se naturalmente, as Equações (3.53) a (3.56) que foram substituídas pelas Equações (3.104) a (3.107).

3.4.4.2 Equação de difusão na forma discretizada (volumes de fronteira)

Substituindo as derivadas referenciadas no parágrafo anterior na Equação (3.42), encontra-se a seguinte equação algébrica para os volumes de controle situados no contorno oeste interno:

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_P \Phi_P}{J_P} \frac{\Delta\xi \Delta\eta \Delta\gamma}{\Delta\tau} &= \alpha_{11e} J_e \Gamma_e^\Phi \Delta\eta \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_E - \Phi_P}{\Delta\xi} \right) + \alpha_{12e} J_e \Gamma_e^\Phi \Delta\eta \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_N + \Phi_{NE} - \Phi_S - \Phi_{SE}}{4\Delta\eta} \right) + \\ &+ \alpha_{13e} J_e \Gamma_e^\Phi \Delta\eta \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_F + \Phi_{FE} - \Phi_B - \Phi_{BE}}{4\Delta\gamma} \right) + \frac{\Phi_{\infty w} - \Phi_P}{\frac{1}{h_w} + \frac{\Delta n_w}{\Gamma_w^\Phi}} \Delta S_w + \\ &+ \alpha_{21n} J_n \Gamma_n^\Phi \frac{\Delta\gamma}{4} \left[-\frac{(1-f_w)}{1+f_w} \Phi_P - \frac{(1-f_{nw})}{1+f_{nw}} \Phi_N + \Phi_E + \Phi_{NE} - 2 \left(\frac{f_w}{1+f_w} \Phi_{\infty w} + \frac{f_{nw}}{1+f_{nw}} \Phi_{\infty nw} \right) \right] \\ &+ \alpha_{22n} J_n \Gamma_n^\Phi \Delta\xi \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_N - \Phi_P}{\Delta\eta} \right) + \alpha_{23n} J_n \Gamma_n^\Phi \Delta\xi \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_F + \Phi_{FN} - \Phi_B - \Phi_{BN}}{4\Delta\gamma} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \alpha_{21s} J_s \Gamma_s^\Phi \frac{\Delta\gamma}{4} \left[-\frac{(1-f_w)}{1+f_w} \Phi_P - \frac{(1-f_{sw})}{1+f_{sw}} \Phi_S + \Phi_E + \Phi_{SE} - 2 \left(\frac{f_w}{1+f_w} \Phi_{\infty w} + \frac{f_{sw}}{1+f_{sw}} \Phi_{\infty sw} \right) \right] - \\
& - \alpha_{22s} J_s \Gamma_s^\Phi \Delta\xi \Delta\gamma \left(\frac{\Phi_P - \Phi_S}{\Delta\eta} \right) - \alpha_{23s} J_s \Gamma_s^\Phi \Delta\xi \Delta\eta \left(\frac{\Phi_F + \Phi_{FS} - \Phi_B - \Phi_{BS}}{4\Delta\gamma} \right) + \\
& + \alpha_{31f} J_f \Gamma_f^\Phi \frac{\Delta\eta}{4} \left[-\frac{(1-f_w)}{1+f_w} \Phi_P - \frac{(1-f_{fw})}{1+f_{fw}} \Phi_F + \Phi_E + \Phi_{FE} - 2 \left(\frac{f_w}{1+f_w} \Phi_{\infty w} + \frac{f_{fw}}{1+f_{fw}} \Phi_{\infty fw} \right) \right] + \\
& + \alpha_{32f} J_f \Gamma_f^\Phi \Delta\xi \Delta\eta \left(\frac{\Phi_N + \Phi_{FN} - \Phi_S - \Phi_{FS}}{4\Delta\eta} \right) + \alpha_{33f} J_f \Gamma_f^\Phi \Delta\xi \Delta\eta \left(\frac{\Phi_F - \Phi_P}{\Delta\gamma} \right) - \\
& \alpha_{31b} J_b \Gamma_b^\Phi \frac{\Delta\eta}{4} \left[-\frac{(1-f_w)}{1+f_w} \Phi_P - \frac{(1-f_{bw})}{1+f_{bw}} \Phi_B + \Phi_E + \Phi_{BE} - 2 \left(\frac{f_w}{1+f_w} \Phi_{\infty w} + \frac{f_{bw}}{1+f_{bw}} \Phi_{\infty bw} \right) \right] - \\
& - \alpha_{32b} J_b \Gamma_b^\Phi \Delta\xi \Delta\eta \left(\frac{\Phi_N + \Phi_{BN} - \Phi_S - \Phi_{BS}}{4\Delta\eta} \right) - \alpha_{33b} J_b \Gamma_b^\Phi \Delta\xi \Delta\eta \left(\frac{\Phi_P - \Phi_B}{\Delta\gamma} \right) + \frac{S_P \Phi_P}{J_P} \Delta\xi \Delta\eta \Delta\gamma + \\
& + \frac{S_C}{J_P} \Delta\xi \Delta\eta \Delta\gamma + \frac{\lambda_P^0 \Phi_P^0}{J_P} \frac{\Delta\xi \Delta\eta \Delta\gamma}{\Delta\tau}
\end{aligned} \tag{3.108}$$

que resulta, após algumas manipulações matemáticas, na seguinte equação algébrica para os volumes de controle localizados na face oeste interna:

$$\begin{aligned}
A_p \Phi_P = & A_e \Phi_E + A_n \Phi_N + A_s \Phi_S + A_f \Phi_F + A_b \Phi_B + A_{ne} \Phi_{NE} + A_{se} \Phi_{SE} + A_{fe} \Phi_{FE} \\
& + A_{be} \Phi_{BE} + A_{fn} \Phi_{FN} + A_{fs} \Phi_{FS} + A_{bn} \Phi_{BN} + A_{bs} \Phi_{BS} + B
\end{aligned} \tag{3.109}$$

em que:

$$\begin{aligned}
A_p = & \frac{\lambda_p}{J_p} \frac{\Delta \xi \Delta \eta \Delta \gamma}{\Delta \tau} + \frac{\Delta \eta \Delta \gamma}{\Delta \xi} \alpha_{11e} J_e \Gamma_e^\Phi + \frac{\Delta S_w}{\frac{1}{h_w} + \frac{\Delta n_w}{\Gamma_w^\Phi}} + \frac{\Delta \xi \Delta \gamma}{\Delta \eta} \alpha_{22n} J_n \Gamma_n^\Phi + \frac{\Delta \xi \Delta \gamma}{\Delta \eta} \alpha_{22s} J_s \Gamma_s^\Phi + \\
& + \frac{\Delta \xi \Delta \eta}{\Delta \gamma} \alpha_{33f} J_f \Gamma_f^\Phi + \frac{\Delta \xi \Delta \eta}{\Delta \gamma} \alpha_{33b} J_b \Gamma_b^\Phi + \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{21n} J_n \Gamma_n^\Phi \frac{(1-f_w)}{1+f_w} - \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{21s} J_s \Gamma_s^\Phi \frac{(1-f_w)}{1+f_w} + \\
& + \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{31f} J_f \Gamma_f^\Phi \frac{(1-f_w)}{1+f_w} - \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{31b} J_b \Gamma_b^\Phi \frac{(1-f_w)}{1+f_w} - \frac{S_p}{J_p} \Delta \xi \Delta \eta \Delta \gamma
\end{aligned} \quad (3.110)$$

$$A_e = \frac{\Delta \eta \Delta \gamma}{\Delta \xi} \alpha_{11e} J_e \Gamma_e^\Phi + \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{21n} J_n \Gamma_n^\Phi - \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{21s} J_s \Gamma_s^\Phi + \frac{\Delta \eta}{4} \alpha_{31f} J_f \Gamma_f^\Phi - \frac{\Delta \eta}{4} \alpha_{31b} J_b \Gamma_b^\Phi \quad (3.111)$$

$$A_n = \frac{\Delta \xi \Delta \gamma}{\Delta \eta} \alpha_{22n} J_n \Gamma_n^\Phi + \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{12e} J_e \Gamma_e^\Phi + \frac{\Delta \xi}{4} \alpha_{32f} J_f \Gamma_f^\Phi - \frac{\Delta \xi}{4} \alpha_{32b} J_b \Gamma_b^\Phi - \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{21n} J_n \Gamma_n^\Phi \frac{1-f_{nw}}{1+f_{nw}} \quad (3.112)$$

$$A_s = \frac{\Delta \xi \Delta \gamma}{\Delta \eta} \alpha_{22s} J_s \Gamma_s^\Phi - \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{12e} J_e \Gamma_e^\Phi - \frac{\Delta \xi}{4} \alpha_{32f} J_f \Gamma_f^\Phi + \frac{\Delta \xi}{4} \alpha_{32b} J_b \Gamma_b^\Phi - \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{21s} J_s \Gamma_s^\Phi \frac{1-f_{sw}}{1+f_{sw}} \quad (3.113)$$

$$\begin{aligned}
A_f = & \frac{\Delta \xi \Delta \eta}{\Delta \gamma} \alpha_{33f} J_f \Gamma_f^\Phi + \frac{\Delta \eta}{4} \alpha_{13e} J_e \Gamma_e^\Phi + \frac{\Delta \xi}{4} \alpha_{23n} J_n \Gamma_n^\Phi - \frac{\Delta \xi}{4} \alpha_{23s} J_s \Gamma_s^\Phi - \\
& \frac{\Delta \eta}{4} \alpha_{31f} J_f \Gamma_f^\Phi \frac{1-f_{fw}}{1+f_{fw}}
\end{aligned} \quad (3.114)$$

$$A_b = \frac{\Delta \xi \Delta \eta}{\Delta \gamma} \alpha_{33b} J_b \Gamma_b^\Phi - \frac{\Delta \eta}{4} \alpha_{13e} J_e \Gamma_e^\Phi - \frac{\Delta \xi}{4} \alpha_{23n} J_n \Gamma_n^\Phi + \frac{\Delta \xi}{4} \alpha_{23s} J_s \Gamma_s^\Phi + \quad (3.115)$$

$$\frac{\Delta \eta}{4} \alpha_{31b} J_b \Gamma_b^\Phi \frac{1-f_{fw}}{1+f_{fw}}$$

$$A_{ne} = \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{12e} J_e \Gamma_e^\Phi + \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{21n} J_n \Gamma_n^\Phi \quad (3.116)$$

$$A_{se} = -\frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{12e} J_e \Gamma_e^\Phi - \frac{\Delta \gamma}{4} \alpha_{21s} J_s \Gamma_s^\Phi \quad (3.117)$$

$$A_{fe} = \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{13e} J_e \Gamma_e^\Phi + \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{31f} J_f \Gamma_f^\Phi \quad (3.118)$$

$$A_{be} = -\frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{13e} J_e \Gamma_e^\Phi - \frac{\Delta\eta}{4} \alpha_{31b} J_b \Gamma_b^\Phi \quad (3.119)$$

$$A_{fn} = \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{23n} J_n \Gamma_n^\Phi + \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{32f} J_f \Gamma_f^\Phi \quad (3.120)$$

$$A_{fs} = -\frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{23s} J_s \Gamma_s^\Phi - \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{32f} J_f \Gamma_f^\Phi \quad (3.121)$$

$$A_{bn} = -\frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{23n} J_n \Gamma_n^\Phi - \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{32b} J_b \Gamma_b^\Phi \quad (3.122)$$

$$A_{bs} = \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{23s} J_s \Gamma_s^\Phi + \frac{\Delta\xi}{4} \alpha_{32b} J_b \Gamma_b^\Phi \quad (3.123)$$

$$\begin{aligned} B = & \frac{\lambda_P^0 \Phi_P^0}{J_P} \frac{\Delta\xi \Delta\eta \Delta\gamma}{\Delta\tau} + \frac{S_C}{J_P} \Delta\xi \Delta\eta \Delta\gamma - \frac{\Delta\gamma}{2} \alpha_{21n} J_n \Gamma_n^\Phi \left(\frac{f_w}{1+f_w} \Phi_{\infty w} + \frac{f_{nw}}{1+f_{nw}} \Phi_{\infty nw} \right) + \\ & + \frac{\Delta\gamma}{2} \alpha_{21s} J_s \Gamma_s^\Phi \left(\frac{f_w}{1+f_w} \Phi_{\infty w} + \frac{f_{sw}}{1+f_{sw}} \Phi_{\infty sw} \right) - \frac{\Delta\eta}{2} \alpha_{31f} J_f \Gamma_f^\Phi \left(\frac{f_w}{1+f_w} \Phi_{\infty w} + \frac{f_{fw}}{1+f_{fw}} \Phi_{\infty fw} \right) + \\ & + \frac{\Delta\eta}{2} \alpha_{31b} J_b \Gamma_b^\Phi \left(\frac{f_w}{1+f_w} \Phi_{\infty w} + \frac{f_{bw}}{1+f_{bw}} \Phi_{\infty bw} \right) + \frac{\Phi_{\infty w}}{\frac{1}{h_w} + \frac{\Delta n_w}{\Gamma_w^\Phi}} \Delta S_w \end{aligned} \quad (3.124)$$

3.5 Discretização do valor médio da variável de interesse ($\bar{\Phi}$)

Conforme mencionado na Seção 2.3.1.1 do Capítulo 2, o valor médio da variável de interesse é calculado pela Equação (2.13) para o caso unidimensional. Quando se trabalha num domínio tridimensional contínuo, o valor médio passa a ser calculado por:

$$\bar{\Phi}(t) = \frac{\int_V \Phi(x, y, z, t) dV}{\int_V dV} \quad (3.125)$$

Para os sólidos de interesse neste trabalho, a discretização da Equação (3.125) fornece a seguinte média ponderada (Silva, W., 2009):

$$\bar{\Phi}(t) = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^{N_\gamma} \sum_{j=1}^{N_\eta} \sum_{i=1}^{N_\xi} \Phi(i, j, k, t) \Delta V_{ijk} \quad (3.126)$$

com

$$V = \sum_{k=1}^{N_\gamma} \sum_{j=1}^{N_\eta} \sum_{i=1}^{N_\xi} \Delta V_{ijk} \quad (3.127)$$

onde V é o volume do sólido, i, j e k definem a posição do ponto nodal do volume de controle na malha 3D, ΔV é o valor do volume deste volume de controle, enquanto N_ξ, N_η e N_γ definem o número de linhas ξ, η e γ , respectivamente. Por outro lado, em todo este trabalho, foi estabelecido que as linhas ξ, η e γ devem ser numeradas seqüencialmente, através de números inteiros a partir de 1, o que significa $\Delta\xi = \Delta\eta = \Delta\gamma = 1$. Assim, o volume de um volume de controle, pode ser escrito, a partir da Equação (2.63), como:

$$\Delta V_{ijk} = \frac{1}{J_{ijk}} \quad (3.128)$$

Ao longo do presente trabalho, o jacobiano de um volume de controle com ponto nodal P é simbolizado de forma simplificada por J_P . Dessa forma, a Equação (3.125) pode ser reescrita do seguinte modo:

$$\bar{\Phi} = \frac{1}{\sum \frac{1}{J_P}} \sum \Phi_P \frac{1}{J_P} \quad (3.129)$$

onde o somatório deve ser aplicado a todos os volumes de controle. Deve ser observado que $1/J_P$ corresponde ao volume do volume de controle cujo ponto nodal é P. Dessa forma, fica claro que o valor médio de Φ é determinado através de uma média ponderada em que o volume de cada volume de controle é usado na ponderação.

3.6 Avaliação de Γ^Φ nas faces dos volumes de controle

A discretização da equação de difusão requer o conhecimento dos valores de Γ^Φ nas faces leste, oeste, norte, sul, frente e atrás de cada volume de controle, conforme pode ser verificado através da Equação (3.42). Obviamente que, se Γ^Φ for constante em todo domínio, este é o valor para todas as faces do volume de controle. Para os casos em que Γ^Φ seja variável no domínio, a estimativa dos seus valores pode ser feita pressupondo a validade da Lei de Fourier (Equação 2.4) ou da primeira lei de Fick (Equação 2.10). Estas leis, para uma variável dependente Φ , em que o coeficiente de transporte seja dado por Γ^Φ , podem ser reescritas do seguinte modo (Silva, W., 2009):

$$\vec{J} = -\Gamma^\Phi \nabla \Phi, \quad (3.130)$$

o que leva a

$$J = -\Gamma^\Phi \frac{\Delta \Phi}{\Delta n}, \quad (3.131)$$

lembrando que \vec{J} é o fluxo na face do volume de controle sob estudo e Δn é a distância do ponto nodal desse volume à face. A partir da Equação (3.131), pode-se escrever:

$$\Delta \Phi = -\frac{1}{\Gamma^\Phi} J \Delta n \quad (3.132)$$

A determinação de uma expressão para a estimativa de Γ^Φ em uma face comum a dois volumes de controle pode ser feita com base na Figura (3.12), que apresenta um volume de controle P e o seu vizinho oeste (W), cada um com um valor específico para o coeficiente de

transporte, Γ_P^Φ e Γ_W^Φ , respectivamente (Figura 3.12a) e um domínio equivalente com coeficiente de transporte constante e igual a Γ_{eq}^Φ para os dois volumes de controle, como é o caso da Figura 3.12b.

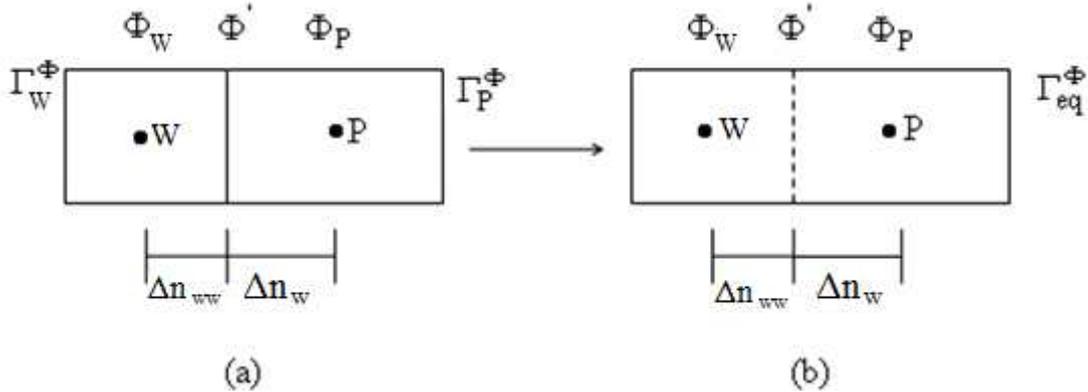


Figura 3.12 - Dois volumes de controle com Γ^Φ igual a: (a) Γ_P^Φ e Γ_W^Φ ; (b) Γ_{eq}^Φ

O que se busca é o valor de Γ^Φ na face oeste do volume de controle identificado pelo ponto nodal P, que neste caso é a face comum aos dois volumes de controle. Para isso, pode-se imaginar que o domínio equivalente descrito na Figura 3.12b substitui a situação descrita na Figura 3.12a. Em ambas as situações, Φ' é o valor da grandeza na face comum aos dois volumes, enquanto Δn_w representa a distância do ponto nodal P à face oeste, definida pela Equação (3.24), e Δn_{ww} fornece a distância do ponto nodal W a essa mesma face, que também deve ser calculada pela Equação (3.24), devidamente adaptada.

Usando a identidade

$$\Phi_P - \Phi_W = (\Phi_P - \Phi') + (\Phi' - \Phi_W), \quad (3.133)$$

levando em conta que o fluxo \bar{J} deve ter o mesmo valor para que as situações (a) e (b) da Figura 3.12 sejam equivalentes, substituindo a Equação (3.132) na Equação (3.133) e considerando as definições da Figura 3.12, chega-se ao seguinte resultado:

$$\frac{\Delta n_w + \Delta n_{ww}}{\Gamma_{eq}^\Phi} = \frac{\Delta n_w}{\Gamma_P^\Phi} + \frac{\Delta n_{ww}}{\Gamma_W^\Phi} \quad (3.134)$$

O primeiro membro da Equação (3.134) é uma decorrência da discretização da Equação (3.132) aplicada à situação (b) da Figura (3.12), enquanto o segundo membro é decorrente da mesma discretização aplicada à situação (a).

Isolando Γ_{eq}^Φ na Equação (3.134) e, em seguida fazendo-se alguns rearranjos, chega-se à Equação (3.135), que é uma forma mais cômoda para fins de implementação computacional.

$$\Gamma_{eq}^\Phi = \frac{\Gamma_P^\Phi \Gamma_W^\Phi}{(1 - f_d)\Gamma_P^\Phi + f_d \Gamma_W^\Phi} \quad (3.135)$$

em que

$$f_d = \frac{\Delta n_w}{\Delta n_w + \Delta n_{ww}} \quad (3.136)$$

Obviamente, se Γ_{eq}^Φ é o valor equivalente da propriedade em todo domínio da Figura 3.12b, este é o valor de Γ^Φ na face comum entre os pontos nodais P e W.

3.7 Determinação dos parâmetros de transporte Γ^Φ e h a partir de um conjunto de dados experimentais – processo de otimização

Além da simulação de problemas, cujos parâmetros de processo sejam conhecidos, um dos objetivos deste trabalho é possibilitar a determinação de tais parâmetros a partir de dados experimentais, através do recurso da otimização. A razão disto é que em muitos problemas de difusão há a necessidade da determinação do valor de h e de uma expressão para Γ^Φ em um domínio cuja cinética de difusão seja conhecida, através da medição de dados experimentais. A função do otimizador é possibilitar a determinação desses valores (h e os parâmetros da função proposta para Γ^Φ), de forma que a solução numérica produza resultados para a cinética de secagem o mais próximo possível dos dados experimentais. Um dos métodos usados em otimização é o método inverso (Mariani et al., 2008; Mariani et al., 2009), em que são atribuídos valores aos parâmetros de interesse, seguido da solução da equação que descreve o

sistema, sendo que os resultados obtidos são comparados com os dados experimentais relativos ao sistema. A partir da comparação, novos valores para os parâmetros são estabelecidos, e o processo continua até que os resultados simulados possam ser considerados suficientemente próximos dos resultados experimentais. Esta comparação envolve a minimização de uma função, denominada de função objetivo. Visando à determinação de tais parâmetros, no código computacional proposto, uma sub-rotina foi desenvolvida com o propósito de minimizar a função objetivo qui-quadrado relativo ao processo de ajuste de uma curva simulada aos dados experimentais.

Conforme se sabe, a expressão para o qui-quadrado envolve o ajuste de uma função explícita usada como um modelo (regressão) ou de uma curva simulada a dados experimentais, sendo calculado por (Taylor, 1997; Silva e Silva, 1998):

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N_p} (\delta\Phi_i)^2 \frac{1}{\sigma_i^2} \quad (3.137)$$

onde $\delta\Phi_i$ é o desvio calculado pela diferença entre o valor experimental e o valor simulado, N_p é o número de pontos experimentais, $1/\sigma_i^2$ é o peso estatístico referente ao i -ésimo ponto experimental sendo que, na ausência de informações, em geral, tais pesos são feitos iguais a 1. Vale salientar que σ_i é o desvio padrão do valor médio de Φ_i . Obviamente, o qui-quadrado depende de $\bar{\Phi}^{\text{sim}}$ que, por sua vez, depende dos parâmetros do processo Γ^Φ e h . Em geral, Γ^Φ pode ser expresso por uma função $f(\Phi, A_0, A_1)$ em que “ A_0 ” e “ A_1 ” são constantes que podem ser determinadas via minimização da função objetivo, que no presente trabalho, é o qui-quadrado definido pela Equação (3.137). Estão disponíveis na literatura, algumas listas de funções para Γ^Φ (Lima, 1999; Silva, 2007; Silva, C., 2010).

3.7.1 Cálculo do qui-quadrado relativo a uma simulação numérica

Tendo sido realizada uma simulação numérica para a qual existam dados experimentais disponíveis, o qui-quadrado inerente à simulação pode ser calculado como segue. Considerando o i -ésimo ponto experimental $(t_i, \bar{\Phi}_i)$ de uma grandeza genérica Φ ,

inicialmente deve ser identificado se existe um ponto da simulação com a mesma abscissa t_i . Neste caso, o desvio $\delta\Phi_i$ deve ser calculado diretamente da expressão (Taylor, 1997; Silva e Silva, 1998; Silva, 2007)

$$\delta\Phi_i = \bar{\Phi}_i - \bar{\Phi}^{\text{sim}}, \quad (3.138)$$

em que $\bar{\Phi}^{\text{sim}}$ é o valor médio de Φ obtido na simulação para $t = t_i$.

Caso a abscissa t_i do ponto experimental tenha um valor que esteja entre dois valores simulados, t_i^{sim} e t_{i+1}^{sim} , a situação pode ser representada conforme o esquema mostrado através da Figura 3.13.

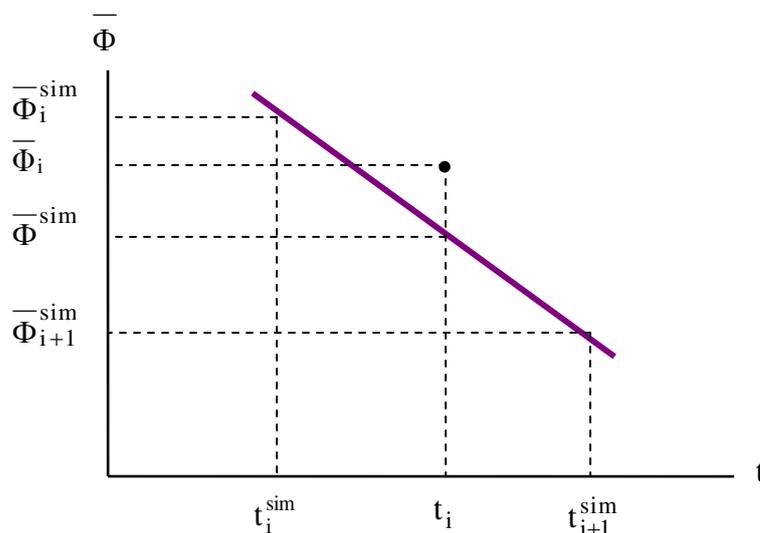


Figura 3.13 – Esquema para o cálculo de $\bar{\Phi}^{\text{sim}}$ por interpolação linear.

Para a situação representada na Figura 3.13, o valor de $\bar{\Phi}^{\text{sim}}$ pode ser calculado por interpolação linear, através da expressão

$$\bar{\Phi}^{\text{sim}} = \frac{\bar{\Phi}_i^{\text{sim}} - \bar{\Phi}_{i+1}^{\text{sim}}}{t_{i+1}^{\text{sim}} - t_i^{\text{sim}}} (t_{i+1}^{\text{sim}} - t_i) + \bar{\Phi}_{i+1}^{\text{sim}} \quad (3.139)$$

o que possibilita a utilização da Eq. (3.137) para o cálculo do desvio referente ao i -ésimo ponto experimental.

Dessa forma, todos os elementos necessários para o cálculo do qui-quadrado relativo ao ajuste tornam-se conhecidos.

Com relação à sub-rotina desenvolvida, a seqüência dos cálculos para a determinação dos parâmetros “ A_0 ”, “ A_1 ” e “ h ”, definidos na Seção 3.7, obedece, basicamente os seguintes passos:

- Passo 1) Definir um intervalo para os parâmetros “ A_0 ”, “ A_1 ” e “ h ” com limites estimados a partir dos resultados obtidos pelo ajuste de soluções analíticas aos dados experimentais, considerando a forma geométrica do sólido sob estudo como parede infinita ou paralelepípedo. Dividir cada intervalo em n valores uniformemente distribuídos.
- Passo 2) Substituir os resultados obtidos na passo 1 na equação de difusão e resolvê-la, determinando o qui-quadrado para cada combinação de valores “ A_0 ”, “ A_1 ” e “ h ” dos intervalos definidos para esses parâmetros. Verificar qual combinação fornece o menor qui-quadrado;
- Passo 3) Definir novos intervalos centralizados no conjunto de valores “ A_0 ”, “ A_1 ” e “ h ” encontrados no passo 2, que forneceram o menor qui-quadrado;
- Passo 4) Refinar cada intervalo definido no passo 3. Isto é feito, subdividindo-se cada intervalo em n valores uniformemente distribuídos. Voltar ao passo 2 até que um critério estabelecido para convergência dos parâmetros seja atingido.

3.8 Metodologia computacional

Com relação à implementação computacional, é necessário estabelecer um conjunto de definições que possibilite a completa solução do problema de difusão como a informação da malha, a definição dos parâmetros físicos e das condições iniciais e de contorno. É necessário também, definir como a modelagem matemática desenvolvida deve ser implementada, viabilizando a criação de um código computacional para resolver a equação de difusão em coordenadas generalizadas. Os resultados obtidos são apresentados na forma de tabelas e

visualizados através de gráficos e de figuras dinâmicas da malha, detalhando a evolução temporal da grandeza estudada. Para dar uma indicação visual dos resultados obtidos, representando as soluções analíticas e numéricas, os gráficos 2D foram traçados com a utilização do LAB Fit Curve Fitting Software V 7.2.46, desenvolvido por Silva e Silva (2009a). Quanto à geração das figuras dinâmicas, gráficos de contorno foram traçados usando o software Contour plots, desenvolvido por Silva, W. (2010).

O primeiro requisito para a solução numérica da equação de difusão escrita em coordenadas generalizadas é a construção de uma malha no domínio arbitrário. Os pontos, nos quais a variável de interesse deve ser calculada, são definidos pela malha numérica que é, essencialmente, uma representação discreta do domínio geométrico onde o problema será resolvido. Ela divide o domínio da solução em um número finito de subdomínios. Dependendo da forma e da organização destes subdomínios, pode-se classificar uma malha como estruturada ou não-estruturada. Uma malha estruturada, ou regular, é constituída por linhas com uma propriedade tal que linhas de uma mesma família não se cruzam e linhas de famílias diferentes só se cruzam uma única vez. Cada elemento interno possui dois vizinhos para o caso unidimensional, enquanto para a situação bidimensional, cada elemento interno possui quatro vizinhos e finalmente para malhas tridimensionais, cada elemento interno possui seis vizinhos. Já uma malha não-estruturada possui elementos que podem ter qualquer forma, não havendo restrições quanto ao número de segmentos que formam tais elementos (Maliska, 2004; Silva; 2007; Silva, W., 2009). As malhas utilizadas no presente trabalho são do tipo malhas estruturadas tridimensionais.

Para as geometrias mais simples, como parede infinita, cubo e paralelepípedo, as malhas uniformes e ortogonais foram geradas no próprio código, a partir da definição das dimensões do sólido e do número de linhas ξ , η e γ . Como o código computacional desenvolvido não propõe geração de malhas, para geometrias mais complexas, as malhas usadas foram geradas pelo software 2D Grid Generation, V. 5.1, desenvolvido por Silva (2008a).

A partir das malhas bidimensionais geradas, o código computacional desenvolvido cria a malha tridimensional a ser estudada.

3.8.1 Validação do código computacional desenvolvido

A modelagem matemática desenvolvida, através da discretização da equação de difusão, resultou num sistema de equações lineares, que foi resolvido pelo método de Gauss-Seidel. Neste método, os cálculos começaram com as condições iniciais dadas e terminou quando o critério de convergência apresentado na Equação (3.140) foi satisfeito, em cada volume de controle do domínio computacional.

$$|\Phi(i, j, k, t + \Delta t) - \Phi(i, j, k, t)| \leq 10^{-8} \quad (3.140)$$

O código computacional proposto foi desenvolvido na plataforma Windows Vista, através da utilização do estúdio Compaq Visual Fortran (CVF), versão 6.6.0 Professional Edition, usando a opção de programação QuickWin Application, e, para a sua validação, foram realizadas simulações para as quais uma solução analítica ou numérica seja conhecida.

Convém salientar que, ao se aplicar a solução numérica para malhas ortogonais, como no caso da parede infinita, do cubo e do paralelepípedo, os termos da equação de difusão discretizada oriundos da não-ortogonalidade da malha são calculados, naturalmente, como iguais a zero. A propósito, este é um dos indicativos da consistência do código proposto.

Em se tratando da validação do código computacional desenvolvido via soluções analíticas, foram realizados estudos teóricos para o transporte da grandeza, atribuindo-se as seguintes formas geométricas aos sólidos: parede infinita e paralelepípedo, impondo-se as condições de contorno de primeiro e terceiro tipos. Para estes testes, foram considerados constantes os parâmetros termofísicos do processo, assim como as dimensões do sólido.

Simulando malhas unidimensionais e tridimensionais e atribuindo-se valores fictícios aos parâmetros de transporte, foi analisado o valor médio de Φ em função do tempo. No caso da condição de contorno prescrita, a comparação foi feita com as soluções analíticas dadas pelas Equações (2.14) e (2.18) usando o software “Prescribed Adsorption - Desorption”, V. 2.2, desenvolvido por Silva e Silva (2009b). Para a condição de contorno convectiva, os resultados foram comparados com as soluções analíticas dadas pelas Equações (2.25) e (2.30) usando o software “Convective Adsorption - Desorption”, V. 2.4 (Silva e Silva, 2009c).

Quanto à validação do código numérico desenvolvido a partir de soluções numéricas, foram simulados inicialmente problemas cujos parâmetros de processo fossem constantes e conhecidos. Inicialmente, foram realizadas simulações para testar a consistência e a coerência do referido código, explorando as condições de simetria atribuídas às geometrias estudadas: parede infinita, cubo, paralelepípedo, cilindro finito, cilindro infinito e sólido com seção reta na forma de losango. Para tal, foi empregada a mesma condição de contorno (convectiva ou prescrita) em todas as faces do sólido. Para a comparação dos resultados obtidos foram utilizados os softwares 1D Heat Transfer, V.6.1, (Silva, 2008b) e Diffusion RE V 2.2.0, (Silva, 2008c).

As simulações para testar o código computacional desenvolvido envolveram os seguintes cenários:

- Difusão em regime transiente para sólidos gerados por malhas ortogonais;
- Difusão em regime transiente para sólidos gerados por malhas não-ortogonais e retilíneas. Neste caso, o sólido gerado possui a seção transversal na forma de um losango;
- Difusão em regime transiente para sólidos gerados por malhas curvilíneas. Neste caso foram estudados o cilindro finito e o cilindro infinito;
- Análise da distribuição espacial de Φ em planos dos sólidos para alguns instantes de tempo previamente especificados;
- Análise do valor de Φ em função do tempo para alguns volumes de controle previamente escolhidos;
- Análise do valor médio de Φ em função do tempo para o plano central de alguns sólidos;
- Análise do valor médio de Φ em função do tempo para o cilindro finito;
- Análise do efeito das variações dimensionais ao longo do tempo para o cilindro infinito;
- Análise do efeito de variações no parâmetro Γ^Φ ao longo do tempo para o cilindro infinito;

Todo o tratamento estatístico e análise de dados foram feitos com a utilização do software LAB Fit Curve Fitting V 7.2.46, desenvolvido por Silva e Silva (2009a).

3.9 Softwares utilizados neste trabalho

Além do código computacional desenvolvido, foram utilizados neste trabalho alguns softwares “shareware” disponíveis na internet e elencados a seguir:

1) O software LAB Fit Curve Fitting V 7.2.46 foi desenvolvido por Silva e Silva (2009a) para tratamento e análises de dados experimentais. Usando o LAB Fit, é possível: tratar dados similares; tratar dados não-similares; determinar propagação de erros; traçar gráficos 2D and 3D; executar cálculos (sistema de equações, raízes de funções, equações diferenciais ordinárias, etc); extrair dados (x;y) de um gráfico 2D (digitalização); ajuste de curvas (regressão não linear – método dos mínimos quadráticos, algoritmo de Levenberg-Marquardt, quase 500 funções da biblioteca, com uma e duas variáveis independentes, achar funções, opções que deixam você escrever sua própria função com cerca de 150 caracteres, 6 variáveis independentes e 10 parâmetros).

2) O software “Prescribed Adsorption - Desorption” V. 2.2 (Silva e Silva, 2009b) simula a cinética de secagem de produtos usando a solução analítica (Equações 2.14 e 2.18) da equação de difusão empregando condição de contorno de primeiro tipo.

3) O software “Convective Adsorption - Desorption” V. 2.4 (Silva e Silva, 2009c) simula a cinética de secagem de produtos usando a solução analítica (Equações 2.25 e 2.30) da equação de difusão empregando condição de contorno de terceiro tipo.

4) O software 2D Grid Generation V. 5.1 foi concebido por Silva (2008a) para a geração de malhas estruturadas não-ortogonais, simplesmente conexas e bidimensionais a partir da informação de pontos (x,y) dos contornos, que podem estar contidos em um arquivo de dados com extensão txt ou a partir da digitalização de pontos dos contornos disponíveis em uma figura contida em um arquivo de extensão “bmp” (Silva, 2007). Portanto, para cada situação física simulada, a malha bidimensional gerada pelo referido software foi utilizada como dados de entrada com extensão txt para o código computacional desenvolvido e em seguida, dentro do próprio código, foi transformada em uma malha tridimensional, por extrusão.

5) O Diffusion RE V 2.2.0 é um programa computacional desenvolvido por Silva (2008c) na plataforma Windows que resolve a equação de difusão para qualquer sólido que possa ser obtido a partir da revolução de uma superfície arbitrária em torno de um eixo de simetria ou para sólidos longos de extrusão gerados por malhas bidimensionais arbitrárias.

6) O software 1D Heat Transfer, desenvolvido por Silva (2008b), é destinado ao estudo da difusão transiente unidimensional. Resolve numericamente a equação de difusão unidimensional.

7) O software Contour Plot (Silva, W., 2010) possibilita analisar visualmente a evolução temporal da distribuição espacial do transporte da grandeza Φ em uma malha bidimensional no domínio físico.

3.10 Aplicação do código computacional desenvolvido à secagem de sólidos cerâmicos

As possibilidades de aplicações do código computacional desenvolvido são bastante diversificadas, podendo ser utilizado em qualquer situação que envolva processo de difusão uni, bi e tridimensional em um domínio arbitrário. Como exemplos de aplicações possíveis, podem ser citados a transferência de massa, condução de calor, secagem de sólidos porosos, aquecimento, resfriamento e, em certos casos, congelamento de corpos. No entanto, com a finalidade de testar o código computacional proposto, foi feito um estudo de caso usando resultados experimentais da secagem de materiais cerâmicos, mais precisamente de corpos de prova na forma de telhas moldadas com argila vermelha.

A seguir será apresentado todo o procedimento para o processamento dos sólidos cerâmicos, bem como a descrição do processo de secagem para cinco temperaturas distintas.

3.11 Metodologia experimental

3.11.1 Matéria-prima

Para a fabricação das telhas, a matéria-prima utilizada foi uma argila vermelha, oriunda da cidade de Parelhas, localizada no interior do Estado do Rio Grande do Norte,

Brasil. A princípio, a amostra foi seca em estufa a uma temperatura de 110°C, desintegrada em moinho de bolas, peneirada em malha nº 80 (180 µm) e caracterizada, em termos de composição química e distribuição de tamanho das partículas. Os ensaios foram realizados no Laboratório de Caracterização de Materiais, da Unidade Acadêmica de Engenharia de Materiais do Centro de Ciências e Tecnologia da Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, Brasil.

Para realização da caracterização granulométrica, foi realizado o ensaio por difração a laser de acordo com as instruções operacionais do granulômetro Cilas 1064 LD (2007). Uma descrição detalhada da metodologia utilizada pode ser encontrada em Silva, J. (2009) e Almeida (2009).

3.11.2 Conformação e secagem das telhas cerâmicas

A metodologia experimental empregada nesta pesquisa foi baseada nas experiências realizadas por Almeida (2009) e Silva, J. (2009) e foi dividida em dois estágios:

- a) a conformação da massa plástica em corpos de prova no formato de telhas;
- b) a secagem desse material para cinco temperaturas distintas.

O primeiro estágio foi desenvolvido no Laboratório de Beneficiamento e Processamento de Materiais (LBPM), da Unidade Acadêmica de Engenharia de Materiais, da Universidade Federal de Campina Grande. O pó de cerâmica foi umidificado uniformemente com uma quantidade de água aproximada de 20%, suficiente para adequar a mistura ao processo de extrusão. No intuito de melhorar a plasticidade da amostra, ela foi colocada em um saco plástico devidamente fechado e deixada em repouso por um período de 72 horas. Decorrido esse prazo, a massa foi colocada para conformação numa extrusora de laboratório, da marca Verdés, referência 051, série 0023, fabricada na cidade de Itu, São Paulo no ano de 1999. Em seguida, o produto foi cortado manualmente em diversos corpos de prova, com comprimentos previamente definidos. Após a realização de uma inspeção para eliminação das peças defeituosas, cada corpo de prova foi individualmente embalado em sacos plásticos vedados. O procedimento foi necessário para evitar perda de umidade. Amostras das telhas cerâmicas, imediatamente após a saída da extrusora, são mostradas na Figura 3.14.

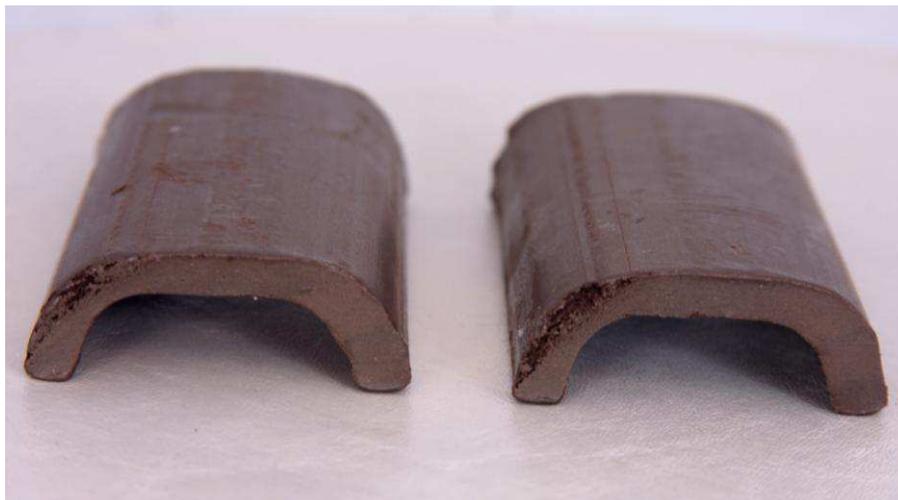


Figura 3.14 – Amostras de telhas cerâmicas utilizadas nesta pesquisa.

Em seguida as amostras foram levadas para o Laboratório Experimental de Térmica e Fluidos (LETF), da Unidade Acadêmica de Engenharia Mecânica, da Universidade Federal de Campina Grande para serem submetidas ao processo de secagem.

Inicialmente, um higrômetro digital da ICEL, modelo HT 208, série 3126, foi utilizado para realizar a leitura da temperatura e da umidade relativa do ar ambiente, cujos valores medidos foram, respectivamente, 26 °C e 75%, em média. Em seguida, os corpos de prova foram colocados no interior de uma estufa com circulação mecânica de ar com controlador digital de temperatura, modelo 320E da FANEM, fabricada em São Paulo, Brasil.

Imediatamente, antes de colocar os corpos de prova na estufa, foram medidas as massas e as dimensões de cada amostra. A pesagem das massas das amostras foi feita com uma balança digital da marca Marte, modelo AL 500C, série 283618 e ano de fabricação 2004, com uma resolução de 0,001 g e capacidade máxima de 500 g.

Para a medida das dimensões da telha, foi utilizado um paquímetro digital TDS marca Digimess, modelo 100.174L, com uma resolução de 0,01 mm e fundo de escala 150 mm. As referidas dimensões foram definidas como comprimento (C), espessura (E) e largura (L).

A largura e a espessura das telhas estão identificadas na Figura 3.15, enquanto a Figura 3.16 mostra o procedimento para a medição do comprimento.

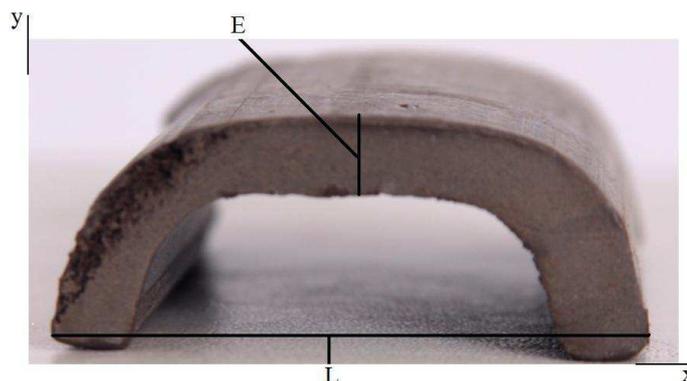


Figura 3.15 – Identificando a largura e a espessura da telha.



Figura 3.16 – Medindo o comprimento da telha.

Para medir a velocidade do ar de secagem, foi utilizado um anemômetro de palhetas com leitura digital da marca Instrutemp, modelo AMI 300, com precisão de leitura de $\pm 2\%$. O resultado, em média, foi cerca de $0,10 \text{ m.s}^{-1}$.

A temperatura interna da estufa foi fixada na temperatura desejada ($60 \text{ }^\circ\text{C}$, $75 \text{ }^\circ\text{C}$, $80 \text{ }^\circ\text{C}$, $90 \text{ }^\circ\text{C}$ e $105 \text{ }^\circ\text{C}$). No entanto, os controladores de temperatura, normalmente não oferecem valores confiáveis desta grandeza e, por isso, foi realizada uma leitura direta no interior da estufa para se obter as medidas reais das temperaturas de secagem. Os valores obtidos foram respectivamente $55,6 \text{ }^\circ\text{C}$, $69,7 \text{ }^\circ\text{C}$, $72,8 \text{ }^\circ\text{C}$, $82,7 \text{ }^\circ\text{C}$ e $98,6 \text{ }^\circ\text{C}$. Estas medidas foram realizadas com um termômetro digital infravermelho da marca Instrutemp, modelo TI 890, com capacidade para medir um intervalo de temperatura de -50 a 1000°C e precisão de leitura de $\pm 2 \text{ }^\circ\text{C}$. A Figura 3.17 mostra a disposição das telhas dentro da estufa durante a secagem para as diferentes condições controladas de temperatura.



Figura 3.17 – Disposição das telhas no interior da estufa.

Após o procedimento inicial de medidas, as telhas foram levadas ao interior da estufa e a partir desse momento, houve um acompanhamento da evolução temporal das dimensões e da massa das telhas. As amostras eram retiradas da estufa para que fossem realizadas as referidas medidas, em intervalos de tempo que variaram de 4 a 5 minutos no início da secagem até cerca de 1 ou 2 h no final do processo. As variações no intervalo de tempo foram diferentes para cada temperatura de secagem. Este procedimento aconteceu até que a massa atingisse o seu valor de equilíbrio. Ao final de cada secagem, a temperatura da estufa foi regulada em 105 °C e os corpos de prova lá permaneceram por mais 24 h para a completa eliminação da água de conformação, possibilitando a determinação da massa seca, de acordo com o método oficial da Association of Official Agricultural Chemists (AOAC, 2005).

3.12 Considerações gerais

Os dados relativos às temperaturas de 55,6; 69,7; 82,7 e 98,6 °C foram usados para determinar os parâmetros D_{ef} e h , para cada temperatura, por otimização, usando a solução numérica proposta. Este processo de otimização foi realizado levando em consideração dois modelos: o primeiro deles considerou os parâmetros termofísicos e as dimensões do sólido sem variações, enquanto no segundo modelo foi incluído o efeito do encolhimento, além de considerar a difusividade efetiva de massa como uma função linear da razão de umidade local. Com os valores determinados, foram obtidas expressões para D_{ef} e h em função da temperatura, através do processo de ajuste, denominado de Ajuste de Curvas ou Regressão (Silva e Silva, 1998).

Uma vez que D_{ef} e h foram determinados, pelo algoritmo proposto, para um conjunto de dados experimentais, a distribuição do teor de umidade dentro das telhas pode ser determinada como função da posição (x, y, z) para um dado instante t , usando a solução numérica proposta. Por outro lado, a Equação (3.129) pode ser usada para descrever a cinética de secagem do produto.

Os resultados obtidos foram estatisticamente analisados pelo LAB Fit Curve Fitting Software. Os coeficientes de determinação R^2 e o qui-quadrado χ^2 foram usados como indicadores estatísticos para análise dos resultados.

Por outro lado, a equação de Arrhenius foi usada para determinar expressões para a difusividade efetiva de massa e para a constante de transferência convectiva h , como função da temperatura:

$$D_{ef} = D_{0ef} \exp\left[-\frac{E_a}{R(T + 273,15)}\right], \quad (3.141)$$

e

$$h = h_0 \exp\left[-\frac{E_h}{R(T + 273,15)}\right] \quad (3.142)$$

onde D_{0ef} ($m^2 s^{-1}$) e h_0 ($m s^{-1}$) são os fatores pré-exponenciais; E_a é a energia de ativação ($J mol^{-1}$); R é a constante universal dos gases ($8,314 J mol^{-1} K^{-1}$), T é a temperatura ($^{\circ}C$) e E_h é um parâmetro de ajuste da Equação (3.142).

No modelo que considerou o volume e a difusividade efetiva constantes durante todo processo de secagem, os dados referentes à temperatura de $72,8^{\circ}C$ foram usados para testar as expressões obtidas para D_{ef} e h . Estes parâmetros foram calculados através das Equações (3.141) e (3.142) para a referida temperatura e os valores obtidos foram usados para simular a cinética de secagem, que foi comparada com os resultados experimentais.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foram realizados estudos experimentais e teóricos, incluindo análise numérica, relativos ao processo de difusão em sólidos com geometria arbitrária. Os estudos teóricos resultaram no desenvolvimento de um código computacional para a equação da difusão escrita em coordenadas generalizadas usando as condições de contorno de Dirichlet e de Cauchy. Por outro lado, os estudos experimentais foram direcionados para a secagem de materiais cerâmicos moldados na forma de telhas. Inicialmente, serão apresentados os testes realizados para validação do código computacional desenvolvido e, posteriormente, os resultados decorrentes da aplicação da solução numérica proposta aos dados experimentais obtidos durante a secagem das telhas cerâmicas.

Com a finalidade de validar o código computacional desenvolvido, foi realizado um conjunto de testes abrangendo um grande número de situações físicas de interesse. Tais testes começaram com problemas mais simples, aumentando-se gradativamente o grau de complexidade das situações envolvidas, à medida que os resultados iam confirmando a validade da solução numérica proposta. Estes testes foram divididos de acordo com o tipo de solução usada para a validação: soluções analíticas e soluções numéricas. É importante salientar que todos os parâmetros utilizados, bem como as dimensões dos sólidos são fictícios.

4.1 Validação do código computacional usando soluções analíticas da equação de difusão

Nestes testes, tanto para a parede infinita quanto para o paralelepípedo, foi assumido um valor constante e igual à unidade para o parâmetro de transporte λ , pressupondo uma distribuição inicial uniforme para a grandeza transportada Φ , mantendo-se ainda, os coeficientes de transporte e as dimensões do sólido constantes durante todo o processo. Além disso, foi imposta a mesma condição de contorno (convectiva ou prescrita), o mesmo valor de equilíbrio da grandeza em todas as faces do sólido e ainda, a difusão foi considerada como um processo sem geração de energia, isto é, o termo fonte foi feito igual a zero.

Deve-se evidenciar que a equação de difusão escrita em coordenadas generalizadas para os volumes de controle localizados no contorno foi discretizada para a condição de contorno convectiva. Assim, para simular a condição de contorno prescrita foi necessário e suficiente supor um valor muito grande para a constante de transferência convectiva h .

4.1.1 Validação usando solução analítica para uma parede infinita: valor médio de Φ

O primeiro teste realizado para a validação do código numérico proposto para o processo de difusão descrito pela Equação (2.5) refere-se à geometria unidimensional. Como o trabalho ora apresentado pressupõe que a equação a ser resolvida envolve um domínio físico tridimensional, foi simulada uma parede infinita utilizando um paralelepípedo com o comprimento L_3 e a largura L_2 superdimensionados em relação à espessura L_1 , conforme estudos disponíveis na literatura (Erdoğdu, 2005; Ukrainczyk, 2010). As dimensões atribuídas ao paralelepípedo, bem como as características físicas usadas nesta simulação, para as condições de contorno prescrita e convectiva, estão resumidas na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Parâmetros físicos simulados para resolver a equação de difusão unidimensional.

C.C.	Φ_i	Φ_{eq}	Γ^{Φ} ($m^2 \text{ min}^{-1}$)	h ($m \text{ min}^{-1}$)	$L_1(m)$	$L_2(m)$	$L_3(m)$
Dirichlet	0,2381	0,0133	$4,1636 \times 10^{-8}$	$1,0000 \times 10^{+9}$	$6,02 \times 10^{-3}$	$60,2 \times 10^{-3}$	$120,4 \times 10^{-3}$
Cauchy	0,2381	0,0133	$5,3645 \times 10^{-8}$	$4,8120 \times 10^{-5}$	$6,02 \times 10^{-3}$	$60,2 \times 10^{-3}$	$120,4 \times 10^{-3}$

A situação física está esquematizada na Figura 4.1, com destaque para as coordenadas generalizadas, cujos eixos ξ , η e γ coincidem, respectivamente, com os das coordenadas cartesianas no domínio físico, x , y e z .

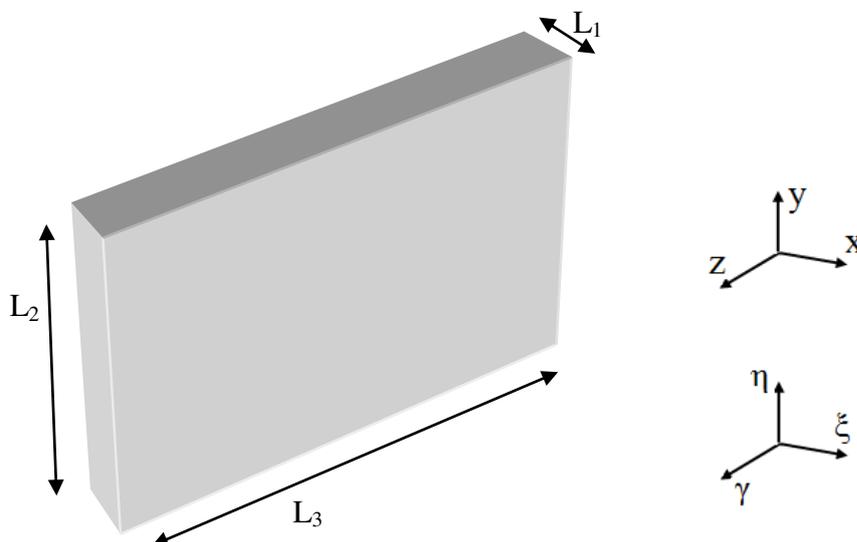


Figura 4.1 – Esquema (fora de escala) do paralelepípedo usado na simulação de uma parede infinita.

Para a solução numérica apresentada foi feito um estudo em relação ao refino da malha no domínio computacional, empregando condição de contorno prescrita, sendo utilizada uma malha com o mesmo número de linhas ξ , η e γ , cujo valor foi de 8 no primeiro caso, o que corresponde a 7 volumes de controle na direção de cada eixo das coordenadas generalizadas. Os outros casos estudados envolveram, na ordem descrita, uma malha de $16 \times 16 \times 16$ linhas ξ , η e γ ; uma malha de $26 \times 26 \times 26$ linhas ξ , η e γ e por último, uma malha de $34 \times 34 \times 34$ linhas ξ , η e γ . A descrição para o regime transiente do valor médio foi realizada para os volumes de controle localizados na região central do paralelepípedo na direção do eixo x . No domínio computacional, esta região está delimitada, em cada caso, pelos planos correspondentes a $N_\eta/2$ e $N_\eta/2 + 1$; $N_\gamma/2$ e $N_\gamma/2 + 1$, onde N_η e N_γ representam o número de linhas η e γ , respectivamente. Assim, foi simulada uma parede infinita com espessura de $6,02 \times 10^{-3}$ m, sendo dividida em 7 volumes de controle para o primeiro caso, 15 para o segundo, 25 para o terceiro caso, enquanto para o quarto e último caso, a parede foi simulada com 33 volumes de controle, todos na direção do eixo ξ . Quanto à discretização no tempo, foi utilizado um Δt igual a 0,2725 minutos e 2000 passos no tempo para as quatro simulações.

A Tabela 4.2 mostra alguns instantes de tempo escolhidos aleatoriamente e os correspondentes valores para o valor médio da grandeza para as quatro malhas analisadas.

Tabela 4.2 – Valor médio da grandeza em alguns instantes de tempo para as quatro malhas estudadas (7 VC*, 15 VC, 25 VC e 33 VC)

t(min.)	27,25	55,59	65,40	107,91	131,89
7 VC	0,15245590	0,11329737	0,10286211	0,06904837	0,05598649
15 VC	0,14927287	0,11109055	0,10080036	0,06745206	0,05419286
25 VC	0,14874310	0,11069878	0,10043114	0,06762472	0,05437088
33 VC	0,14861923	0,11060746	0,10034521	0,06709560	0,05431375

*VC – Volume de Controle

Ao se analisar os resultados da Tabela 4.2, percebe-se que a diferença média calculada entre os 2 valores obtidos para o valor médio em cada instante para as duas últimas malhas estudadas, é da ordem de 10^{-4} . Esta diferença não foi detectada ao se traçar os gráficos da evolução temporal do valor médio da grandeza para essas duas malhas, empregando condição de contorno prescrita, onde se verifica um excelente acordo entre as duas respostas.

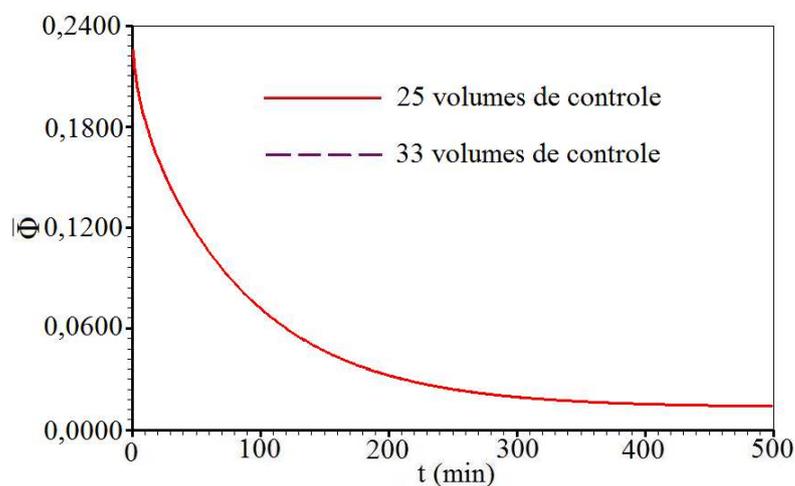


Figura 4.2 – Superposição das soluções obtidas via método numérico proposto para $\bar{\Phi}$ em uma parede infinita com condição de contorno prescrita para duas malhas (33 VC e 25 VC).

Os resultados mostrados na Tabela 4.2 e na Figura 4.2 garantem um resultado satisfatório ao se utilizar qualquer uma dessas duas malhas.

Quanto ao refino no intervalo de tempo, foram feitos cinco estudos para uma malha de $25 \times 25 \times 25$, o que corresponde a 15625 volumes de controle. O primeiro estudo estabeleceu um Δt igual a 1,09 min e 500 passos no tempo; a segunda simulação utilizou 1000 passos no tempo para um Δt igual a 0,5450 min, enquanto que para a terceira simulação foram utilizados 0,2725 min e 2000 passos, a quarta simulação trabalhou com 0,13625 min para 4000 passos no tempo e o último estudo envolveu 0,109 min para 5000 passos no tempo. A condição de contorno utilizada foi a convectiva. Os resultados estão apresentados na Tabela 4.3.

Tabela 4.3 – Refino do intervalo de tempo para a malha tridimensional $25 \times 25 \times 25$ em $t = 27,25$ min.

Passos	500	1000	2000	4000	5000
$\Delta t(\text{min})$	1,09000	0,54500	0,27250	0,13625	0,10900
$\bar{\Phi}(t)$	0,18610250	0,18597033	0,18590411	0,18587105	0,18586450

Com uma tolerância menor que 10^{-4} , os resultados encontrados para o valor médio de $\bar{\Phi}$, a partir de 2000 passos no tempo, são considerados iguais. Para comprovar a veracidade desta informação foram plotados, num mesmo sistema de eixos, os resultados para 2000 e 4000 passos no tempo. Este resultado está mostrado na Figura 4.3.

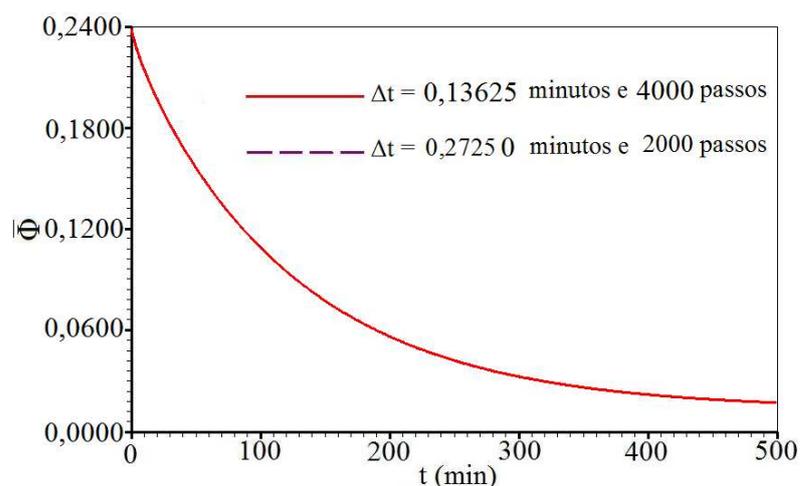


Figura 4.3 - Superposição das soluções obtidas via método numérico proposto para o valor médio $\bar{\Phi}$ em uma parede infinita com condição de contorno convectiva para duas discretizações no tempo ($\Delta t = 0,2725$ min e 2000 passos; $\Delta t = 0,13625$ min e 4000 passos).

Os gráficos apresentados na Figura 4.3 mostram que não houve distinção entre as curvas traçadas, tornando possível, portanto, a utilização de qualquer discretização no tempo, a partir de 2000 passos. Para uma tolerância da ordem de 10^{-4} pode-se utilizar 1000 passos.

Mediante os resultados expostos, as malhas escolhidas para a validação do código computacional desenvolvido foram baseadas neste estudo e, por isso os números de linhas ξ , η e γ , bem como a discretização no tempo oscilaram em torno dos valores apresentados nesta seção, a menos de uma indicação em contrário. Isto garante um refinamento suficiente para o estudo em desenvolvimento, não só para a parede infinita, como também para o paralelepípedo

Partindo agora para a validação do código computacional desenvolvido via soluções analíticas para uma geometria unidimensional, foi simulada uma parede infinita com 33 volumes de controle, 2000 passos no tempo para um $\Delta t = 0,2725$ min.

No código numérico desenvolvido, o valor médio de Φ foi calculado pela expressão desenvolvida na Seção 3.5 e apresentada na Equação (3.129). Por outro lado, os resultados oriundos da solução analítica da equação de difusão para a condição de contorno de Dirichlet, dada pela Equação (2.14), foram obtidos com o software “Prescribed Adsorption-Desorption” referenciado na Seção 3.9. Esta solução foi utilizada para validar a solução numérica proposta. Os gráficos das duas soluções são apresentados na Figura 4.4.

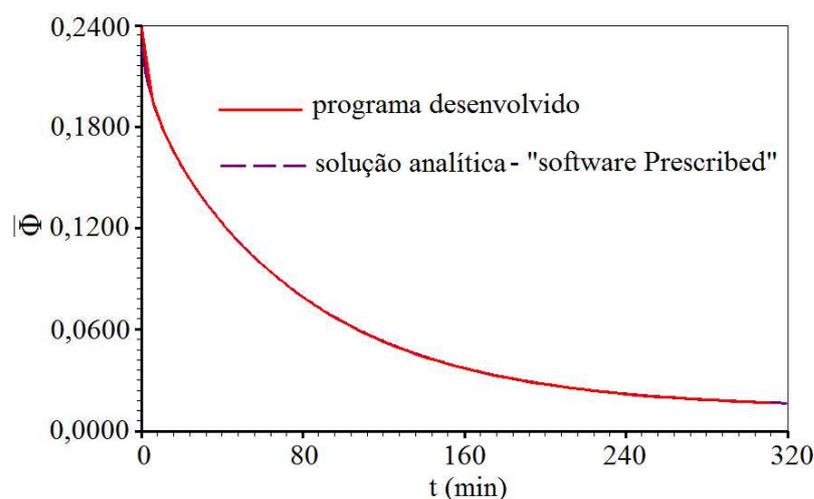


Figura 4.4 - Superposição das soluções obtidas via método numérico proposto e via método analítico para o valor médio $\bar{\Phi}$ em uma parede infinita com condição de contorno prescrita.

Para a condição de contorno de Cauchy, os resultados para a solução analítica, dada pela Equação (2.25), foram obtidos com o software “Convective Adsorption-Desorption”, (Seção 3.9). A superposição das duas soluções (numérica e analítica) está mostrada na Figura 4.5.

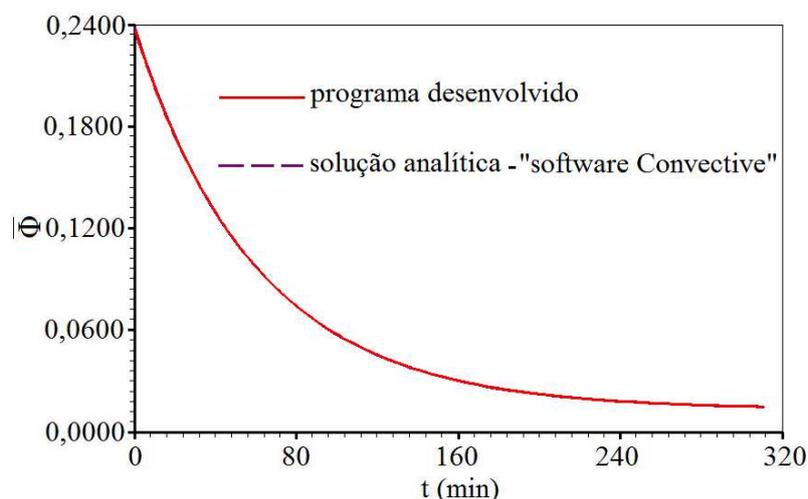


Figura 4.5 - Superposição das soluções obtidas via método numérico proposto e via método analítico para o valor médio $\bar{\Phi}$ em uma parede infinita com condição de contorno convectiva.

Os gráficos apresentados na Figura 4.4 e na Figura 4.5 mostram que há uma boa concordância entre as soluções provenientes do método numérico proposto e do método analítico. Como os resultados numéricos para o transiente do valor médio de Φ coincidiram com os respectivos resultados das soluções analíticas para as duas situações analisadas, é possível afirmar, portanto, que o código computacional desenvolvido é válido para calcular o valor médio de Φ em uma parede infinita empregando tanto a condição de contorno prescrita quanto a convectiva.

4.1.2 Validação usando solução analítica para um paralelepípedo: valor médio de Φ

O segundo teste para validação do código computacional proposto foi realizado para uma malha ortogonal tridimensional, simulando um processo difusivo em um paralelepípedo.

A malha utilizada para obtenção da solução numérica tem por base os estudos feitos no item anterior, bem como os estudos realizados por Nascimento (2002) para paralelepípedos

em condições similares. Assim, foi utilizada uma malha com 26 linhas ξ , 26 linhas η , 26 linhas γ , um número de 2000 passos no tempo para um intervalo $\Delta t = 0,2725$ min.

O domínio físico para esta simulação está esquematizado na Figura 4.6.

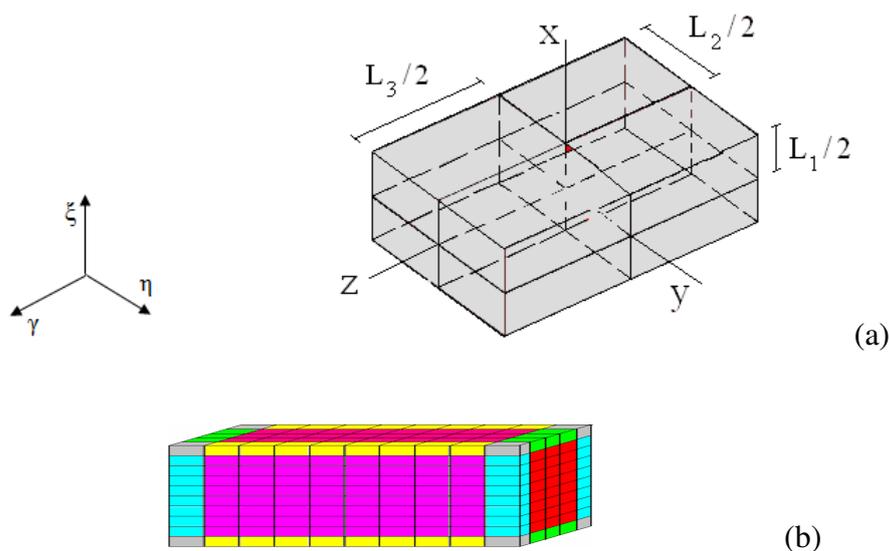


Figura 4.6 – Paralelepípedo (fora de escala) usado na validação da solução numérica proposta para a equação de difusão tridimensional via solução analítica: (a) domínio físico; (b) domínio computacional.

Os parâmetros físicos e as dimensões do sólido utilizado na simulação ora avaliada são apresentados na Tabela 4.4, para as duas condições de contorno empregadas.

Tabela 4.4 – Parâmetros físicos usados na solução da equação de difusão tridimensional.

C.C.	Φ_i	Φ_{eq}	$\Gamma^\Phi (\text{m}^2 \text{min}^{-1})$	$h (\text{m min}^{-1})$	$L_1 (\text{m})$	$L_2 (\text{m})$	$L_3 (\text{m})$
Dirichlet	0,2381	0,0133	$4,598 \times 10^{-8}$	$1,0 \times 10^{+10}$	$6,02 \times 10^{-3}$	$46,16 \times 10^{-3}$	$86,74 \times 10^{-3}$
Cauchy	0,2381	0,0133	$4,629 \times 10^{-8}$	$4,691 \times 10^{-5}$	$6,02 \times 10^{-3}$	$46,16 \times 10^{-3}$	$86,74 \times 10^{-3}$

Utilizando a condição de contorno prescrita, os resultados do valor médio de Φ em função do tempo para o paralelepípedo foram obtidos com a solução numérica proposta e

através da solução analítica, dada pela Equação (2.18) (software “Prescribed Adsorption-Desorption” – Seção 3.9). Os gráficos são mostrados na Figura 4.7, através da qual, observa-se que não há distinção entre as curvas traçadas.

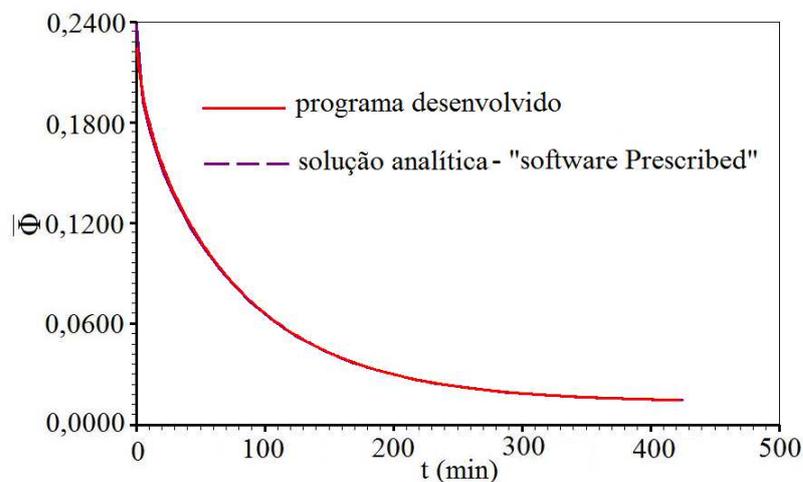


Figura 4.7 - Superposição das soluções obtidas via método numérico proposto e via método analítico para o valor médio $\bar{\Phi}$ em um paralelepípedo com condição de contorno prescrita.

Foram encontrados resultados semelhantes para o transiente do valor médio de Φ , utilizando a mesma geometria e empregando a condição de contorno convectiva. A solução analítica foi obtida com software “Convective Adsorption-Desorption”, que usou a Equação (2.30). As curvas representando as duas soluções são mostradas na Figura 4.8.

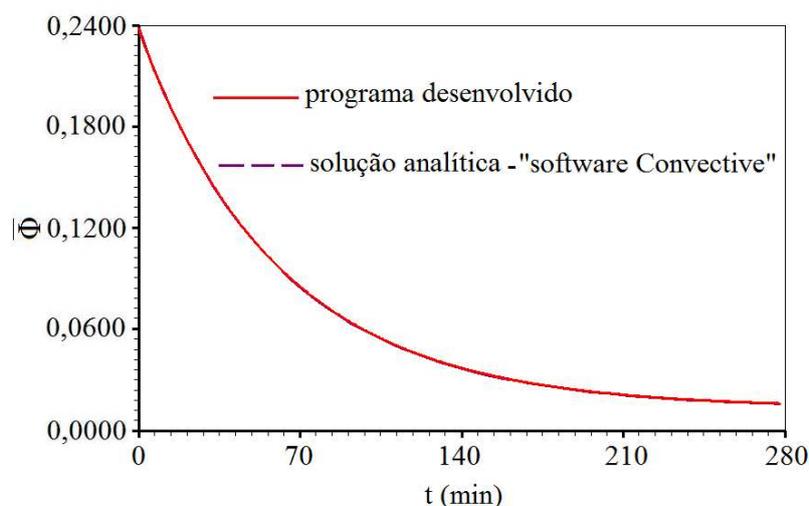


Figura 4.8 - Superposição das soluções obtidas via método numérico proposto e via método analítico para o valor médio $\bar{\Phi}$ em um paralelepípedo com condição de contorno convectiva.

Os resultados apresentados nas Figuras 4.7 e 4.8 possibilitam constatar uma boa concordância entre a solução numérica proposta e a solução analítica para o valor médio da grandeza em um paralelepípedo, tanto para a condição de contorno prescrita quanto para a convectiva.

Diante dos resultados positivos apresentados nesta seção, que tratou da validação do código computacional desenvolvido através de soluções analíticas, verifica-se que os primeiros testes realizados foram bem sucedidos, mostrando que houve um excelente acordo entre os resultados numéricos e os resultados obtidos com a solução analítica. Isto garante, inclusive, que a malha é suficientemente refinada para o estudo desenvolvido. Portanto, neste ponto, é possível afirmar que a solução numérica proposta pode ser usada para resolver a equação de difusão, se o interesse for o de se obter o transiente do valor médio de Φ em uma parede infinita ou em um paralelepípedo em que as condições de contorno utilizadas sejam do primeiro ou terceiro tipos.

4.2 Validação do código computacional desenvolvido usando soluções numéricas da equação de difusão

As primeiras situações físicas para as quais o transporte difusivo foi analisado foram as mais simples, aumentando-se gradativamente o grau de complexidade, tanto das formas geométricas quanto das condições empregadas. Assim, foi seguida a seguinte ordem em relação à geometria: parede infinita, paralelepípedo, sólido obtido da extrusão de um losango, cilindro finito e cilindro infinito. Os resultados serão apresentados nas próximas seções deste capítulo.

4.2.1 Malha unidimensional: valor médio e distribuição espacial em uma parede infinita com propriedades físicas constantes

A primeira geometria a ser utilizada para os referidos testes foi a unidimensional, aproximando a forma do corpo para uma parede infinita e envolveu testes de consistência, explorando condições de simetria, bem como outros testes de validação de acordo com o que foi descrito na Seção 3.8.1.

Devido ao fato da equação de difusão estar sendo resolvida para uma geometria tridimensional, na solução apresentada para este teste foi usado o mesmo procedimento da Seção 4.1.1, isto é, a largura e o comprimento do paralelepípedo foram superdimensionados em relação à espessura, para que o mesmo fosse aproximado à geometria de uma parede infinita. Assim, foi utilizada uma malha 34x34x34 linhas ξ , η e γ , analisando-se os volumes de controle delimitados pelos planos correspondentes a $\eta = 17$, $\eta = 18$, $\gamma = 17$ e $\gamma = 18$. Estes volumes de controle estão localizados na linha central do paralelepípedo na direção do eixo x , no domínio físico, que por sua vez coincide com o eixo ξ , no domínio transformado. Um esquema desta situação física está descrita na Figura 4.9.

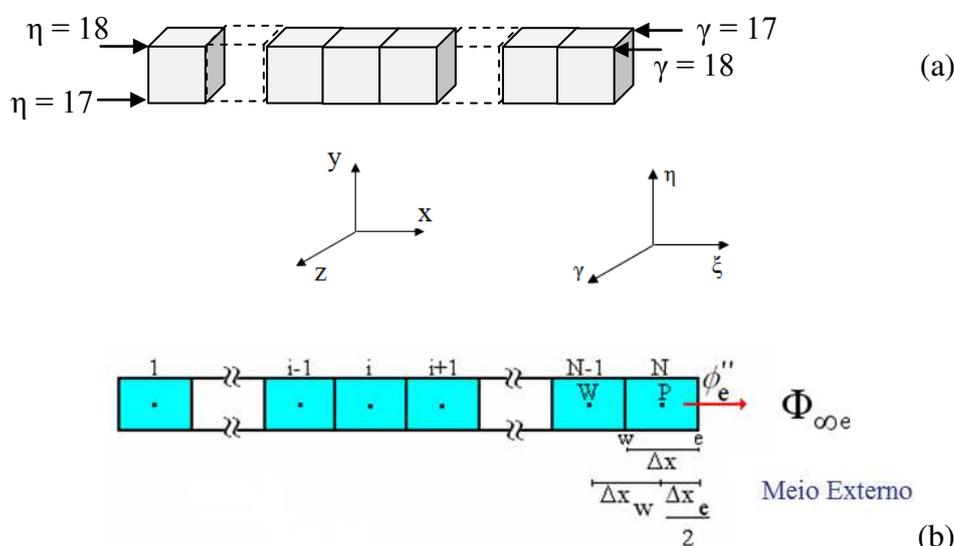


Figura 4.9 – Geometria unidimensional usada para validar o código computacional proposto via solução numérica: (a) discretização tridimensional; (b) aproximação unidimensional.

Os parâmetros físicos usados nesta simulação foram os mesmos empregados para a validação do código numérico via soluções analíticas (ver Tabela 4.1), assumindo-se uma distribuição inicial uniforme da grandeza. Por outro lado, para o parâmetro λ foi assumido um valor constante e igual a unidade, e todos os outros parâmetros, assim como as dimensões do corpo foram considerados constantes.

Desse modo, foi simulado um domínio computacional com 33 volumes de controle, um número de passos no tempo igual a 2000 e $\Delta t = 0,2745$ min, sendo explorada inicialmente a descrição do regime transiente para os volumes de controle representados pelo primeiro nó,

localizado no contorno oeste e o último nó, na fronteira leste da parede infinita, identificados como nó 1 e nó 33, respectivamente.

Os primeiros testes desta seção tiveram como finalidade verificar a consistência da solução numérica apresentada neste trabalho e, para isto, foi imposta a mesma condição de contorno a leste e a oeste. Portanto, os resultados obtidos para o nó 1 e o nó 33 devem ser similares em decorrência da condição de simetria atribuída, o que pode ser comprovado ao se traçar as curvas referentes aos dois transientes, de acordo com o que está mostrado na Figura 4.10, para a condição de contorno de primeiro tipo.

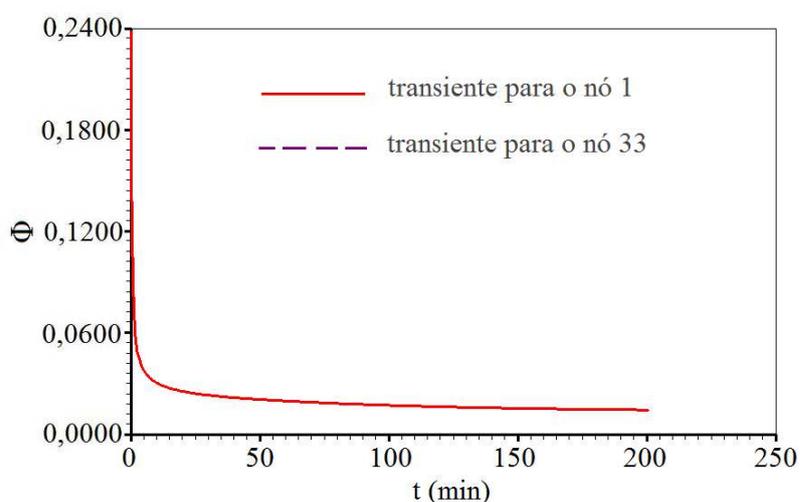


Figura 4.10 – Superposição dos transientes de Φ , numa parede infinita, para os volumes de controle representados pelos nós 1 e 33 para condição de contorno prescrita.

Uma rápida inspeção na Figura 4.10 torna possível verificar que, além da concordância entre os transientes dos nós localizados em posições simétricas no contorno, há uma coerência no resultado esperado, já que pela condição de contorno imposta, em um processo difusivo, a grandeza de interesse nos nós 1 e 33 deve assumir quase instantaneamente o valor de equilíbrio, por estarem muito próximos dos contornos oeste e leste, respectivamente (Silva et al., 2007; Silva et al., 2009b).

Para a condição de contorno convectiva, os resultados do regime transiente calculados para os mesmos nós descritos anteriormente estão apresentados na Figura 4.11.

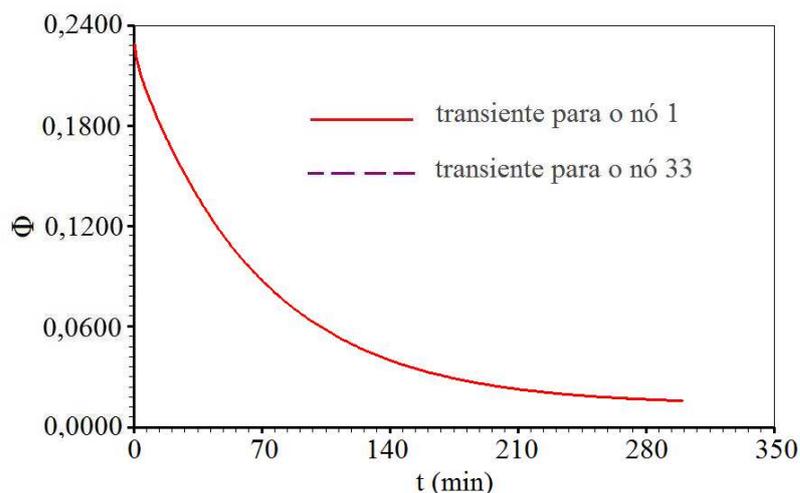


Figura 4.11 – Superposição dos transientes de Φ , numa parede infinita, para os volumes de controle representados pelos nós 1 e 33 para condição de contorno convectiva.

Por meio de uma inspeção da Figura 4.11, observa-se que não há distinção entre as curvas traçadas, comprovando mais uma vez que a condição de simetria imposta foi verificada na solução apresentada. Em adição a isto, verifica-se que o transporte da grandeza nos contornos acontece de forma mais lenta do que na condição de contorno prescrita.

Continuando com os testes de consistência, o gráfico da distribuição espacial para a condição de contorno prescrita num instante arbitrariamente escolhido como $t = 27,25$ min pode ser visto na Figura 4.12.

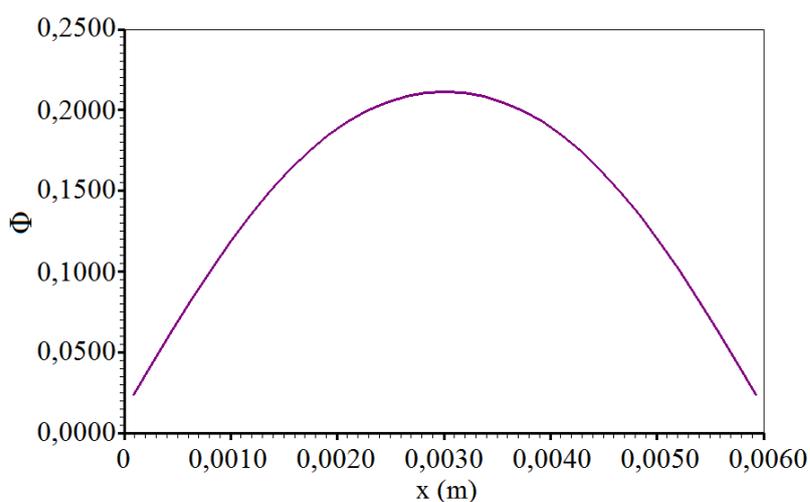


Figura 4.12 – Distribuição espacial de Φ , numa parede infinita, para condição de contorno prescrita em $t = 27,25$ min.

A Figura 4.12 mostra uma curva simétrica, com eixo de simetria em $x = 0,0030\text{m}$, de acordo com o esperado para esta situação física, já que foi estabelecida a mesma condição de contorno nas fronteiras oeste e leste (Silva, 2007).

Por outro lado, são apresentados, na Tabela 4.5, valores da grandeza em alguns pontos nodais da parede infinita para o mesmo instante $t = 27,25$ min e para a mesma condição de contorno (prescrita), onde se verifica que, apesar das pequenas discrepâncias numéricas existentes, há uma concordância de valores nos nós relativos aos volumes de controle localizados em posições simétricas.

Tabela 4.5 – Distribuição espacial de Φ para uma parede infinita em $t = 27,25$ min obtida via código computacional proposto para condição de contorno prescrita.

	nó = 12	nó = 13	nó = 14	nó = 15	nó = 16
x(m)	0,002097879	0,002280303	0,002462727	0,002645152	0,002827576
Φ	0,192667393	0,199449306	0,204681332	0,208392139	0,210607071

Tabela 4.5 - Continuação

nó = 17	nó = 18	nó = 19	nó = 20	nó = 21	nó = 22
0,003010000	0,003192424	0,003374848	0,003557273	0,003739697	0,003922121
0,211343355	0,210607079	0,208392154	0,204681353	0,199449331	0,192667422

Para a condição de contorno convectiva, foram avaliadas situações similares, cujos resultados são apresentados abaixo. A Tabela 4.6 apresenta os valores da distribuição espacial para o mesmo instante de tempo, $t = 27,25$ min, para alguns volumes de controle.

Tabela 4.6 – Distribuição espacial de Φ para uma parede infinita em $t = 27,25$ min obtida via código computacional proposto para condição de contorno convectiva.

	nó = 12	nó = 13	nó = 14	nó = 15	nó = 16
x(m)	0,002097879	0,002280303	0,002462727	0,002645152	0,002827576
Φ	0,214527723	0,218050749	0,220742808	0,222638643	0,223764941

Tabela 4.6 - Continuação

nó = 17	nó = 18	nó = 19	nó = 20	nó = 21	nó = 22
0,003010000	0,003192424	0,003374848	0,003557273	0,003739697	0,003922121
0,224138471	0,223764955	0,222638669	0,220742842	0,218050786	0,214527756

Na Figura 4.13 têm-se o gráfico da distribuição espacial em $t = 27,25$ min.

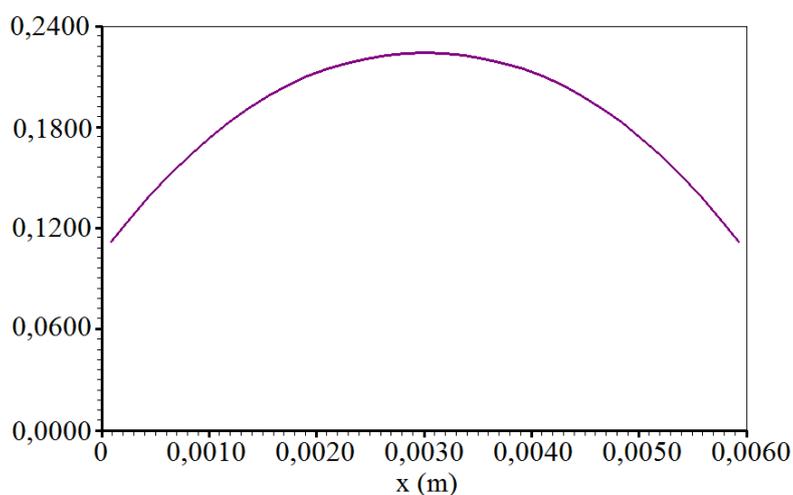


Figura 4.13 – Distribuição espacial de Φ , numa parede infinita, para condição de contorno convectiva em $t = 27,25$ min.

A Figura 4.14 apresenta a superposição das curvas das Figuras 4.12 e 4.13.

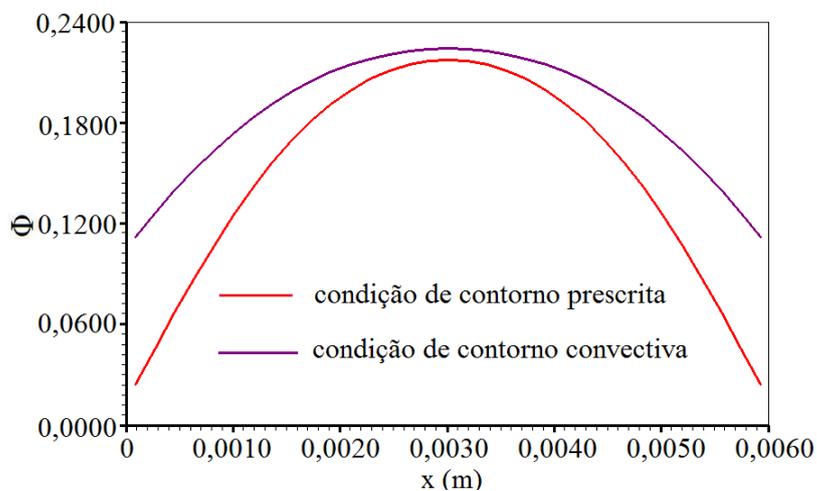


Figura 4.14 – Superposição da distribuição espacial de Φ , numa parede infinita, para condição de contorno prescrita e condição de contorno convectiva em $t = 27,25$ min.

Com uma rápida inspeção nos resultados mostrados na Figura 4.13 e na Tabela 4.6, percebe-se uma variação mais suave na distribuição espacial, para condição de contorno convectiva, quando comparada com os da Figura 4.12 e da Tabela 4.5 para o mesmo instante de tempo, o que pode ser comprovado através da superposição das duas curvas mostradas na Figura 4.14. Este resultado está de acordo com o esperado fisicamente, já que o transporte da grandeza, que ocorre do centro em direção à fronteira, acontece de forma mais lenta para a condição de contorno convectiva do que quando se usa a condição de contorno de equilíbrio.

Os resultados mostrados nas Figuras 4.10 a 4.14, bem como os valores apresentados nas Tabelas 4.5 e 4.6 permitem afirmar que a solução numérica proposta é consistente para a geometria unidimensional, já que a condição de simetria e a coerência com os resultados esperados fisicamente foi verificada em todos os testes realizados.

Com o intuito de validar a solução numérica ora apresentada, os resultados obtidos foram analisados e comparados com aqueles provenientes do software “1D Heat Transfer”, versão 6.1, já referenciado na seção 3.9. Para iniciar a validação, a Tabela 4.7 mostra uma distribuição espacial obtida com as mesmas condições da Tabela 4.6.

Tabela 4.7 – Distribuição espacial de Φ para uma parede infinita em $t = 27,25$ min obtida via software 1D Heat Transfer para condição de contorno convectiva.

	nó = 12	nó = 13	nó = 14	nó = 15	nó = 16	nó = 17
x(m)	0,0020979	0,0022803	0,0024627	0,0026452	0,0028276	0,0030100
Φ	0,2145272	0,2180502	0,2207423	0,2226381	0,2237644	0,2241379

Tabela 4.7 - Continuação

nó = 18	nó = 19	nó = 20	nó = 21	nó = 22
0,00319242	0,0033748	0,0035573	0,0037397	0,0039221
0,2237644	0,2226381	0,2207423	0,2180502	0,2145272

A despeito de pequenos erros numéricos, os valores correspondentes nas duas tabelas podem ser considerados coerentes.

Completando as Tabelas 4.6 e 4.7 com os dados relativos aos nós de 1 a 11 e 23 a 33, os resultados obtidos foram usados para traçar gráficos no mesmo sistema de eixos com o intuito de comparar a distribuição espacial para as situações mostradas nas duas tabelas. O resultado está apresentado na Figura 4.15.

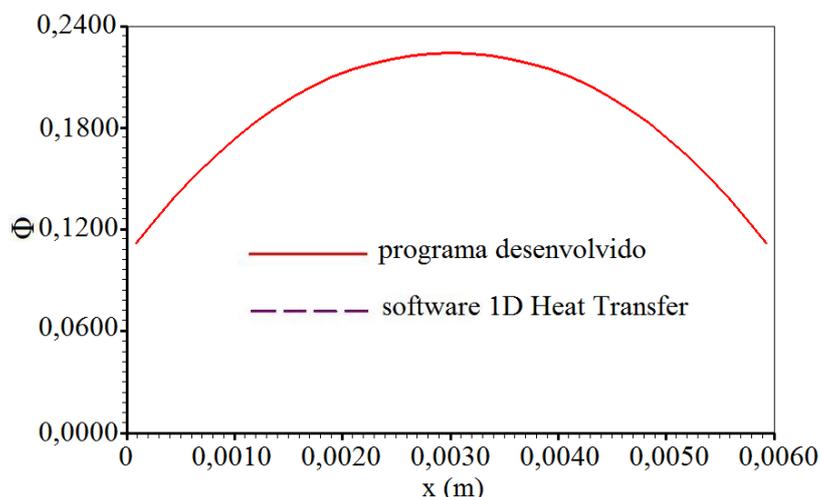


Figura 4.15 – Superposição dos gráficos da distribuição espacial de Φ obtida com o programa computacional desenvolvido e com o software 1D Heat Transfer, para condição de contorno convectiva, numa parede infinita em $t = 27,25$ min.

Uma observação da Figura 4.15 mostra que os resultados obtidos com o código computacional desenvolvido coincidiram com aqueles provenientes do software 1D Heat Transfer, validando assim, a solução numérica proposta para esta situação.

Em seguida, foram avaliados os resultados para a grandeza de interesse em função do tempo no volume de controle representado pelo nó central, delimitado pelas linhas $\xi = 17$ e $\xi = 18$, bem como no volume de controle localizado no contorno oeste da parede infinita, delimitado pelas linhas $\xi = 1$ e $\xi = 2$. Foram empregadas as duas condições de contorno já descritas: equilíbrio e convectiva.

As curvas correspondentes às soluções obtidas foram traçadas num mesmo sistema de eixos e os resultados para o nó 1 são mostrados na Figura 4.16, para a condição de contorno prescrita, onde se observa a coincidência dos resultados.

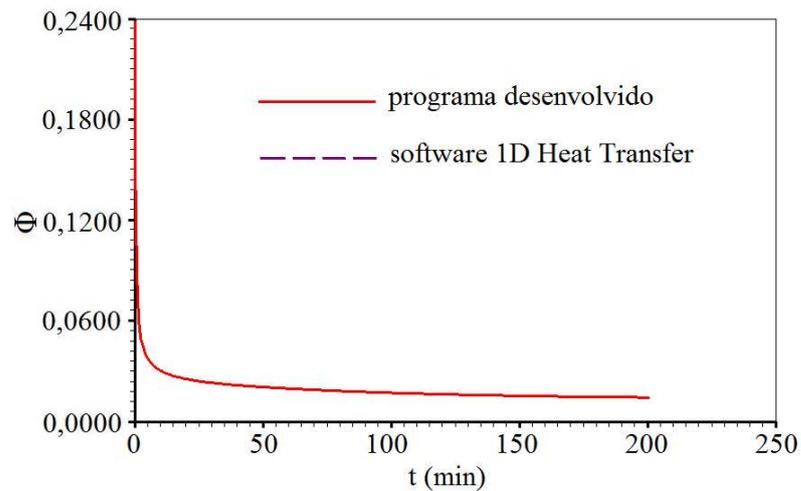


Figura 4.16 – Transiente de Φ , numa parede infinita, para o nó 1 empregando a condição de contorno prescrita: superposição das soluções obtidas com o programa computacional desenvolvido e com o software 1D Heat Transfer.

A excelente concordância observada nas curvas da Figura 4.16 mostra mais um teste bem sucedido na busca de validar o programa desenvolvido para descrever o processo de difusão em uma parede infinita.

Na Figura 4.17, estão mostrados os resultados referentes à condição de contorno convectiva para o primeiro volume de controle, identificado por $\xi = 1$.

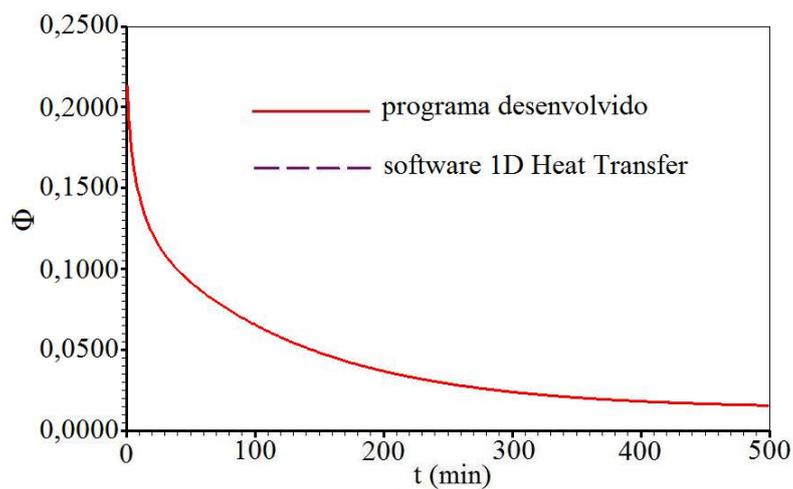


Figura 4.17 – Transiente de Φ , numa parede infinita, para o nó 1, empregando a condição de contorno convectiva: superposição das soluções obtidas com o código computacional desenvolvido e com o software 1D Heat Transfer.

Com pode ser visto que não há distinção entre as curvas da Figura 4.17, mais um teste realizado propiciou um resultado positivo na validação do programa desenvolvido para a situação em que a difusão ocorre em uma parede infinita.

Os gráficos gerados a partir das soluções obtidas com o programa desenvolvido e com o software 1D Heat Transfer empregando a condição de contorno prescrita para o nó central (nó 17) estão mostrados na Figura 4.18.

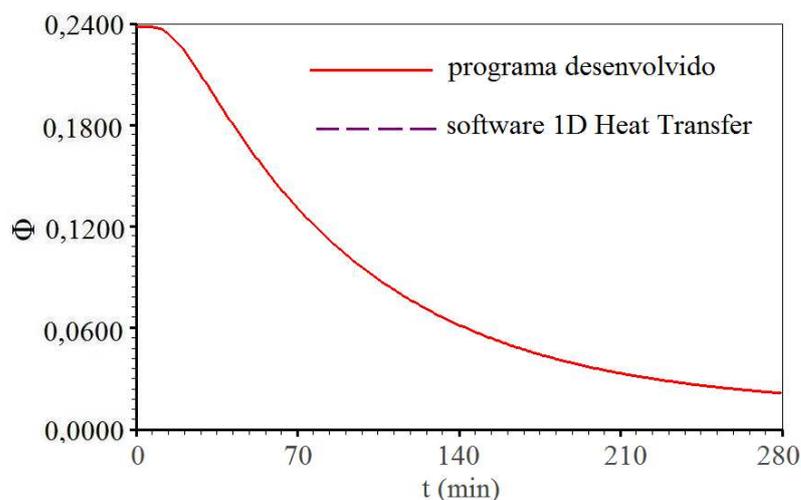


Figura 4.18 - Transiente de Φ , numa parede infinita, para o nó central delimitado pelas linhas $\xi = 17$ e $\xi = 18$, empregando a condição de contorno prescrita: superposição das soluções obtidas com o código computacional proposto e com o software 1D Heat Transfer.

Através dos gráficos apresentados na Figura 4.18 é possível validar numericamente o programa computacional proposto, visto que houve coincidência entre as curvas plotadas. Além disso, é possível observar que para volumes de controle localizados no meio do sólido, o processo inicial do transporte da grandeza ocorre de forma lenta, como pode ser comprovado no intervalo entre 0 e 20 minutos, aproximadamente. Este resultado mostra coerência com a situação física esperada (Silva, 2007; Silva, W. 2009).

Para o mesmo nó, os transientes obtidos através das duas soluções numéricas, com a condição de contorno convectiva, estão mostrados na Figura 4.19.

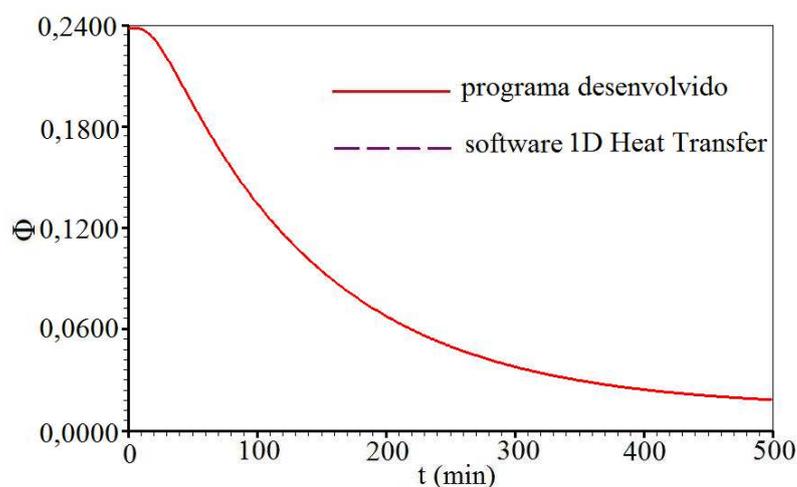


Figura 4.19 – Transiente de Φ , numa parede infinita, para o nó central delimitado pelas linhas $\xi = 17$ e $\xi = 18$, empregando a condição de contorno convectiva: superposição das soluções obtidas com o programa computacional desenvolvido e com o software 1D Heat Transfer.

Para o último resultado apresentado, a curva obtida com o código numérico desenvolvido coincidiu com a solução numérica oriunda do software 1D Heat Transfer, validando numericamente a solução proposta para mais uma situação analisada.

Continuando com a seqüência de testes, foi analisado o regime transiente do valor médio de Φ no domínio apresentado, para as duas condições de contorno estudadas. O resultado para condição de contorno prescrita está mostrado na Figura 4.20.

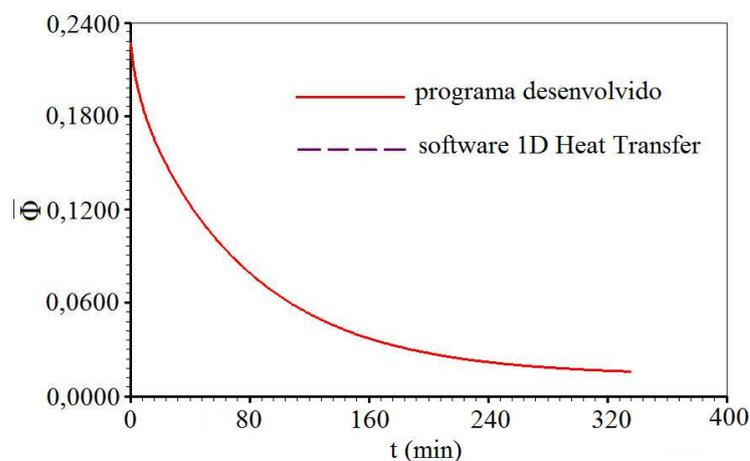


Figura 4.20 - Transiente do valor médio de Φ para uma parede infinita com condição de contorno prescrita: superposição das soluções obtidas com o programa computacional desenvolvido e com o software 1D Heat Transfer.

Para condição de contorno convectiva, as soluções estão apresentadas na Figura 4.21.

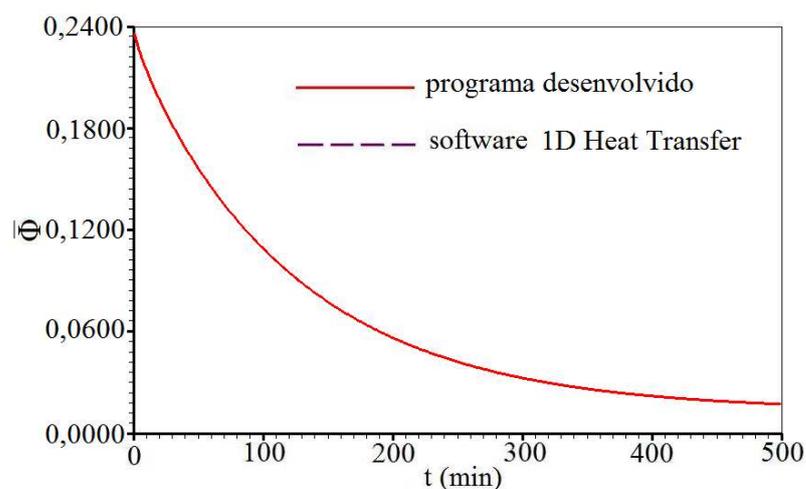


Figura 4.21 – Transiente do valor médio de Φ , numa parede infinita com condição de contorno convectiva: superposição das soluções obtidas com o programa computacional desenvolvido e com o software 1D Heat Transfer.

Ao se analisar os dados das Tabelas 4.6 e 4.7, bem como os gráficos apresentados nas Figuras 4.15 a 4.21, verifica-se que, apesar de pequenos erros numéricos, há um excelente acordo entre os resultados obtidos com a solução numérica proposta e aqueles obtidos com o software 1D Heat Transfer, o que confirma a validade da solução numérica proposta para a geometria unidimensional.

Mediante a comprovação da consistência e da validação numérica em todos os testes realizados nesta seção, os quais foram compatíveis com previsões teóricas e com outras soluções numéricas disponíveis na literatura é possível afirmar que o código computacional desenvolvido é válido para descrever o processo de difusão em uma parede infinita utilizando as condições de contorno do primeiro e terceiro tipos.

4.2.2 Malha tridimensional: valor médio e distribuição espacial em um paralelepípedo

Antes de validar o código computacional desenvolvido para um sólido na forma de paralelepípedo, foram realizados testes de consistência para uma geometria cúbica, explorando a condição de simetria inerente a esta forma geométrica.

4.2.2.1 Testes de consistência através da análise de Φ para uma geometria cúbica

A situação simulada para avaliar a consistência do programa desenvolvido para a difusão em uma geometria cúbica está esquematizada na Figura 4.22, na qual se observa o domínio físico, destacando os eixos cartesianos, x , y e z e o domínio transformado, com os eixos em coordenadas generalizadas, ξ , η e γ . Verifica-se neste caso, que os eixos das coordenadas generalizadas ξ , η e γ coincidem, respectivamente, com os eixos das coordenadas cartesianas x , y e z . A discretização espacial envolveu 24 linhas ξ , 24 linhas η e 24 linhas γ , enquanto a do tempo utilizou 2000 passos para um intervalo $\Delta t = 0,2575$ min. A malha e o intervalo de tempos usados aqui são compatíveis com os resultados obtidos por Nascimento (2002), que estudou um problema semelhante em coordenadas cartesianas.

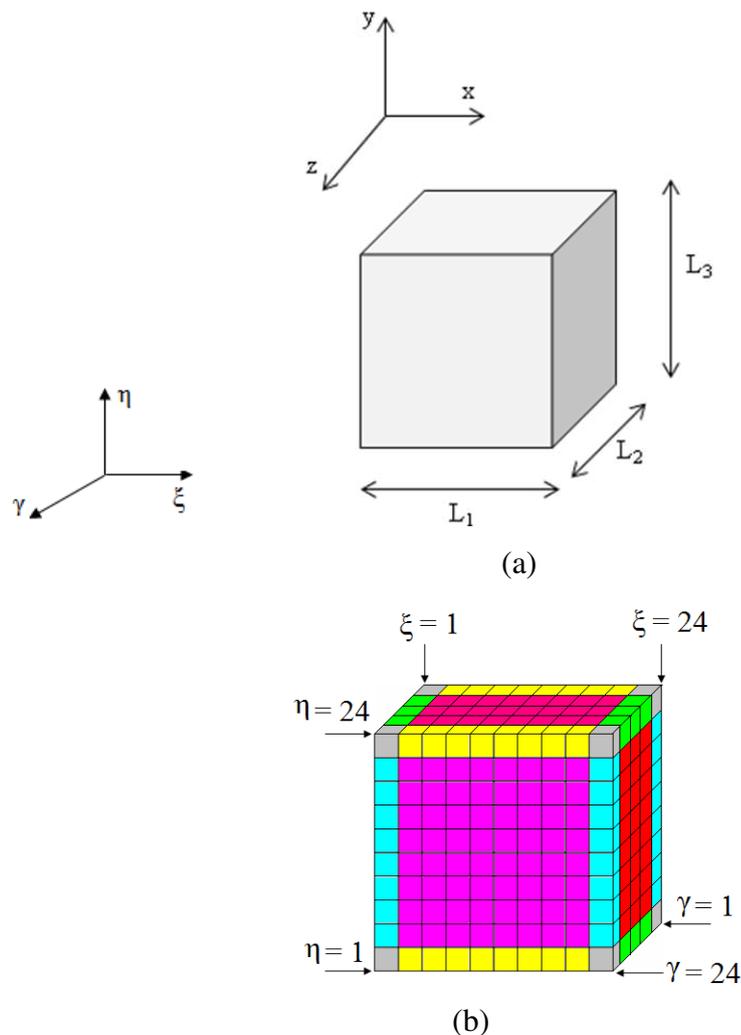


Figura 4.22 – Geometria cúbica utilizada para testar a consistência da solução numérica proposta: (a) domínio físico; (b) domínio transformado.

Para a realização destes testes, foi pressuposto uma distribuição inicial uniforme para a grandeza com valor de 0,2381 e um valor constante e igual à unidade para o parâmetro λ . Admitiu-se, ainda, que o volume do sólido e os parâmetros termofísicos permanecessem constantes durante o processo, que a grandeza no equilíbrio assumisse o valor de 0,0133 e que a condição de contorno fosse a de Cauchy.

Os parâmetros físicos e as dimensões do sólido usado para simular esta situação são apresentados na Tabela 4.8.

Tabela 4.8 – Parâmetros físicos usados na resolução numérica da equação de difusão para uma geometria cúbica.

Geometria	Γ^0 ($\text{m}^2 \text{min}^{-1}$)	h (m min^{-1})	L_1 (m)	L_2 (m)	L_3 (m)
Cubo	$4,9531 \times 10^{-8}$	$1,6456 \times 10^{-5}$	$6,02 \times 10^{-3}$	$6,02 \times 10^{-3}$	$6,02 \times 10^{-3}$

No intuito de explorar a condição de simetria inerente à situação física apresentada, foi imposta a mesma condição de contorno para todas as faces do sólido, sendo analisados os transientes de volumes de controle escolhidos nas seis faces, de tal modo que o resultado esperado para Φ fosse o mesmo. Convém salientar que cada nó foi identificado por (ξ, η, γ) , o que corresponde ao volume de controle delimitado pelos planos $\xi, \xi+1, \eta, \eta+1, \gamma$ e $\gamma+1$.

Para se obter os transientes referentes aos volumes de controle localizados no centro de cada face da geometria cúbica, foi feita a identificação dos pontos nodais desses volumes de acordo com o que está apresentado na Tabela 4.9.

Tabela 4.9 – Identificação dos nós localizados no centro de cada face do cubo.

Face leste	nó (23, 12, 12)
Face oeste	nó (1, 12, 12)
Face norte	nó (12, 23, 12)
Face sul	nó (12, 1, 12)
Face frente	nó (12, 12, 23)
Face atrás	nó (12, 12, 1)

Os resultados para os transientes desses nós são apresentadas na Figura 4.23.

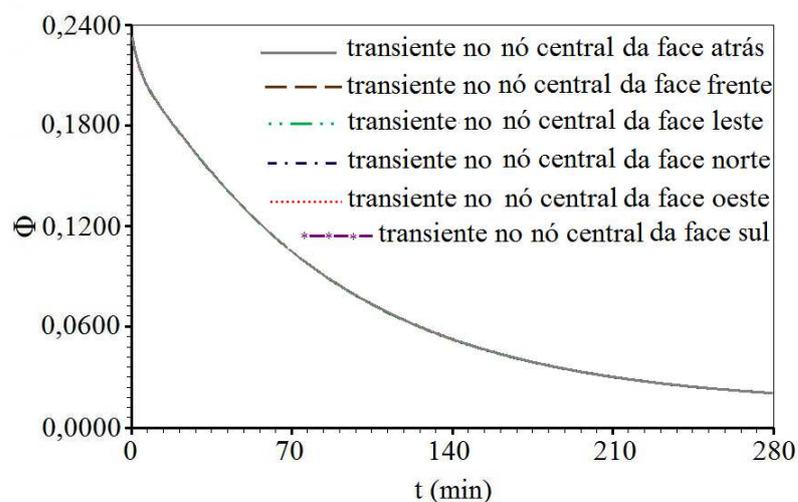


Figura 4.23 – Transientes de Φ nos pontos nodais dos volumes de controle localizados no centro de cada face de uma geometria cúbica para a condição de contorno convectiva.

A análise da distribuição espacial de Φ no plano xy , em $z = L_3/2$, foi feita para o instante $t = 27,25$ min, em alguns volumes de controle situados em posições simétricas, para os quais, espera-se que os valores da grandeza sejam similares. No domínio transformado, esses volumes de controle estão delimitados pelos planos correspondentes a $\gamma = 12$ e $\gamma = 13$.

Tabela 4.10 – Distribuição espacial de Φ para um cubo em $t = 27,25$ min obtida via código computacional desenvolvido, impondo-se condição de contorno convectiva.

Nó	$\xi = 9$	$\xi = 10$	$\xi = 11$	$\xi = 12$	$\xi = 13$	$\xi = 14$	$\xi = 15$
$\eta = 16$	0,212751	0,214526	0,215557	0,215895	0,215557	0,214526	0,212751
$\eta = 15$	0,215383	0,217181	0,218226	0,218569	0,218226	0,217181	0,215383
$\eta = 14$	0,217181	0,218996	0,220050	0,220395	0,220050	0,218996	0,217181
$\eta = 13$	0,218226	0,220050	0,221110	0,221458	0,221110	0,220050	0,218226
$\eta = 12$	0,218569	0,220396	0,221458	0,221806	0,221458	0,220396	0,218569
$\eta = 11$	0,218226	0,220050	0,221110	0,221458	0,221110	0,220050	0,218226
$\eta = 10$	0,217181	0,218996	0,220050	0,220396	0,220050	0,218996	0,217181
$\eta = 9$	0,215383	0,217181	0,218226	0,218569	0,218226	0,217181	0,215383
$\eta = 8$	0,212751	0,214526	0,215557	0,215895	0,215557	0,214526	0,212751

Na Figura 4.23 observa-se uma ótima concordância entre as seis curvas referentes aos transientes dos pontos nodais localizados no centro de cada face do cubo, enquanto que na Tabela 4.10, verifica-se a coerência de resultados para volumes de controle situados em posições simétricas.

Esses resultados comprovam a consistência da solução numérica proposta, visto que a condição de simetria intrínseca à situação apresentada foi verificada nos volumes de controle que tiveram seus transientes analisados.

Quanto aos volumes de controle localizados nos vértices do cubo, cada um deles possui três faces em contato com o meio. Por isso, para facilitar a sua referência no presente trabalho, os volumes de controle que tiveram seus transientes analisados foram identificados de acordo com as faces que estão em contato com o meio, conforme pode ser visto em destaque na Figura 4.24.

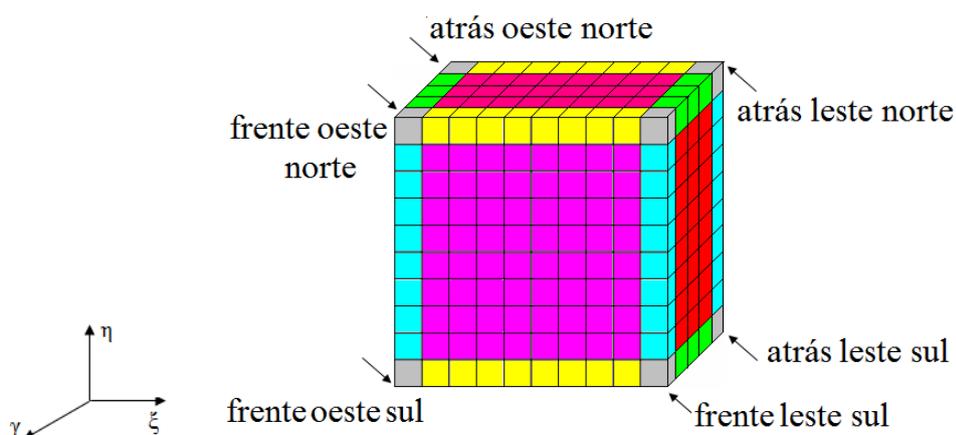


Figura 4.24 – Geometria cúbica discretizada: destaque para os volumes de controle localizados nos vértices do cubo.

A identificação de cada ponto nodal referente a cada volume de controle que teve seu transiente analisado está apresentada na Tabela 4.11, lembrando que a malha possui 24 linhas em cada eixo de coordenada generalizada.

Tabela 4.11 – Identificação dos pontos nodais localizados nos vértices de uma geometria cúbica.

oeste norte atrás	nó (1, 23, 1)
leste norte atrás	nó (23, 23, 1)
leste sul atrás	nó (23, 1, 1)
leste sul frente	nó (23, 1, 23)
oeste sul frente	nó (1, 1, 23)
oeste norte frente	nó (1, 23, 23)

Os resultados para os transientes desses pontos nodais são mostrados na Figura 4.25, na qual se observa uma total coincidência entre as curvas, confirmando que a condição de simetria própria da situação apresentada foi satisfeita.

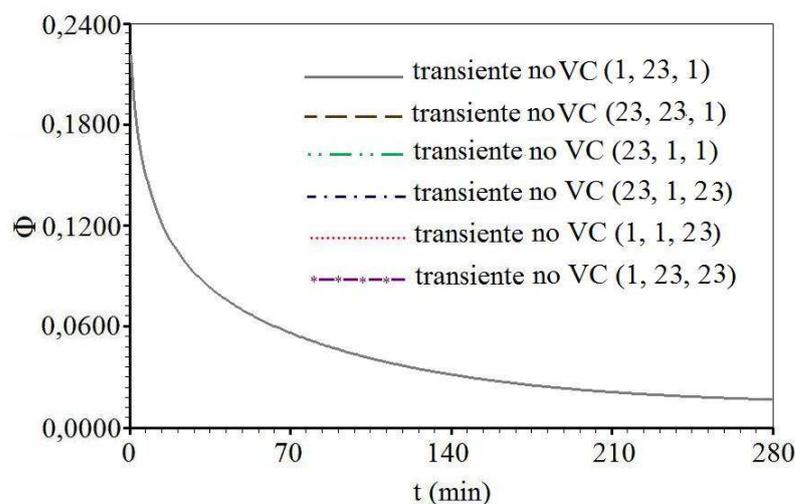


Figura 4.25 – Geometria cúbica: transientes de Φ nos pontos nodais dos volumes de controle localizados nos vértices do cubo destacados na Figura 4.24.

Ao se analisar os resultados da Figura 4.25, verifica-se que a queda no valor de Φ é bem mais acentuada, nos instante iniciais, do que aquela observada na Figura 4.23. Este resultado está em consonância com o esperado, pois o processo de difusão deve ocorrer mais rápido nos volumes de controle dos vértices, já que eles possuem três faces em contato com o meio, enquanto os volumes de controle localizados nos centros de cada face do cubo possuem

apenas uma face em contato com o meio, tornando, assim, a difusão um processo mais lento nesses volumes de controle (Nascimento, 2002).

Os resultados satisfatórios apresentados para os testes realizados nesta seção evidenciam a coerência da solução numérica proposta, ratificando, portanto, a consistência do programa computacional desenvolvido para a geometria cúbica, já que a condição de simetria foi verificada em todas as análises realizadas.

4.2.2.2 Validação do código computacional desenvolvido para um paralelepípedo

Em se tratando da validação do código computacional desenvolvido no presente trabalho para malhas estruturadas ortogonais tridimensionais, a geometria utilizada foi a de um paralelepípedo, cujo esquema está apresentado na Figura 4.26.

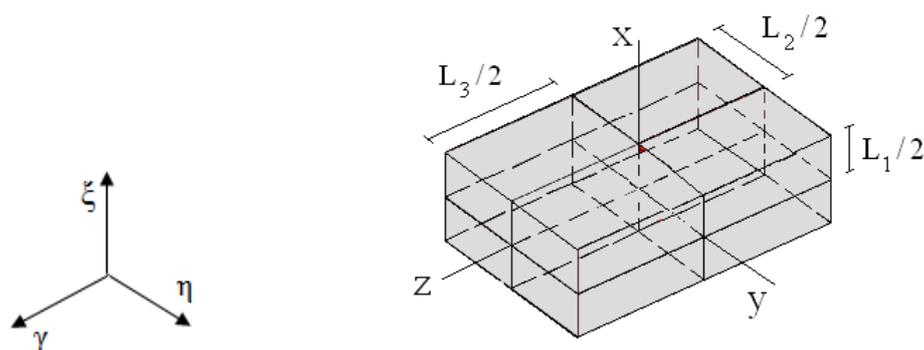


Figura 4.26 – Paralelepípedo utilizado para validação do código computacional desenvolvido.

Ao se analisar a Figura 4.26, que mostra o domínio físico estudado, observa-se que o eixo z está direcionado na maior dimensão do sólido. Em adição a isto, deve ser destacado que a distribuição espacial será analisada no plano xy (plano central).

Estes testes foram realizados pressupondo uma distribuição inicial uniforme para a grandeza com valor de 0,2381 e um valor constante e igual à unidade para o parâmetro λ . Admitiu-se ainda, que o volume do sólido e os parâmetros termofísicos permanecessem constantes durante o processo, que a grandeza no equilíbrio assumisse o valor de 0,0133 e que

a condição de contorno fosse a de Cauchy. Os outros parâmetros, bem como as dimensões do sólido são apresentados na Tabela 4.12.

Tabela 4.12 – Parâmetros físicos usados na resolução numérica da equação de difusão para um paralelepípedo.

Geometria	Γ^Φ (m ² min ⁻¹)	h (m min ⁻¹)	L ₁ (m)	L ₂ (m)	L ₃ (m)
Paralelepípedo	4,6292x10 ⁻⁸	4,6907x10 ⁻⁵	6,02x10 ⁻³	46,16x10 ⁻³	86,17x10 ⁻³

No domínio computacional, a malha escolhida para análise foi dividida em 33 linhas ξ , 33 linhas η e 32 linhas γ , cujos eixos coincidiram respectivamente com os das coordenadas cartesianas x, y e z, como mostrado na Figura 4.26. A condição de contorno empregada foi a convectiva, enquanto a discretização no tempo envolveu um intervalo de 0,2725 minutos e 2000 passos. Mais uma vez, o critério para escolha destes parâmetros teve como base os resultados de Nascimento (2002) e o estudo apresentado na Seção 4.1.

Inicialmente, para um instante de tempo 54,50 min, foi analisada a distribuição espacial de Φ no plano central da Figura 4.26, que no domínio computacional é representado pela região delimitada pelos planos $\gamma = 16$ e $\gamma = 17$, impondo-se a condição de contorno convectiva. Valores de Φ para alguns volumes de controle localizados na referida região, obtidos pelo código computacional desenvolvido, são mostrados na Tabela 4.13.

Tabela 4.13 – Distribuição espacial no plano central da Figura 4.26 obtida com o código computacional desenvolvido para o instante t = 54,50 min.

Nó	$\xi = 14$	$\xi = 15$	$\xi = 16$	$\xi = 17$	$\xi = 18$	$\xi = 19$
$\eta = 32$	0,109062	0,110084	0,110595	0,110595	0,110084	0,109062
$\eta = 31$	0,159472	0,161031	0,161812	0,161812	0,161031	0,159472
$\eta = 30$	0,181822	0,183620	0,184520	0,184520	0,183620	0,181822
$\eta = 3$	0,181822	0,183620	0,184520	0,184520	0,183620	0,181822
$\eta = 2$	0,159472	0,161031	0,161812	0,161812	0,161031	0,159472
$\eta = 1$	0,109063	0,110084	0,110595	0,110595	0,110084	0,109062

Através de uma inspeção da Tabela 4.13, verifica-se a existência de valores similares para volumes de controle posicionados simetricamente na região central do paralelepípedo, o que era esperado, ratificando, portanto, a consistência da solução proposta, já que a condição de simetria atribuída foi mais uma vez verificada.

Para comparação, os resultados obtidos com o software Diffusion RE, desenvolvido por Silva (2008c), nas mesmas condições e para os mesmos volumes de controle, são apresentados na Tabela 4.14.

Tabela 4.14 – Distribuição espacial no plano central da Figura 4.26 obtida com software Diffusion RE para o instante $t = 54,50$ min.

posição nodal	$\xi = 14$	$\xi = 15$	$\xi = 16$	$\xi = 17$	$\xi = 18$	$\xi = 19$
$\eta = 32$	0,109062	0,110083	0,110594	0,110594	0,110083	0,109062
$\eta = 31$	0,159471	0,161030	0,161810	0,161810	0,161030	0,159471
$\eta = 30$	0,181821	0,183619	0,184518	0,184518	0,183619	0,181821
$\eta = 3$	0,181821	0,183619	0,184518	0,184518	0,183619	0,181821
$\eta = 2$	0,159471	0,161030	0,161810	0,161810	0,161030	0,159471
$\eta = 1$	0,109062	0,110083	0,110594	0,110594	0,110083	0,109062

Os resultados apresentados nas Tabelas 4.13 e 4.14 comprovam simultaneamente a coerência e a consistência da solução numérica proposta, já que houve concordância entre os valores para volumes de controle correspondentes nas duas tabelas, assim como foi verificada a condição de simetria inerente ao problema simulado.

Explorando ainda a condição de simetria, foi testada a consistência do código computacional desenvolvido para o paralelepípedo, comparando-se o regime transiente de Φ em pontos nodais, cujos volumes de controle correspondentes estão localizados no centro de cada face do sólido e, por isso, os resultados esperados devem ser equivalentes para faces opostas. Os pontos nodais que tiveram seus transientes analisados e comparados entre si estão identificados na Tabela 4.15.

Tabela 4.15 – Identificação dos nós nas faces do paralelepípedo apresentado na Figura 4.26.

Face leste	nó (32, 16, 16)
Face oeste	nó (1, 16, 16)
Face norte	nó (16, 32, 16)
Face sul	nó (16, 1, 16)
Face frente	nó (16, 16, 31)
Face atrás	nó (16, 16, 1)

A Figura 4.27 mostra as superposições dos transientes de Φ para os pontos nodais das faces opostas leste e oeste identificados na Tabela 4.15.

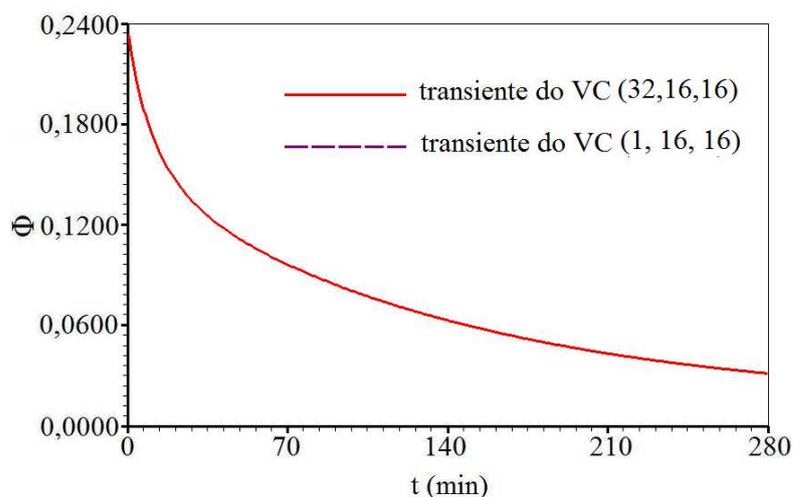


Figura 4.27 – Transientes de Φ para volumes de controle localizados no centro das faces oeste e leste do paralelepípedo da Figura 4.26.

Por sua vez, os resultados para os transientes dos pontos nodais localizados no centro nas faces opostas norte e sul, bem como para aqueles localizados no centro das faces opostas atrás e frente do paralelepípedo apresentado na Figura 4.26, estão mostrados nas Figuras 4.28 e 4.29, respectivamente. Nestas figuras, observa-se um bom acordo em todos os casos analisados.

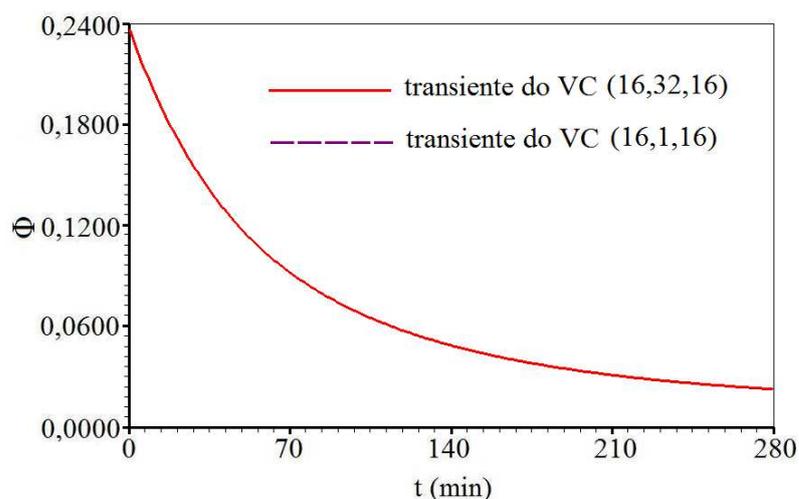


Figura 4.28 – Transientes de Φ para volumes de controle localizados no centro das faces norte e sul do paralelepípedo da Figura 4.26.

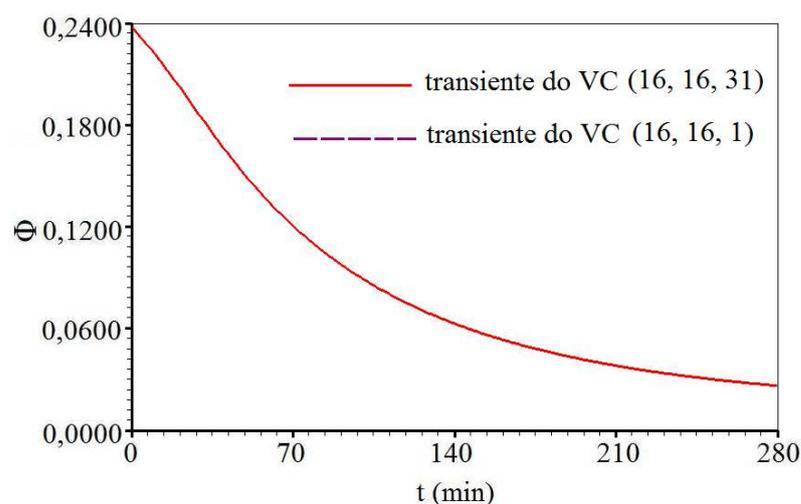


Figura 4.29 – Transientes de Φ para volumes de controle localizados no centro das faces atrás e frente do paralelepípedo da Figura 4.26.

As Figuras 4.27 a 4.29, em consonância com o que já havia sido ressaltado nas Tabelas 4.13 e 4.14, evidenciam a consistência do código computacional desenvolvido para mais uma geometria estudada: o paralelepípedo, já que a condição de simetria intrínseca à situação apresentada foi verificada em todos os testes realizados.

Do ponto de vista do fenômeno físico, a coerência do código computacional também pode ser verificada através dos resultados acima, visto que para os instantes iniciais, a queda

no valor de Φ para as faces oeste e leste, mostrada na Figura 4.27 é mais acentuada do que aquela observada nas outras faces (Figuras 4.28 e 4.29). Este resultado é coerente com a situação física esperada, pois a dimensão no eixo x é bem menor que as outras, fazendo com que o processo difusivo seja mais rápido nessa direção, intermediária na direção y e mais lenta na direção z, que é a dimensão maior do paralelepípedo (Nascimento, 2002).

Voltando aos testes de validação, dois volumes de controle foram escolhidos, um localizado no interior do sólido correspondente ao nó ($\xi = 16, \eta = 16, \gamma = 16$) e outro, cuja localização está na intersecção da fronteira sul com a fronteira oeste, possuindo a seguinte identificação ($\xi = 1, \eta = 1, \gamma = 16$). O regime transiente foi analisado, e os resultados obtidos pelo programa desenvolvido nesta pesquisa foram comparados com aqueles obtidos pelo Diffusion RE.

A superposição dos transientes para o ponto nodal localizado no interior do sólido está mostrada na Figura 4.30.

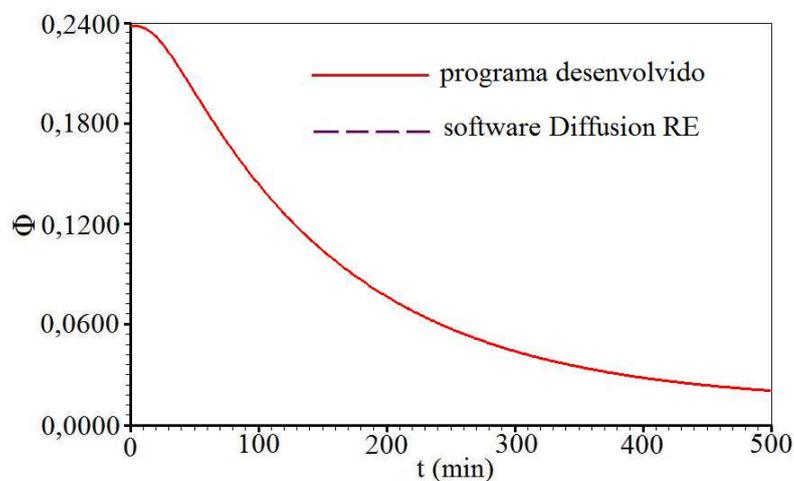


Figura 4.30 – Superposição dos transientes de Φ obtidos pelo programa desenvolvido e pelo software Diffusion RE em um paralelepípedo, para um volume de controle identificado por ($\xi = 16, \eta = 16, \gamma = 16$).

Por sua vez, os transientes para o volume de controle localizado na intersecção das duas fronteiras (oeste e sul) estão apresentados na Figura 4.31.

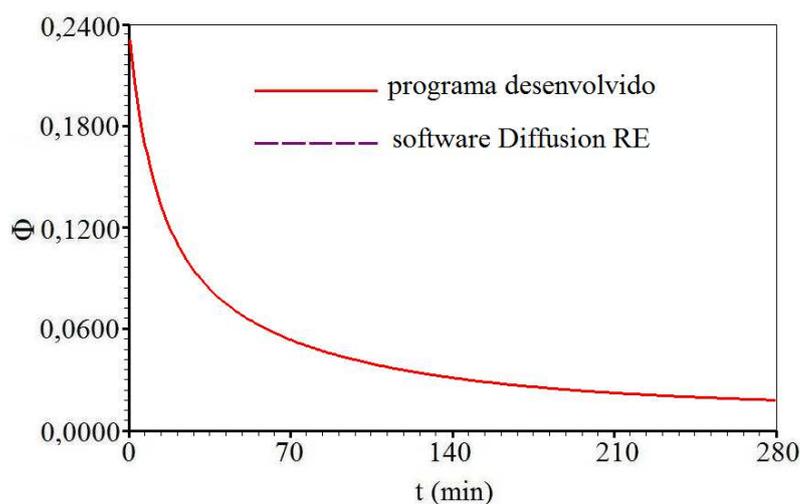


Figura 4.31 – Superposição dos transientes de Φ obtidos pelo programa desenvolvido e pelo software Diffusion RE, em um paralelepípedo, para um volume de controle identificado por $(\xi = 1, \eta = 1, \gamma = 16)$.

As Figuras 4.30 e 4.31 validam numericamente a solução proposta, pois os resultados obtidos possuem uma boa concordância com aqueles obtidos pelo Diffusion RE. Em adição a isto, os resultados também mostram coerência com o fenômeno físico esperado para o transporte da grandeza nas situações analisadas. Para o ponto nodal localizado no meio do sólido, a queda no valor de Φ é bem mais lenta nos instantes iniciais, já que o processo difusivo demora mais a acontecer no centro do sólido, o que é verificado na Figura 4.30. Por outro lado, nos volumes de fronteira, a queda é mais acentuada, já que nesses locais, o processo de difusão é mais rápido devido ao contato direto desses volumes com o meio ambiente, o que pode ser verificado na Figura 4.31 (Lima, 1999).

Foi analisado também o valor médio de Φ em função do tempo para os volumes de controle localizados na região central da Figura 4.26. Os pontos nodais que identificam esses volumes de controle estão localizados no plano central, que corresponde a $z = 43,085 \times 10^{-3}$ m, no domínio físico. As delimitações desse plano no domínio computacional são os planos $\gamma = 16$ e $\gamma = 17$. O resultado foi comparado com aquele obtido pelo Diffusion RE e a superposição dos gráficos provenientes dos dois resultados pode ser observada na Figura 4.32, a qual mostra a coincidência das curvas obtidas. Isto confirma o fato de que o último teste realizado também foi bem sucedido, sendo mais um indicador positivo no presente processo de validação do código computacional desenvolvido.

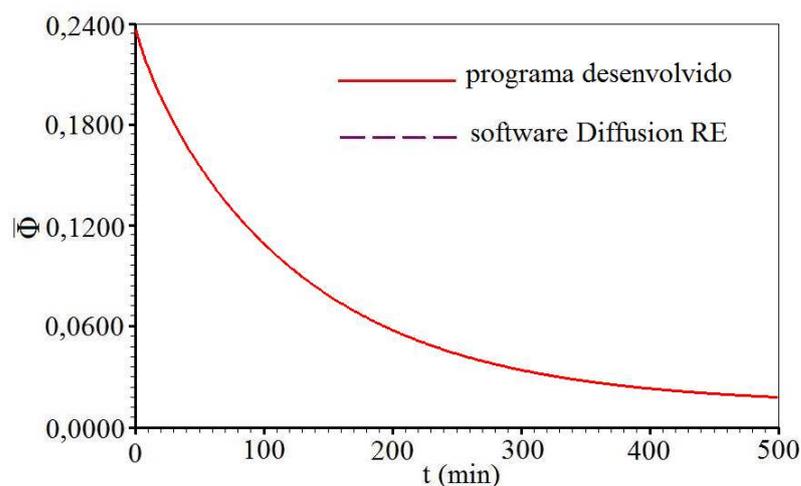


Figura 4.32 – Transiente do valor médio de Φ para o plano central do paralelepípedo, delimitado pelos planos $\gamma = 16$ e $\gamma = 17$: superposição das soluções obtidas com o programa computacional desenvolvido e com o Diffusion RE.

Naturalmente que o valor da grandeza não deve depender de como o sólido está disposto no espaço. No entanto, deve-se salientar que os termos da equação de difusão discretizada envolvem relações matemáticas entre as coordenadas, que sofrem modificações nos seus cálculos, se há uma inversão dos eixos que definem a posição do sólido. Assim, com o intuito de validar as conexões entre os três eixos para qualquer posição que o sólido possa se encontrar no espaço, o paralelepípedo foi girado para uma nova posição, com o eixo y direcionado na maior dimensão, segundo o esquema mostrado na Figura 4.33.

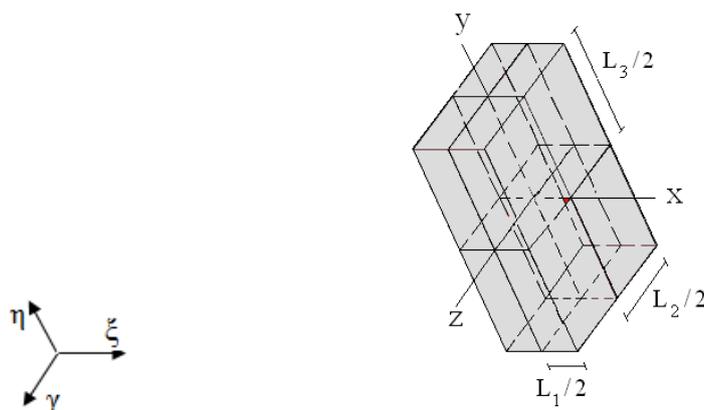


Figura 4.33 – Paralelepípedo com eixos trocados para testar as conexões dos eixos ξ η γ do código computacional desenvolvido.

Na nova situação física, a distribuição espacial foi analisada no plano central xz ou $\xi\gamma$ do paralelepípedo apresentado na Figura 4.33. O domínio computacional envolveu uma malha com 33 linhas ξ , 32 linhas η e 33 linhas γ , enquanto que a discretização no tempo, a condição de contorno, as características físicas e os parâmetros termofísicos foram os mesmos utilizados no teste anterior. Foram repetidas algumas das análises descritas anteriormente.

A Tabela 4.16 mostra, para um instante de tempo $t = 54,50$ minutos, valores de Φ obtidos com o código numérico desenvolvido, para alguns volumes de controle situados na região central do paralelepípedo (Figura 4.33), delimitada pelos planos $\eta = 16$ e $\eta = 17$.

Tabela 4.16 – Distribuição espacial de Φ para o plano central da Figura 4.33 obtido com o código computacional desenvolvido para o instante $t = 54,50$ min.

Posição Nodal	$\xi = 14$	$\xi = 15$	$\xi = 16$	$\xi = 17$	$\xi = 18$	$\xi = 19$
$\gamma = 32$	0,109062	0,110084	0,110595	0,110595	0,110084	0,109062
$\gamma = 31$	0,159472	0,161031	0,161812	0,161812	0,161031	0,159472
$\gamma = 30$	0,181822	0,183620	0,184520	0,184520	0,183620	0,181822
$\gamma = 3$	0,181822	0,183620	0,184520	0,184520	0,183620	0,181822
$\gamma = 2$	0,159472	0,161031	0,161812	0,161812	0,161031	0,159472
$\gamma = 1$	0,109063	0,110084	0,110595	0,110595	0,110084	0,109062

Para avaliar a consistência e a coerência do programa desenvolvido, os dados da Tabela 4.16 devem ser comparados com os dados correspondentes das Tabelas 4.13 e 4.14, lembrando que houve uma inversão entre os eixos η (y) e γ (z). Ao se fazer a comparação, percebe-se uma excelente concordância entre os valores correspondentes das três tabelas,

Foram escolhidos dois pontos nodais para fazer uma avaliação da evolução temporal de Φ e assim consolidar a validade do código computacional desenvolvido. O primeiro ponto nodal que teve o seu transiente analisado e comparado com o transiente obtido pelo Diffusion RE corresponde ao volume de controle identificado por ($\xi = 16$, $\eta = 16$, $\gamma = 16$) e o resultado aparece na Figura 4.34.

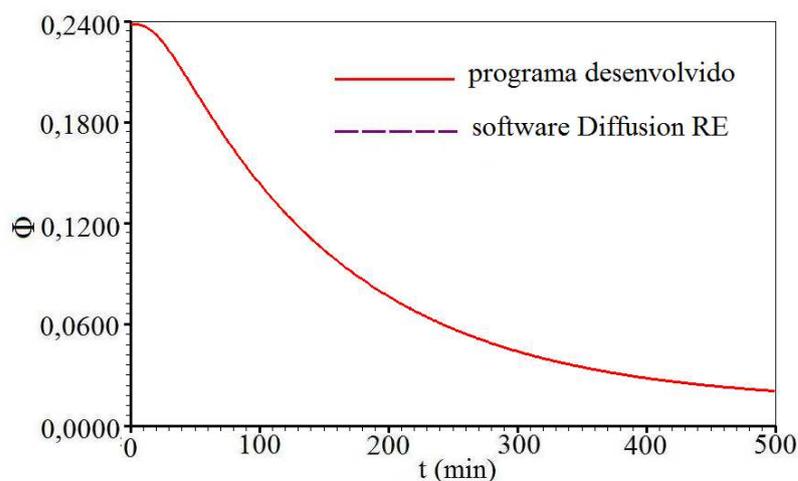


Figura 4.34 – Transiente de Φ em um volume de controle do paralelepípedo da Figura 4.33, identificado por $\xi = 16$, $\eta = 16$, $\gamma = 16$, obtido com as duas soluções numéricas.

O segundo ponto nodal avaliado corresponde ao volume de controle identificado por ($\xi = 32$, $\eta = 16$, $\gamma = 16$), cujo transiente obtido com as duas soluções numéricas está apresentado na Figura 4.35.

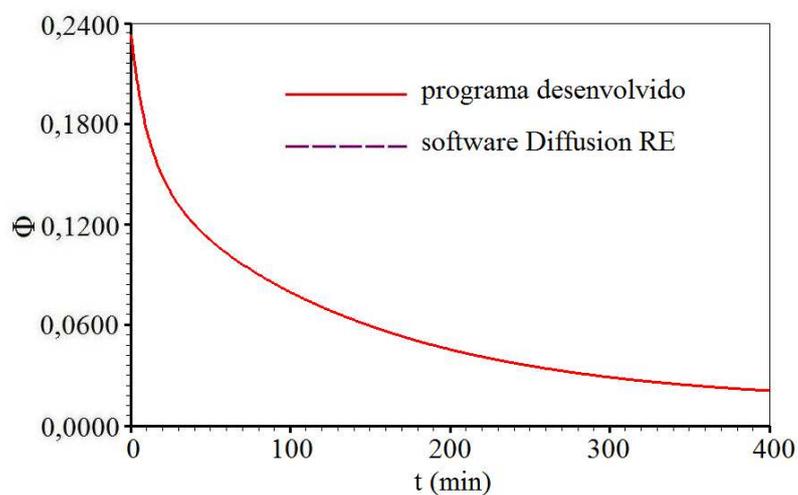


Figura 4.35 – Transiente de Φ em um volume de controle do paralelepípedo da Figura 4.33 identificado por $\xi = 32$, $\eta = 16$, $\gamma = 16$ obtido com as duas soluções numéricas.

Nas Figuras 4.34 e 4.35, verifica-se uma boa concordância entre as curvas, validando, portanto, mais uma vez, a solução numérica proposta.

O regime transiente para o valor médio da grandeza no plano central da Figura 4.33 também foi analisado. O resultado está mostrado na Figura 4.36.

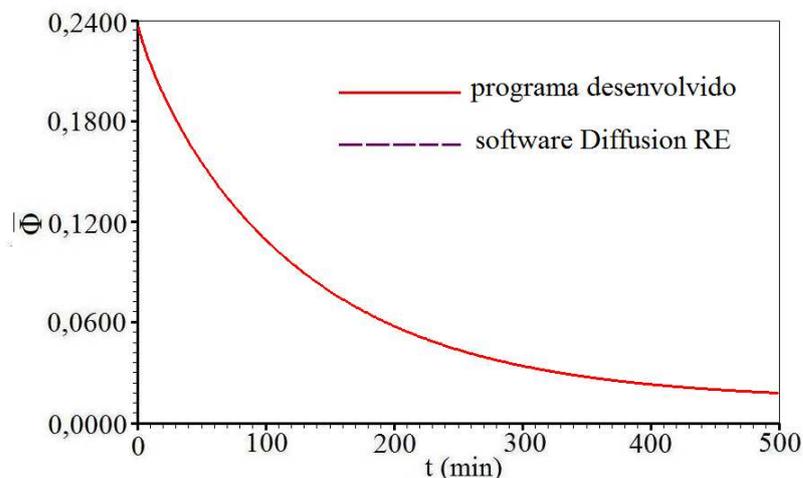


Figura 4.36 – Transiente do valor médio de Φ para o plano central do paralelepípedo apresentado na Figura 4.33: superposição das duas soluções.

Uma rápida inspeção das curvas apresentadas nas Figuras 4.34 a 4.36 permite constatar a validade do código computacional desenvolvido para a nova posição do paralelepípedo. Logo, é possível afirmar que todos os termos da equação de difusão que relacionam os eixos ortogonais estão equacionados de maneira correta.

Ressaltando que em todos os casos estudados nesta seção, os resultados apresentados foram positivos, é possível fazer a observação de que as aplicações do código computacional desenvolvido já são bastante amplas. Portanto, neste ponto, pode-se evidenciar que a solução numérica proposta é válida para resolver a equação de difusão em coordenadas generalizadas para malhas estruturadas ortogonais tridimensionais, para qualquer posição do sólido, desde que as condições de contorno utilizadas sejam de primeiro ou terceiro tipos.

4.2.3 Malhas estruturadas tridimensionais e não-ortogonais

Como todos os testes realizados para geometrias regulares tiveram resultados positivos, validando, assim, o código numérico proposto para resolver a equação de difusão

para malhas estruturadas ortogonais, foram iniciados os testes de validação do código desenvolvido para malhas estruturadas tridimensionais e não-ortogonais. Lembrando que o código numérico desenvolvido não propõe a geração de malhas, foram escolhidas algumas geometrias, cujas malhas tridimensionais pudessem ser obtidas a partir da extrusão de malhas bidimensionais. Essas malhas bidimensionais foram geradas pelo software 2D Grid Generation, V 5.1, desenvolvido por Silva, 2008a e o arquivo de extensão txt obtido foi utilizado como dados de entrada para o código computacional desenvolvido.

4.2.3.1 Sólido gerado a partir da extrusão de um losango

A primeira figura geométrica escolhida para o estudo de malhas não-ortogonais foi a de um sólido obtido a partir da extrusão, ao longo do eixo z, de um losango no plano xy com a diagonal maior, d_2 medindo o dobro da diagonal menor, d_1 , conforme ilustrado na Figura 4.37.

A Tabela 4.17 mostra as constantes do processo atribuídos ao sólido, bem como suas dimensões e condições iniciais e de contorno usadas no transporte da grandeza.

Tabela 4.17 – Parâmetros físicos usados para resolver a equação de difusão em uma malha não-ortogonal para condição de contorno convectiva.

Φ_i	Φ_{eq}	Γ^Φ ($m^2 \text{ min}^{-1}$)	h ($m \text{ min}^{-1}$)	d_1 (m)	d_2 (m)	L_z (m)
1,00	0,10	$1,00 \times 10^{-7}$	$5,00 \times 10^{-5}$	$8,00 \times 10^{-3}$	$16,00 \times 10^{-3}$	$100,00 \times 10^{-3}$

Para o parâmetro λ , foi assumido um valor constante e igual à unidade.

O domínio transformado envolveu um intervalo de tempo arbitrariamente estipulado em $\Delta t = 0,20$ min para 1000 passos no tempo e uma discretização espacial de 33 linhas ξ , 33 linhas η e 34 linhas γ .

A Figura 4.37 ilustra a situação geométrica tratada, onde se destaca a malha que originou o sólido, bem como os eixos das coordenadas generalizadas e os das coordenadas cartesianas. Os símbolos W, E, N, S, F e B significam as fronteiras oeste, leste, norte, sul, frente e atrás, respectivamente.

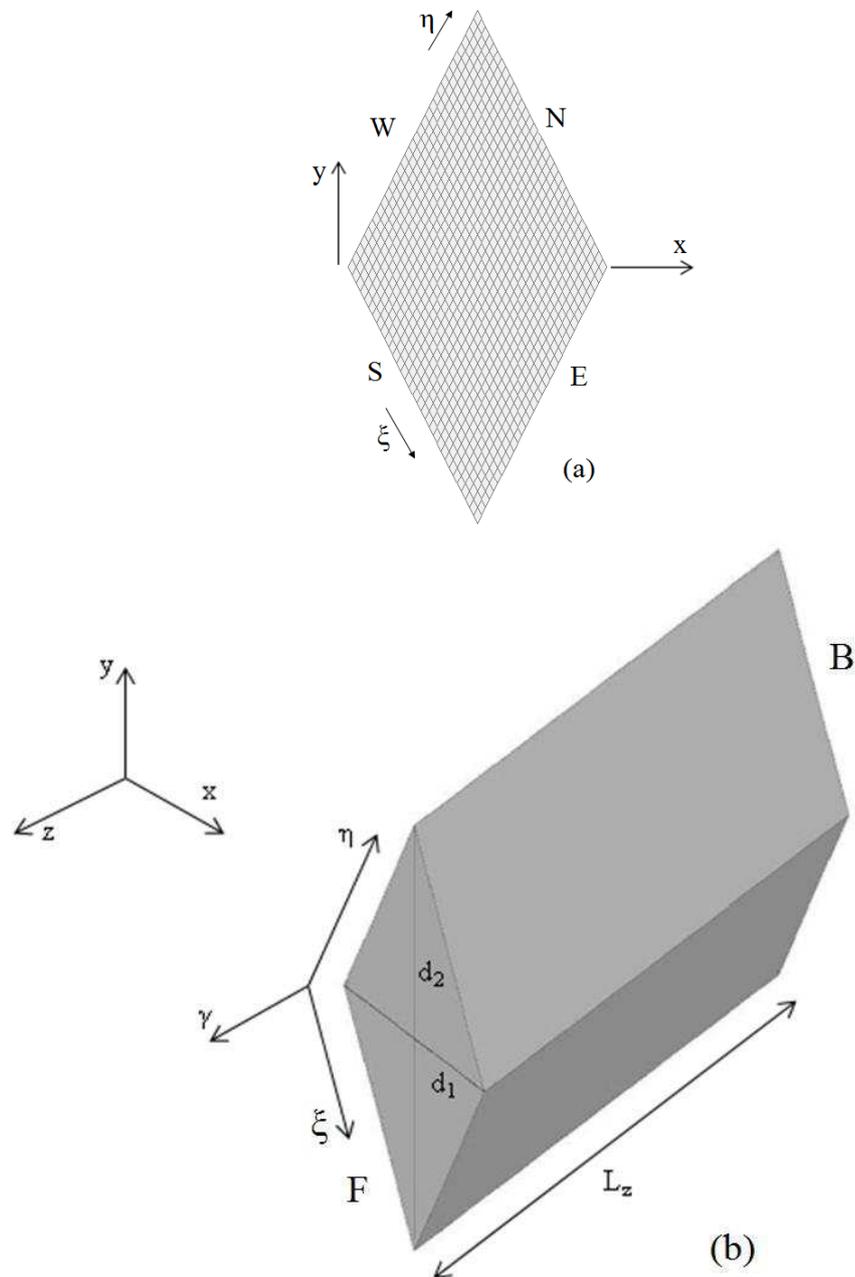


Figura 4.37 – Sólido (fora de escala) usado na validação do programa desenvolvido para malhas não-ortogonais: (a) malha bidimensional que gerou o sólido; (b) sólido gerado pela extrusão de um losango.

Os testes de consistência explorando a condição de simetria foram feitos no plano central da Figura 4.37, que corresponde a $z = L_z/2$, impondo-se a mesma condição de contorno convectiva em todas as faces do sólido e analisando-se o transiente de Φ em volumes de controle localizados em posições simétricas, de tal forma que os resultados esperados para Φ nesses volumes fossem equivalentes entre si.

Os primeiros transientes analisados foram os dos nós relativos aos volumes de controle localizados nos cantos opostos da diagonal menor da região delimitada pelos planos $\gamma = 17$ e $\gamma = 18$, conforme podem ser vistos em destaque na Figura 4.38. Estes volumes de controle correspondem aos seguintes pontos nodais: $(\xi, \eta) = (1, 1)$ e $(\xi, \eta) = (32, 32)$.

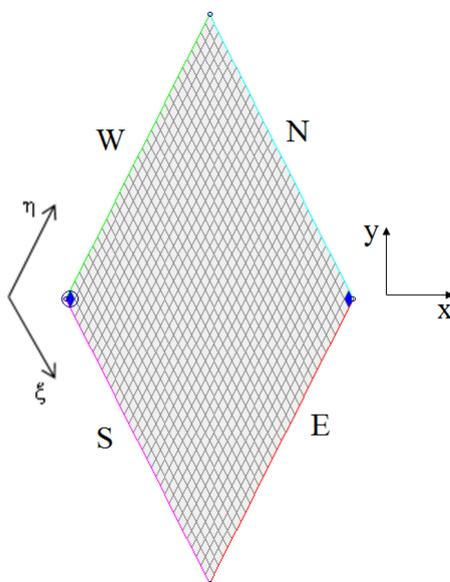


Figura 4.38 – Plano central do sólido usado para validação do código computacional proposto com destaque para os volumes de controle localizados nos cantos da diagonal menor.

A Figura 4.39 mostra os resultados para a evolução temporal da grandeza transportada obtidos com o código numérico proposto para os dois volumes de controle destacados na Figura 4.38. Como não se observa diferença entre os dois gráficos gerados, pode-se afirmar que a condição de simetria inerente ao problema físico foi verificada através da solução numérica proposta.

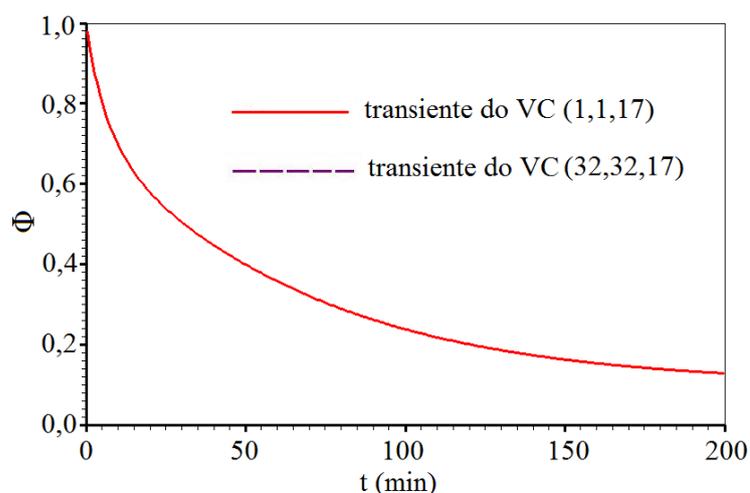


Figura 4.39 – Superposição dos transientes de Φ nos pontos nodais referentes aos volumes de controle localizados nos cantos da diagonal menor do plano central da Figura 4.37.

Dando prosseguimento aos testes de consistência para malhas retilíneas e não-ortogonais, foram analisados os transientes dos pontos nodais correspondentes aos volumes de controle localizados nos cantos opostos da diagonal maior do plano central do sólido, conforme destaque na Figura 4.40. Estes volumes de controle correspondem aos seguintes pontos nodais $(\xi, \eta) = (1, 32)$ e $(\xi, \eta) = (32, 1)$.

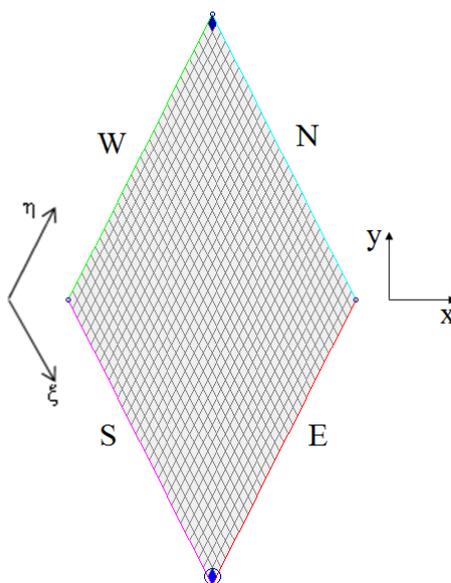


Figura 4.40 – Plano central do sólido usado para validação do código computacional desenvolvido, com destaque para os volumes de controle localizados nos cantos da diagonal maior.

Os gráficos dos transientes de Φ para os dois nós podem ser observados na Figura 4.41, onde se verifica um bom acordo entre os dois transientes e uma queda maior para o valor de Φ nesses pontos nodais do que para aqueles apresentados na Figura 4.39.

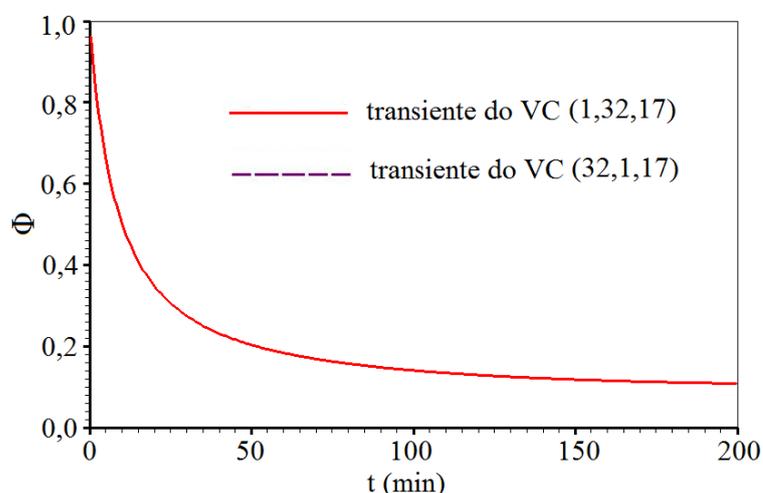


Figura 4.41 – Superposição dos transientes de Φ , num losango, nos nós referentes aos volumes de controle localizados nos cantos da diagonal maior do plano central do sólido.

Mais um teste para explorar a condição de simetria foi realizado. Desta vez foi analisado o transiente de dois volumes localizados nas fronteiras sul e norte do plano central. Para esse nós, identificados por $(\xi = 16, \eta = 1, \gamma = 17)$ e $(\xi = 17, \eta = 32, \gamma = 17)$, espera-se valores similares para Φ . Os resultados obtidos estão apresentados na Figura 4.42.

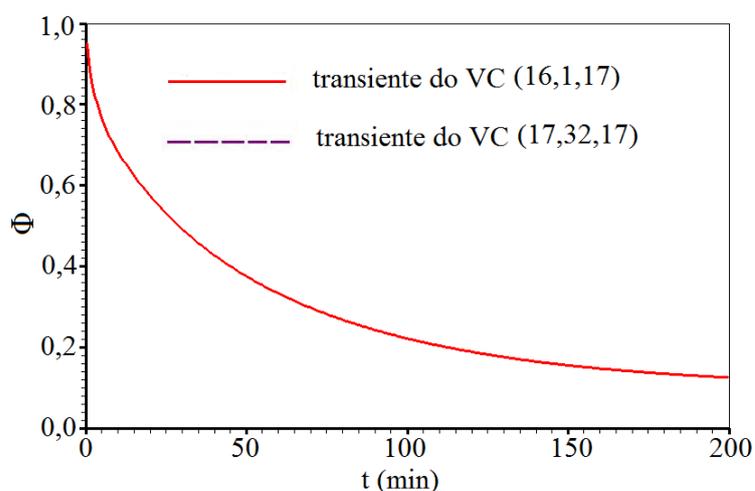


Figura 4.42 – Transientes de Φ , num losango, para os volumes de controle identificados por $(\xi = 16, \eta = 1, \gamma = 17)$ e $(\xi = 17, \eta = 32, \gamma = 17)$, localizados no plano central do sólido.

Pela coincidência das curvas apresentadas na Figura 4.42, obtém-se mais um teste com resultado positivo, o que aumenta o leque de aplicações do código numérico proposto.

O outro teste foi realizado para dois volumes de controle internos, correspondentes e identificados por $(\xi = 16, \eta = 16, \gamma = 17)$ e $(\xi = 17, \eta = 17, \gamma = 17)$, cujos resultados são apresentados na Figura 4.43.

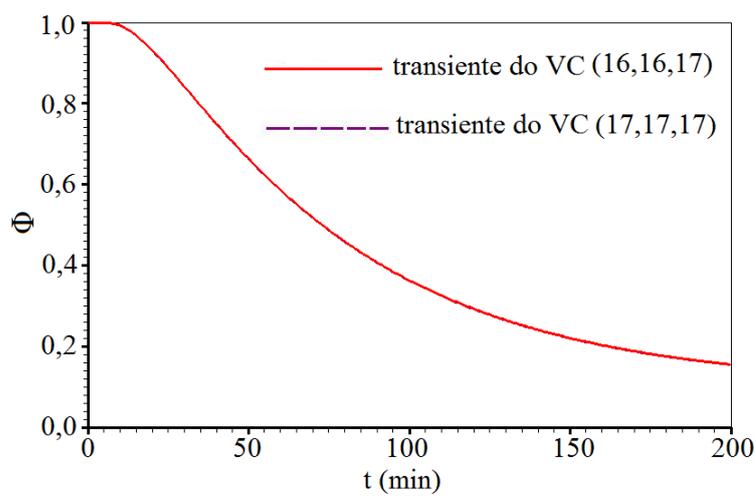


Figura 4.43 – Transientes de Φ , num losango, para volumes de controle internos correspondentes e identificados por $(\xi = 16, \eta = 16, \gamma = 17)$ e $(\xi = 17, \eta = 17, \gamma = 17)$ localizados no plano central do sólido em estudo.

Através de uma inspeção dos gráficos apresentados nas Figuras 4.39, 4.41, 4.42 e 4.43, é possível afirmar que além da consistência numérica, há coerência nos resultados obtidos pelo código proposto quanto ao fenômeno físico do processo de difusão. O transporte da grandeza acontece de forma mais célere nos volumes de fronteira, diminuído gradativamente a velocidade à medida que se aproxima do centro do corpo (Silva, 2007). Logo, é possível assegurar que, para a malha não-ortogonal estudada, a difusão deve acontecer de forma mais rápida nos cantos da diagonal maior, sendo intermediária nos cantos da diagonal menor e bem mais lenta nos volumes de controle localizados no meio do sólido.

Esta afirmação pode ser comprovada graficamente ao se traçar, num mesmo sistema de eixos, os transientes para três volumes de controle: um volume de fronteira localizado em um dos cantos da diagonal maior $(\xi = 1, \eta = 32, \gamma = 17)$, mais um volume de fronteira

localizado em um dos cantos da diagonal menor ($\xi = 1, \eta = 1, \gamma = 17$) e, por último, um volume de controle interno ($\xi = 16, \eta = 16, \gamma = 17$). Os três gráficos podem ser visto na Figura 4.44, no qual se comprova a veracidade da informação dada.

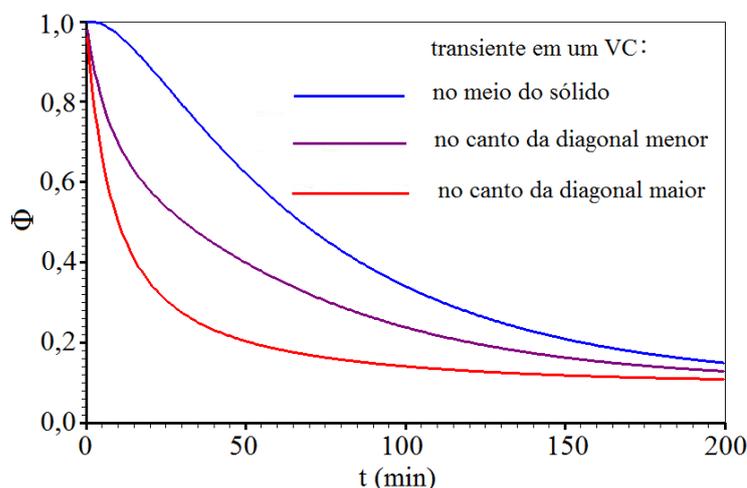


Figura 4.44 – Resultados dos transientes de Φ obtidos com o código computacional desenvolvido para um volume de controle localizado no meio do sólido, outro no canto da diagonal menor e mais um, no canto da diagonal maior.

Já que a condição de simetria atribuída foi verificada em todos os testes realizados e, além disso, foi verificada a coerência dos resultados obtidos quanto ao fenômeno físico em todas as situações simuladas, pode-se afirmar que o código computacional desenvolvido é consistente para malhas estruturadas não-ortogonais.

As próximas simulações objetivam validar a solução numérica proposta. Para comparação dos resultados, foi utilizado o software Diffusion RE.

O primeiro teste realizado refere-se à evolução temporal da distribuição espacial de Φ no plano central do sólido apresentado na Figura 4.37, que no domínio computacional, corresponde aos volumes de controle identificados por $\gamma = 17$, para qualquer ξ e η . Essa evolução temporal foi acompanhada para alguns instantes de tempo. No entanto, para apresentar os resultados em forma de tabelas, foram escolhidos os instantes de tempo $t = 10$ e $t = 110$ min. Para o instante $t = 10$ min, a distribuição espacial de Φ para alguns volumes de controle, obtida com a solução numérica proposta, está apresentada na Tabela 4.18.

Tabela 4.18 – Distribuição espacial de Φ para o losango que representa o plano central do sólido, obtida com o programa computacional desenvolvido, para o instante $t = 10$ min.

posição nodal	$\xi = 1$	$\xi = 2$	$\xi = 3$	$\xi = 4$	$\xi = 29$	$\xi = 30$	$\xi = 31$	$\xi = 32$
$\eta=32$	0,50247	0,65333	0,73125	0,76153	0,77075	0,77073	0,75614	0,69810
$\eta=31$	0,65333	0,81300	0,88268	0,90564	0,91026	0,90288	0,86665	0,75614
$\eta=30$	0,73125	0,88268	0,94542	0,96517	0,96727	0,95372	0,90288	0,77073
$\eta=29$	0,76153	0,90564	0,96517	0,98366	0,98425	0,96727	0,91026	0,77075
$\eta=4$	0,77075	0,91026	0,96727	0,98425	0,98366	0,96517	0,90564	0,76154
$\eta=3$	0,77073	0,90288	0,95372	0,96727	0,96517	0,94542	0,88268	0,73124
$\eta=2$	0,75614	0,86665	0,90288	0,91026	0,90564	0,88268	0,81300	0,65333
$\eta=1$	0,69810	0,75614	0,77073	0,77075	0,76153	0,73125	0,65333	0,50247

Os resultados referentes à distribuição espacial da grandeza, obtida com o software Diffusion RE, para o mesmo instante de tempo e para os mesmos volumes de controle apresentados na Tabela 4.18 são apresentados na Tabela 4.19. Observa-se que, para uma tolerância de 10^{-5} , os valores para volumes de controle correspondentes nas duas tabelas podem ser considerados iguais.

Tabela 4.19 – Distribuição espacial de Φ para o plano central do sólido obtido com o software Diffusion RE para o instante $t = 10$ min.

posição nodal	$\xi = 1$	$\xi = 2$	$\xi = 3$	$\xi = 4$	$\xi = 29$	$\xi = 30$	$\xi = 31$	$\xi = 32$
$\eta=32$	0,50247	0,65333	0,73125	0,76154	0,77075	0,77073	0,75614	0,69810
$\eta=31$	0,65333	0,81300	0,88268	0,90564	0,91026	0,90288	0,86665	0,75614
$\eta=30$	0,73125	0,88268	0,94542	0,96517	0,96728	0,95372	0,90288	0,77073
$\eta=29$	0,76154	0,90564	0,96517	0,98366	0,98425	0,96727	0,91026	0,77075
$\eta=4$	0,77075	0,91026	0,96727	0,98425	0,98366	0,96727	0,90564	0,76154
$\eta=3$	0,77073	0,90288	0,95372	0,96727	0,96517	0,94542	0,88268	0,73124
$\eta=2$	0,75614	0,86665	0,90288	0,91026	0,90564	0,88268	0,81300	0,65333
$\eta=1$	0,69810	0,75614	0,77073	0,77075	0,76154	0,73124	0,65333	0,50247

A Tabela 4.20 mostra os resultados obtidos com a solução numérica proposta, para o instante $t = 110$ min.

Tabela 4.20 – Distribuição espacial de Φ para o plano central da Figura 4.37 obtida via programa computacional desenvolvido para $t = 110$ min.

Posição Nodal	$\xi = 1$	$\xi = 2$	$\xi = 3$	$\xi = 4$	$\xi = 29$	$\xi = 30$	$\xi = 31$	$\xi = 32$
$\eta=32$	0,13415	0,15841	0,18449	0,20825	0,22600	0,23475	0,23231	0,21734
$\eta=31$	0,15841	0,19390	0,22792	0,25548	0,27237	0,27541	0,26254	0,23231
$\eta=30$	0,18449	0,22792	0,26577	0,29266	0,30458	0,29908	0,27541	0,23475
$\eta=29$	0,20825	0,25548	0,29266	0,31487	0,31914	0,30458	0,27237	0,22600
$\eta=4$	0,22600	0,27237	0,30458	0,31914	0,31487	0,29266	0,25548	0,20825
$\eta=3$	0,23474	0,27541	0,29908	0,30458	0,29266	0,26577	0,22792	0,18449
$\eta=2$	0,23231	0,26254	0,27541	0,27237	0,25548	0,22792	0,19390	0,15841
$\eta=1$	0,21734	0,23232	0,23475	0,22600	0,20825	0,18449	0,15841	0,13415

Visando à comparação, a Tabela 4.21 foi montada com resultados provenientes do software Diffusion RE nas mesmas condições dos dados obtidos na Tabela 4.20.

Tabela 4.21 – Distribuição espacial de Φ para o plano central do sólido obtida via software Diffusion RE para $t = 110$ min.

Posição Nodal	$\xi = 1$	$\xi = 2$	$\xi = 3$	$\xi = 4$	$\xi = 29$	$\xi = 30$	$\xi = 31$	$\xi = 32$
$\eta=32$	0,13415	0,15841	0,18449	0,20825	0,22600	0,23475	0,23231	0,21734
$\eta=31$	0,15841	0,19390	0,22792	0,25548	0,27236	0,27541	0,26254	0,23231
$\eta=30$	0,18449	0,22792	0,26577	0,29266	0,30458	0,29908	0,27541	0,23475
$\eta=29$	0,20825	0,25548	0,29266	0,31487	0,31914	0,30458	0,27236	0,22600
$\eta=4$	0,22600	0,27236	0,30458	0,31914	0,31487	0,29266	0,25548	0,20825
$\eta=3$	0,23475	0,27541	0,29908	0,30458	0,29266	0,26577	0,22792	0,18449
$\eta=2$	0,23231	0,26254	0,27541	0,27236	0,25548	0,22792	0,19390	0,15841
$\eta=1$	0,21734	0,23231	0,23475	0,22600	0,20825	0,18449	0,15841	0,13415

Comparando os valores da grandeza de interesse em volumes de controle correspondentes das Tabelas 4.18 e 4.19, bem como os das Tabelas 4.20 e 4.21, pode-se perceber que para uma tolerância da ordem de 10^{-5} , há uma boa concordância entre os resultados obtidos pelas duas soluções numéricas. Isto representa mais um avanço na busca para validar o programa computacional desenvolvido nesta pesquisa.

O software Contour Plots, desenvolvido por Silva (2008c) tem como função “Gerar Gráficos de Contorno”, que possibilita analisar visualmente a evolução temporal da distribuição espacial da grandeza Φ em uma geometria bidimensional no domínio físico. Esta opção foi utilizada com os resultados provenientes do código numérico desenvolvido neste trabalho para o plano central do sólido sob análise, que possui a forma de um losango. A evolução ao longo do tempo foi acompanhada para vários instantes de tempo:

- a) $t = 0$ min;
- b) $t = 10$ min;
- c) $t = 20$ min;
- d) $t = 40$ min;
- e) $t = 70$ min;
- f) $t = 110$ min;
- g) $t = 200$ min.

A distribuição da variável Φ sobre o plano central do sólido estão apresentadas na Figura 4.45.

A evolução temporal observada nos gráficos de contorno apresentados na Figura 4.45 corrobora a afirmação de que há coerência nos resultados obtidos pelo código computacional proposto em relação ao fenômeno físico do processo de difusão observado na malha não-ortogonal que está sendo estudada. Houve concordância dos últimos resultados com aqueles apresentados na Figura 4.44. Para os instantes iniciais, a velocidade do transporte da grandeza no interior do sólido é menor do que nas regiões próximas à fronteira. Por outro lado, os volumes de controle localizados próximos aos cantos da diagonal maior possuem uma velocidade de transporte maior do que os volumes de controle localizados próximos aos cantos da diagonal menor.

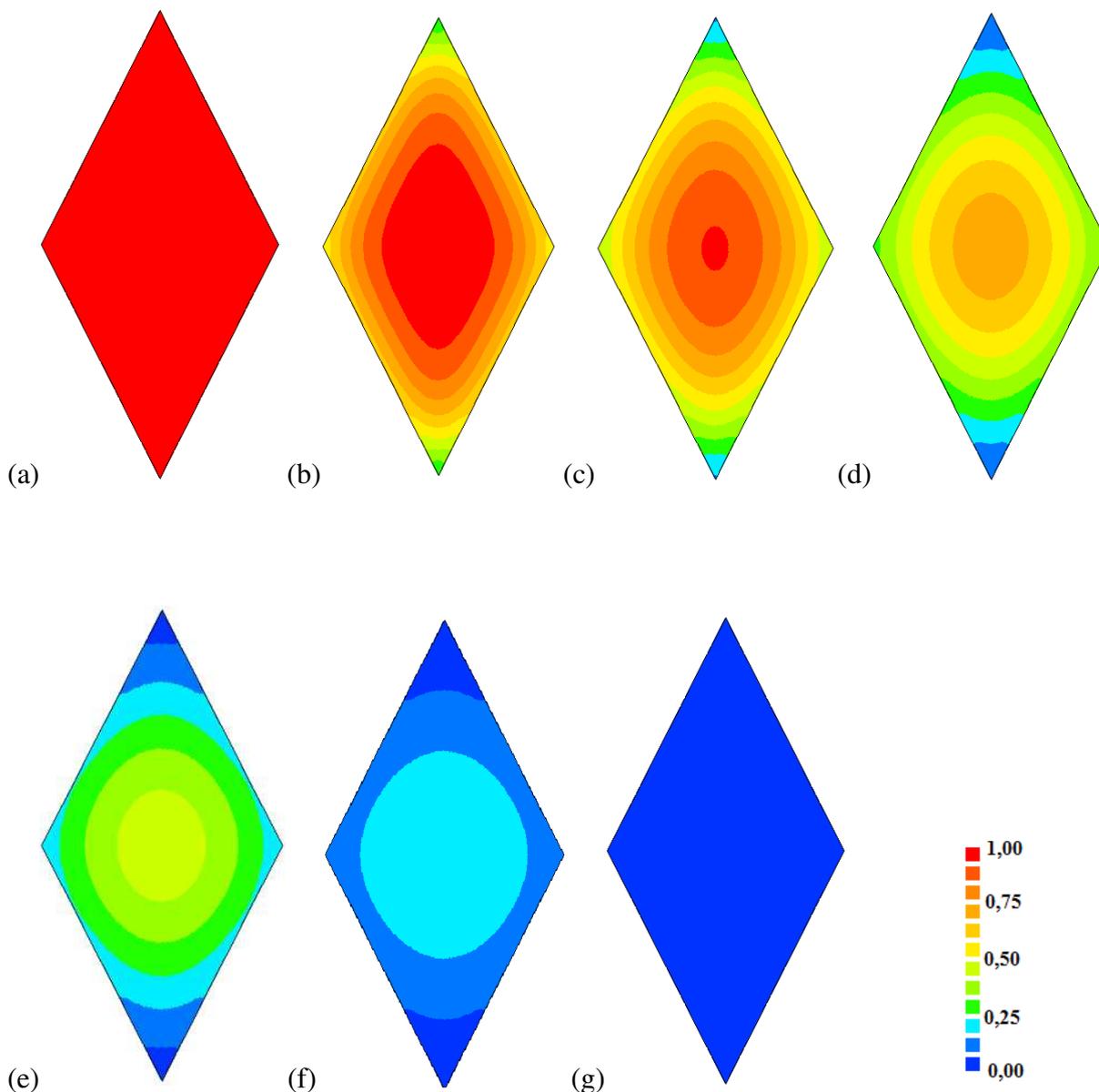


Figura 4.45 – Distribuição espacial de Φ sobre o plano central do sólido analisado:

(a) $t = 0$ min; (b) $t = 10$ min; (c) $t = 20$ min; (d) $t = 40$ min; (e) $t = 70$ min; (f) $t = 110$ min e
(g) $t = 200$ min.

Os volumes de controle que tiveram seus transientes analisados pelo código computacional proposto e cujos gráficos estão mostrados na Figura 4.44, foram avaliados também pelo Diffusion RE e os resultados obtidos pelas duas soluções numéricas foram comparados entre si. Na Figura 4.46 aparecem os resultados referentes ao volume de controle localizado em um dos cantos da diagonal maior, identificado por $(\xi = 1, \eta = 32, \gamma = 17)$.

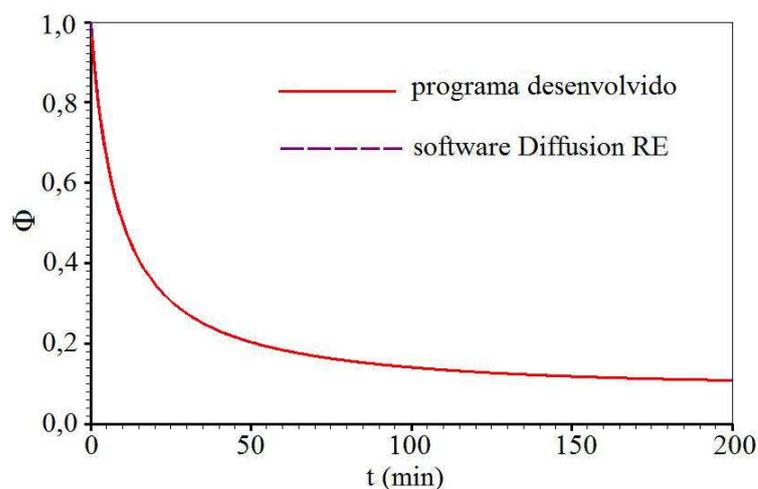


Figura 4.46 – Superposição do transiente do volume de controle ($\xi = 1, \eta = 32, \gamma = 17$) obtido pelas duas soluções numéricas: programa desenvolvido e software Diffusion RE.

A Figura 4.47 apresenta o valor de Φ em função do tempo para o ponto nodal localizado no volume de controle identificado por $(\xi = 1, \eta = 1, \gamma = 17)$ e que está localizado em um dos cantos da diagonal menor.

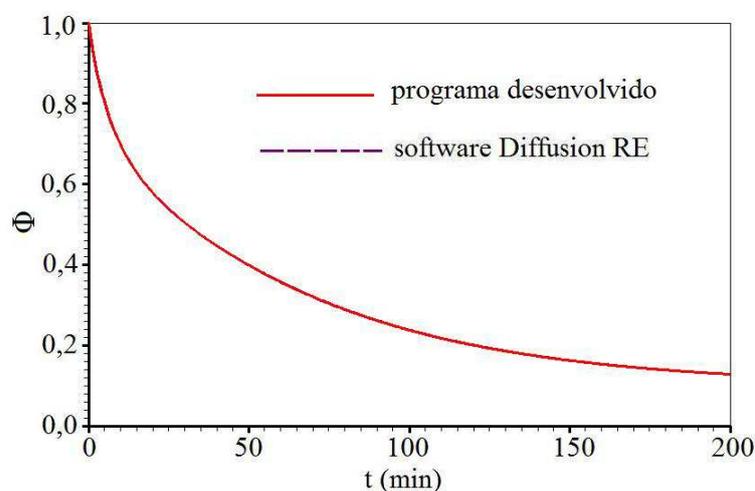


Figura 4.47 – Superposição do transiente do volume de controle ($\xi = 1, \eta = 1, \gamma = 17$) obtido pelas duas soluções numéricas: programa desenvolvido e software Diffusion RE.

O outro volume de controle escolhido para análise da evolução temporal do processo difusivo está localizado no meio do sólido, sendo identificado por $(\xi = 16, \eta = 16, \gamma = 17)$. O resultado está descrito pelos gráficos mostrados na Figura 4.48.

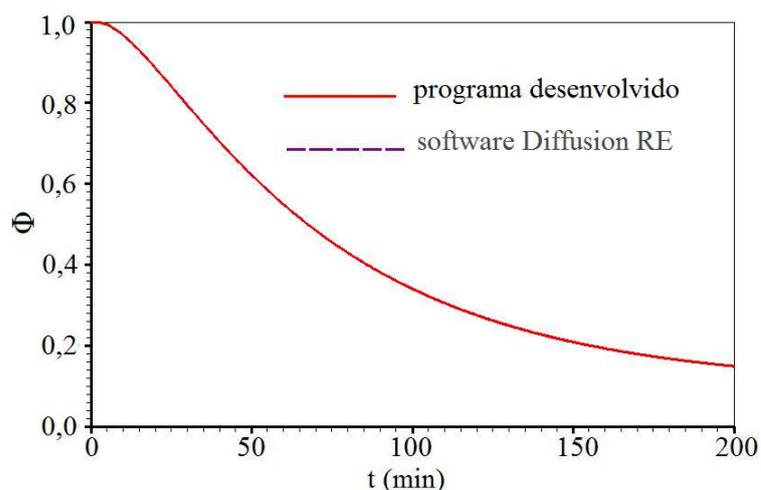


Figura 4.48 - Transiente do nó ($\xi = 16$, $\eta = 16$, $\gamma = 17$) obtido pelas duas soluções numéricas: programa desenvolvido e software Diffusion RE.

Visando comparar o regime transiente do valor médio da grandeza para o plano central sob análise, os resultados obtidos com as duas soluções numéricas estão apresentados na Figura 4.49.

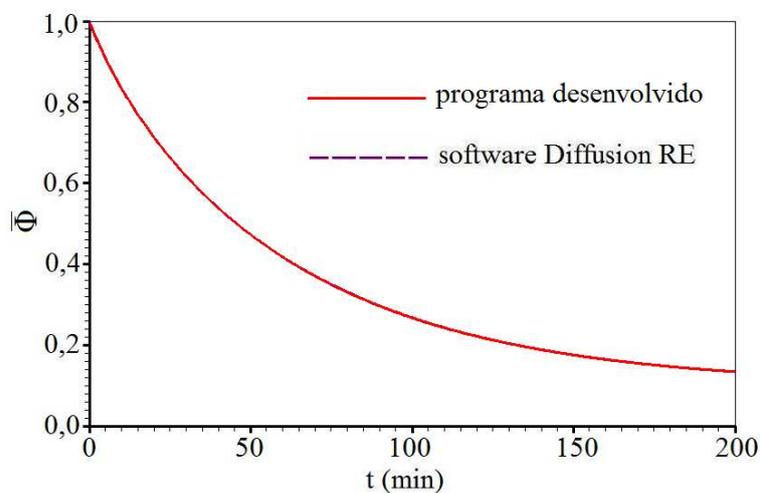


Figura 4.49 - Transiente do valor médio de Φ para o plano central do sólido que possui a seção transversal na forma de um losango.

Observa-se, a partir dos gráficos apresentados nas Figuras 4.46 a 4.49, que todos os resultados obtidos com o código numérico proposto coincidiram com aqueles provenientes do software Diffusion RE. Logo, diante deste fato e levando em consideração os outros testes apresentados nesta seção, os quais foram bem sucedidos, é possível afirmar que o código

computacional desenvolvido neste trabalho é válido para malhas tridimensionais estruturadas e não-ortogonais similares àquela apresentada a Figura 4.37.

Como já mencionado anteriormente, os resultados obtidos não devem depender de como o sólido está disposto no espaço. No entanto, deve-se salientar que o sólido físico que está sendo analisado no momento foi obtido a partir da extrusão do um losango ao longo do eixo z, sendo este eixo, portanto, perpendicular ao plano xy. Isto faz com que alguns termos da equação de difusão discretizada sejam calculados como zero, fazendo com que nem todas as equações envolvidas na solução numérica sejam testadas. Torna-se necessário, portanto, fazer com que o código computacional desenvolvido seja válido para qualquer posição que o sólido possa se encontrar no espaço. Assim, com o intuito de validar todas as conexões entre os três eixos, uma nova posição para o sólido foi obtida, fazendo uma extrusão do losango ao longo do eixo y, conforme o esquema mostrado na Figura 4.50.

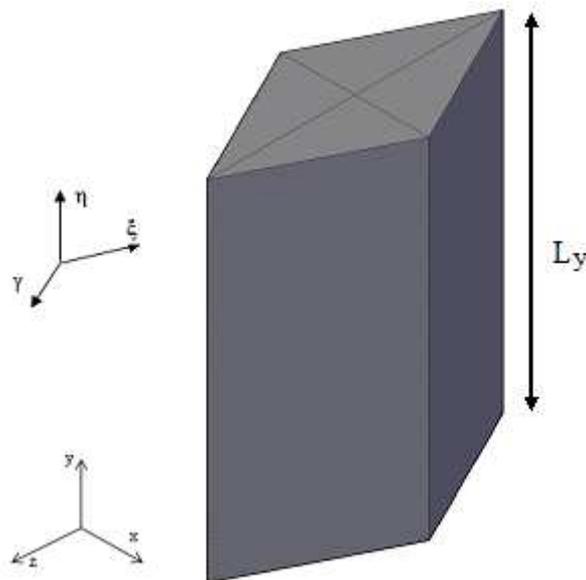


Figura 4.50 – Sólido (fora de escala) obtido a partir da extrusão de um losango ao longo do eixo y.

Para um comprimento $L_y = 100 \times 10^{-3}$ m, o domínio computacional envolveu 33 linhas ξ , 34 linhas η e 33 linhas γ , enquanto a discretização no tempo foi feita em 1000 passos para um intervalo de tempo arbitrário e igual a 0,20 minutos. Todas as outras características da simulação, tais como as constantes termofísicas, as dimensões das diagonais e as condições de contorno e inicial foram repetidas e podem ser vistas na Tabela 4.17.

A primeira análise foi feita visando verificar a consistência do código numérico desenvolvido para essa nova posição do sólido e para isto foram avaliados e comparados entre si, os transientes de dois volumes de controle localizados em posições simétricas, visto que, para este caso, também foi imposta a mesma condição de contorno em todas as faces do sólido. Os pontos nodais escolhidos estão localizados em dois planos diferentes do sólido: um plano no contorno sul e outro no contorno norte. Os respectivos nós são identificados por $(\xi = 1, \eta = 1, \gamma = 1)$ e $(\xi = 1, \eta = 33, \gamma = 1)$. A Figura 4.51 destaca a localização de um dos volumes de controle, que é similar para os planos das duas fronteiras.

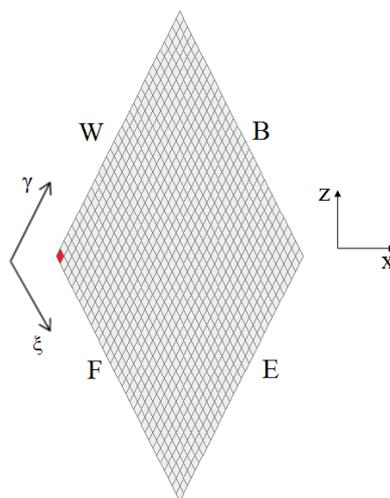


Figura 4.51 – Malha da seção transversal do sólido sob estudo, destacando o volume de controle que teve seu transiente analisado.

A superposição dos transientes para os 2 volumes estão apresentados na Figura 4.52.

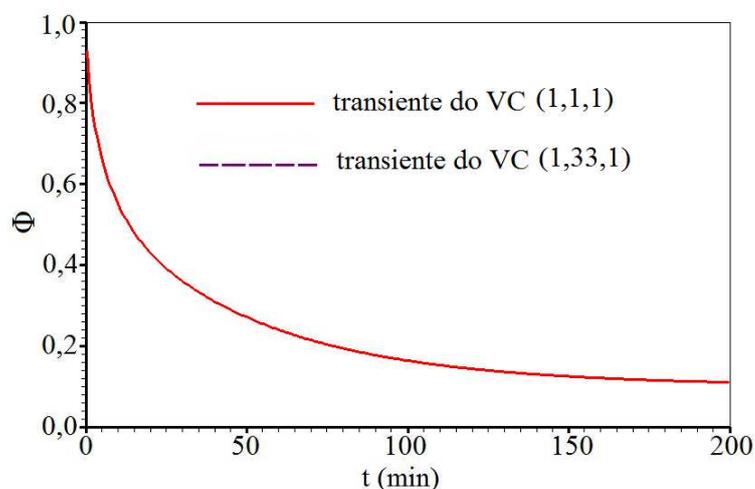


Figura 4.52 – Superposição dos transientes de Φ obtidos com o programa desenvolvido para volumes de controle correspondentes localizados nas faces norte e sul.

Através de uma inspeção da Figura 4.52, verifica-se que, pela concordância das curvas, o primeiro teste para essa simulação teve resultado satisfatório, sendo mais um indicador positivo na validação da solução numérica proposta. Isto dá uma garantia de que as equações que relacionam as conexões entre os eixos estão discretizadas de forma correta.

Para consolidar a consistência do código computacional desenvolvido, foi feito um acompanhamento da evolução temporal da distribuição espacial de Φ sobre o plano em forma de losango, localizado na fronteira sul do sólido, correspondente aos volumes de controle identificados por $\eta = 1$, para qualquer (ξ, γ) .

Os instantes de tempo selecionados para análise foram:

- a) $t = 10$ min;
- b) $t = 20$ min;
- c) $t = 40$ min;
- d) $t = 70$ min.

A forma escolhida para apresentar os resultados foi através dos gráficos de contorno que estão mostrados na Figura 4.53.

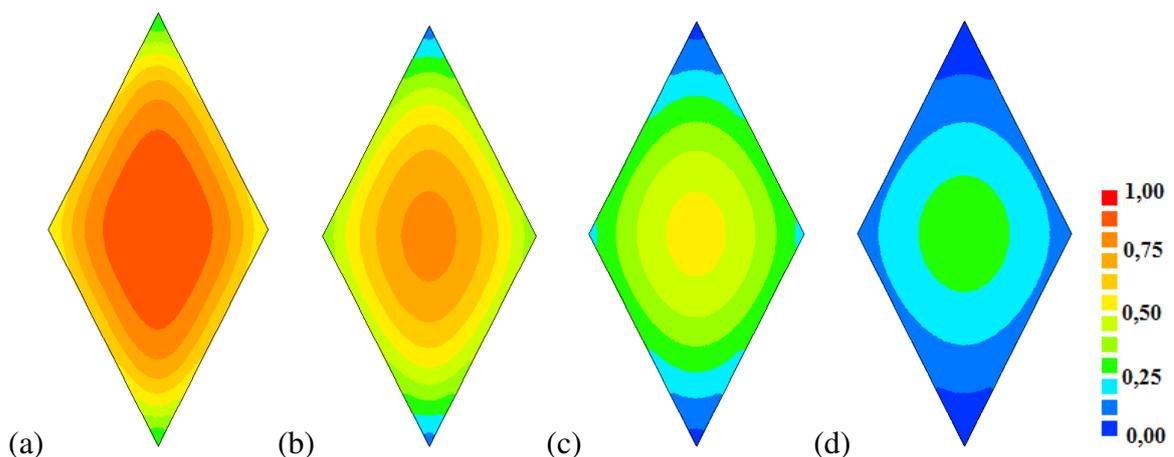


Figura 4.53 – Distribuição espacial de Φ sobre o plano localizado na fronteira sul do sólido analisado: (a) $t = 10$ min; (b) $t = 20$ min; (c) $t = 40$ min e (d) $t = 70$ min.

Apesar da distribuição espacial ter sido analisada em um plano localizado na fronteira sul, pode-se perceber que a coerência e a consistência do código desenvolvido foram verificadas, visto que para os instantes iniciais, a velocidade do transporte da grandeza no centro do plano é menor do que nas regiões próximas ao contorno. Por outro lado, os volumes de controle localizados próximos aos cantos da diagonal maior possuem uma velocidade de transporte maior do que os volumes de controle localizados próximos aos cantos da diagonal menor.

Visando à validação numérica do código proposto, foram avaliados os transientes de dois volumes de controle. O primeiro ponto nodal escolhido para ter seu transiente analisado foi referente a um volume de controle interno, identificado por $(\xi = 17, \eta = 17, \gamma = 17)$. Os resultados obtidos pelo programa desenvolvido e pelo software Diffusion RE aparecem na Figura 4.54, na qual se verifica concordância entre as duas soluções, obtendo-se, portanto, mais um teste com resultado positivo.

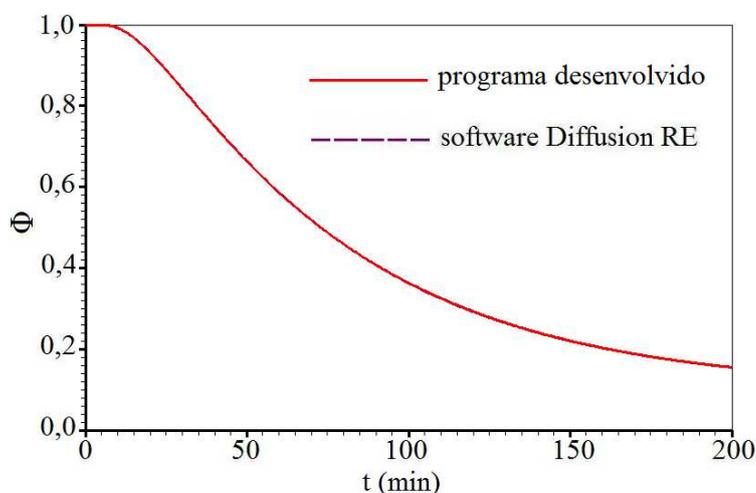


Figura 4.54 – Superposição do transiente do volume de controle $(\xi = 17, \eta = 17, \gamma = 17)$ obtido pelas duas soluções numéricas: programa desenvolvido e software Diffusion RE.

O outro ponto nodal escolhido para análise é o ponto central de um volume de controle localizado em uma das fronteiras, cuja identificação é feita por $(\xi = 32, \eta = 17, \gamma = 32)$. Este volume está localizado em um dos cantos da diagonal menor e o seu transiente obtido com a solução numérica proposta foi comparado com aquele proveniente do software Diffusion RE. Os gráficos estão apresentados na Figura 4.55, na qual se verifica um bom acordo entre os

dois resultados, ampliando, portanto, a faixa de aplicabilidade do programa computacional desenvolvido.

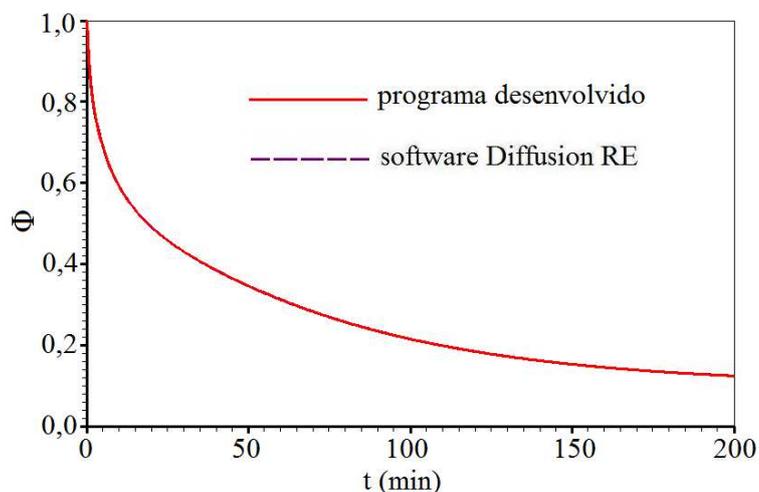


Figura 4.55 – Superposição do transiente do volume de controle ($\xi = 32$, $\eta = 17$, $\gamma = 32$) obtido pelas duas soluções numéricas: programa desenvolvido e software Diffusion RE.

Para completar os testes realizados para este tipo de geometria, foi obtido o transiente do valor médio da grandeza calculado no plano central do corpo. Os resultados obtidos com as duas soluções numéricas estão mostrados na Figura 4.56, onde mais uma vez, pode ser observada a coincidência entre as curvas.

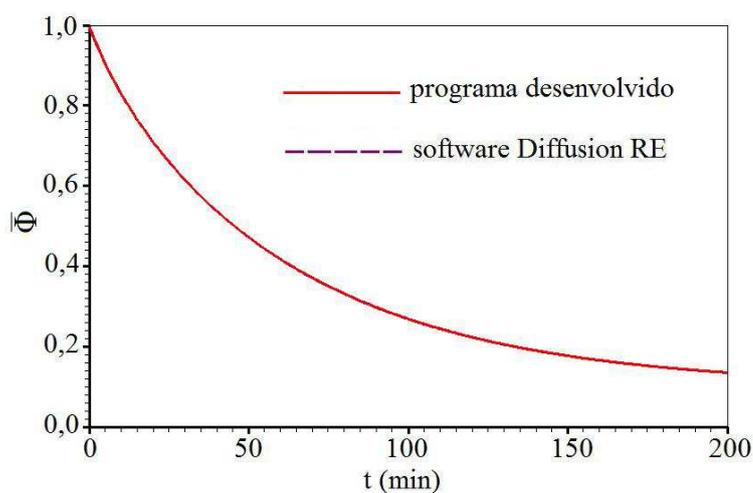


Figura 4.56 - Transiente do valor médio de Φ para o plano central do sólido obtido a partir da extrusão, ao longo do eixo y , de um losango no plano xz .

Os resultados apresentados nas Figuras 4.54 a 4.56 mostram que os testes realizados para validar o código computacional desenvolvido aplicado ao sólido mostrado na Figura 4.50 foram bem sucedidos e, conseqüentemente, possibilitam afirmar que a solução proposta é válida para resolver a equação de difusão para tal geometria.

Com estes resultados, completa-se a seqüência de testes realizados para uma malha estruturada retilínea e não-ortogonal. A conclusão a que se chega é que a solução numérica proposta foi testada e, portanto, validada para um sólido obtido pela extrusão de uma figura plana na forma de um losango, independente de qual eixo ocorra a extrusão.

Mediante o exposto nesta seção, pode-se generalizar a aplicação do código computacional desenvolvido para qualquer malha retilínea com qualquer forma geométrica. Logo, neste ponto da pesquisa é possível afirmar que a solução numérica desenvolvida é válida para estudar o fenômeno difusivo em sólidos com qualquer geometria, desde que a malha gerada seja retilínea, podendo ser ortogonal ou não, empregando condições de contorno do primeiro ou do terceiro tipo.

O código computacional desenvolvido foi testado e validado para uma geometria mais complexa do que as apresentadas anteriormente, ampliando assim, o domínio físico para suas aplicações. O próximo passo consiste em validar a solução numérica proposta para malhas curvilíneas.

4.2.3.2 Sólido gerado a partir da extrusão de um círculo

Com o intuito de ampliar o leque de aplicações do código numérico desenvolvido, foi escolhida uma forma geométrica mais complexa que as anteriores: um cilindro finito, cuja geometria foi gerada a partir da extrusão, ao longo do eixo z , de uma malha bidimensional circular obtida no software 2D Grid Generation. O domínio físico usado nesta simulação está esquematizado em detalhes nas Figuras 4.57a e 4.57b.

Para esta simulação, a discretização no espaço envolveu uma malha com 31 linhas ξ , 31 linhas η e 32 linhas γ , enquanto que a discretização no tempo envolveu 2000 passos para a utilização de um intervalo $\Delta t = 219,24$ s.

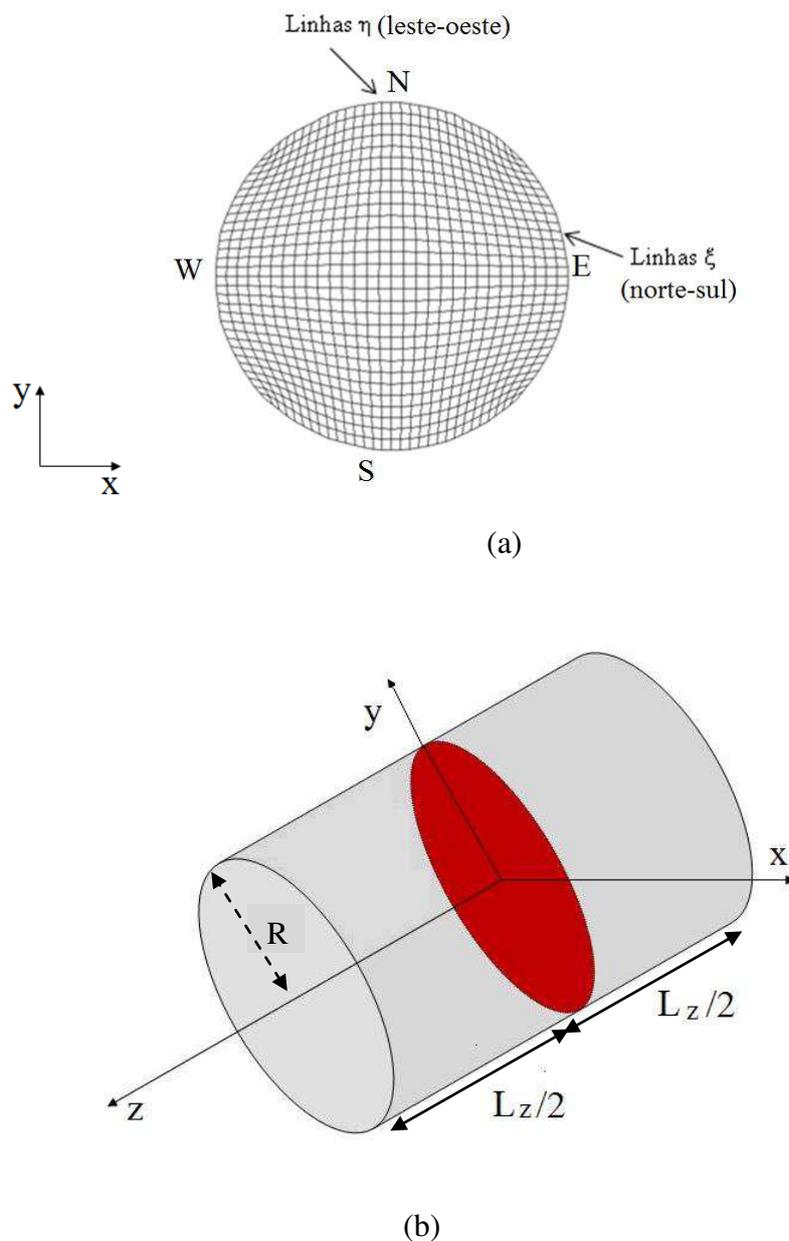


Figura 4.57 – Esquema (fora de escala) para gerar um cilindro finito: (a) Malha circular utilizada para gerar o cilindro finito; (b) Cilindro finito obtido a partir da extrusão de uma malha circular.

Para que a condição de simetria fosse explorada ao longo do eixo z, foi necessário e suficiente impor a condição de fluxo zero em uma das faces da fronteira (atrás ou frente). Isto corresponde a um refino na malha ao longo do eixo z de 32 para 64 linhas γ .

Para analisar o processo de difusão no cilindro finito apresentado na Figura 4.57, impondo-se a condição de contorno convectiva, foram utilizados os parâmetros de transporte e as características físicas sintetizados na Tabela 4.22.

Tabela 4.22 - Parâmetros físicos simulados para a solução da equação de difusão de uma malha cilíndrica para condição de contorno convectiva.

Φ_i	Φ_{eq}	Γ^Φ (m ² s ⁻¹)	h (m s ⁻¹)	R (m)	L_z (m)
1,00	0,00	$6,737 \times 10^{-10}$	$9,175 \times 10^{-8}$	$1,768 \times 10^{-2}$	$6,400 \times 10^{-2}$

A consistência do código computacional proposto para malhas estruturadas curvilíneas foi testada a partir da comparação dos transientes para volumes de controle localizados em posições simétricas, de tal forma que os resultados esperados para Φ fossem equivalentes entre si. Para a realização destes testes foram escolhidos, inicialmente, dois volumes de fronteira, situados no plano frontal do sólido, nas faces sul e norte, sendo identificados, respectivamente por: ($\xi = 16, \eta = 1, \gamma = 31$) e ($\xi = 16, \eta = 30, \gamma = 31$).

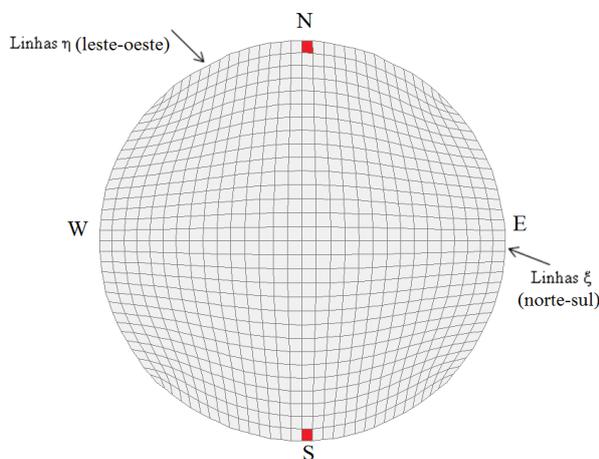


Figura 4.58 – Malha circular localizada no plano frontal do sólido, com destaque para os volumes de controle que tiveram seus transientes analisados.

Os transientes obtidos com o código computacional desenvolvido estão mostrados na Figura 4.59, onde se verifica que, pela superposição das curvas traçadas, o primeiro teste realizado teve o seu resultado satisfatório.

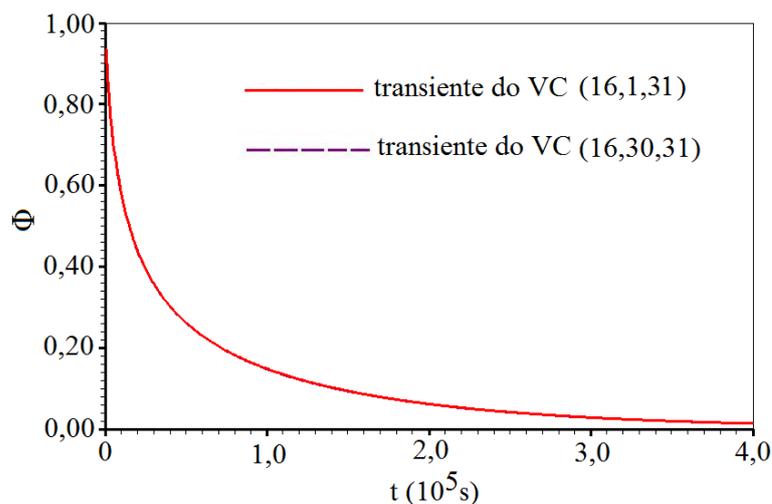


Figura 4.59 – Superposição dos transientes, em volumes de controle de um cilindro finito, identificados por $(\xi = 16, \eta = 1, \gamma = 31)$ e $(\xi = 16, \eta = 30, \gamma = 31)$.

Dois volumes de controle internos, localizados em posições simétricas no plano central do sólido e identificados por $(\xi = 16, \eta = 17, \gamma = 16)$ e $(\xi = 16, \eta = 14, \gamma = 16)$ foram escolhidos para dar continuidade aos testes de consistência. Estes volumes estão destacados na malha apresentada na Figura 4.60.

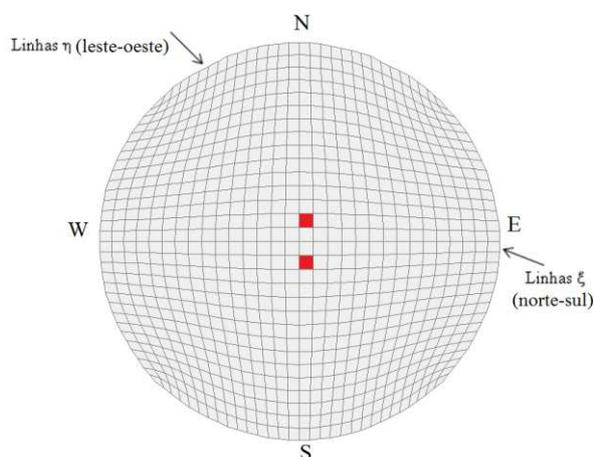


Figura 4.60 – Malha circular localizada no plano central do sólido, com destaque para os volumes de controle que tiveram seus transientes analisados.

Os transientes obtidos a partir da solução numérica proposta para os dois pontos nodais estão mostrados na Figura 4.61, na qual se observa uma concordância entre as curvas, como esperado, devido à condição de simetria intrínseca da situação apresentada.

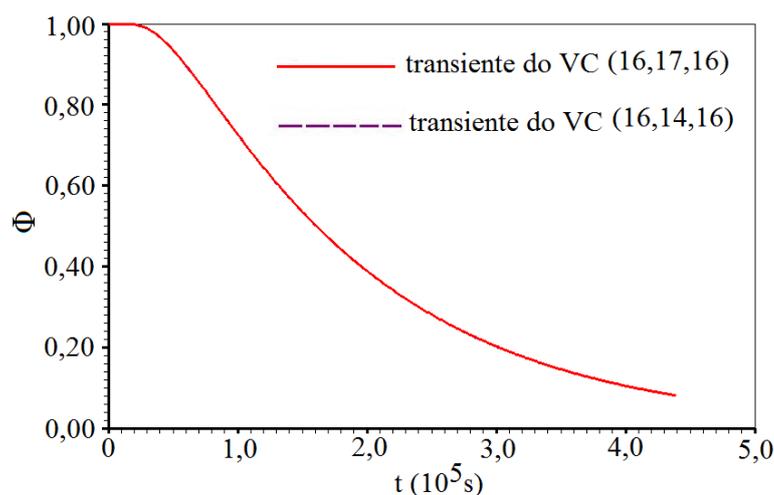


Figura 4.61 – Superposição dos transientes em volumes de controle num cilindro finito, identificados por $(\xi = 16, \eta = 17, \gamma = 16)$ e $(\xi = 16, \eta = 14, \gamma = 16)$.

Os resultados apresentados nas Figuras 4.59 e 4.61 mostram, mais uma vez, a coerência da solução numérica proposta, em relação ao fenômeno físico da difusão, visto que o transporte da grandeza ocorre de forma mais rápida nos volumes de fronteira e de forma mais lenta nos volumes de controle localizados no meio do sólido. A veracidade desta afirmação pode ser comprovada fazendo-se a superposição dos transientes de Φ para dois pontos nodais, um na fronteira e outro no meio do sólido, o que pode ser visto através dos gráficos traçados na Figura 4.62.

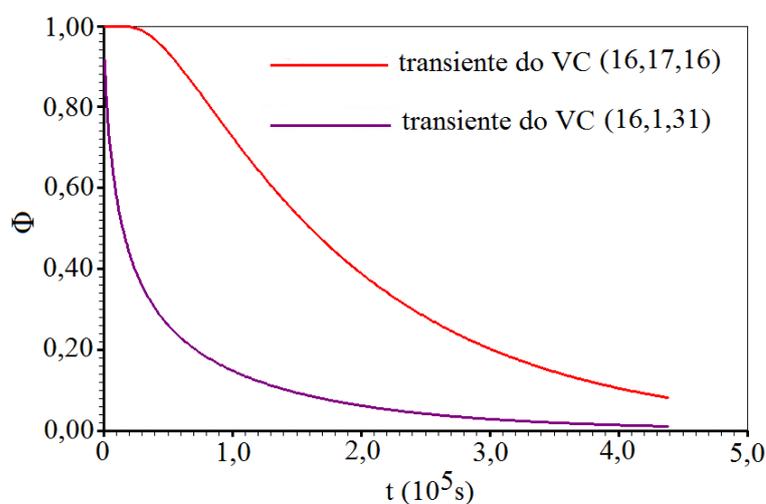


Figura 4.62 – Transientes de Φ para um volume de fronteira e para um volume no meio do sólido, obtidos com o programa computacional desenvolvido.

A Figura 4.63 mostra a evolução temporal da distribuição espacial da grandeza Φ sobre o plano central do sólido para vários instantes de tempo:

- a) $t = 0$ s;
- b) $t = 21924$ s;
- c) $t = 43848$ s;
- d) $t = 109620$ s;
- e) $t = 164430$ s;
- f) $t = 219240$ s.

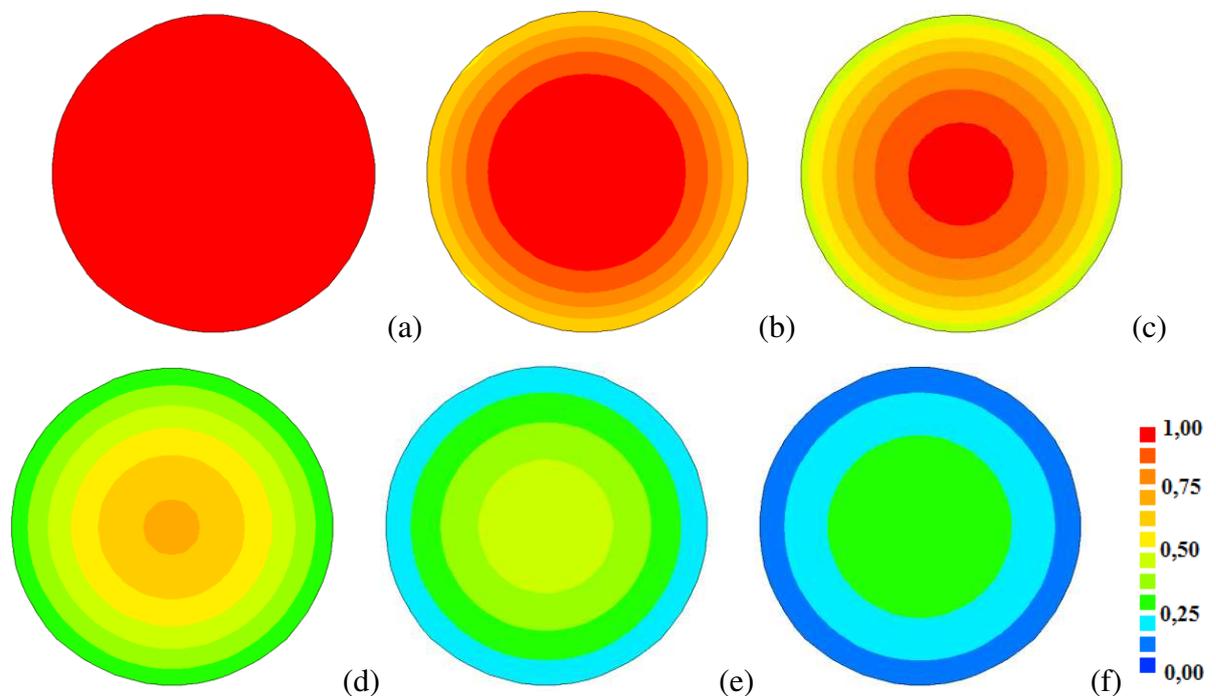


Figura 4.63 – Distribuição espacial de Φ sobre o plano central do cilindro finito:

- a) $t = 0$ s; b) $t = 21924$ s; c) $t = 43848$ s; d) $t = 109620$ s; e) $t = 164430$ s e
- f) $t = 219240$ s.

As informações tiradas dos gráficos de contorno mostrados na Figura 4.63 sobre a distribuição espacial consolidam a consistência do programa computacional desenvolvido quanto ao fenômeno físico da difusão em um cilindro finito.

Visando validar a solução numérica desenvolvida para a geometria estudada, foi gerada no software 2D Grid Generation, uma malha retangular com a largura equivalente ao raio do cilindro e um comprimento com valor igual à sua altura. Esta malha, com um domínio transformado de 17 linhas ξ e 33 linhas η , está esquematizada na Figura 4.64 e foi utilizada pelo software Diffusion RE para gerar um cilindro finito, a partir da sua revolução em torno do eixo de simetria η e, conseqüentemente, avaliar o fenômeno da difusão.

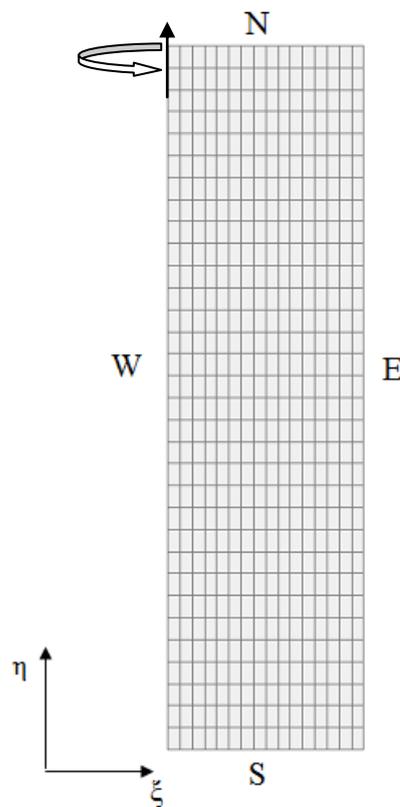


Figura 4.64 – Malha retangular usada na geração de um cilindro finito.

O valor médio da grandeza transportada em função do tempo foi obtido com as duas soluções numéricas e os resultados são apresentados na Figura 4.65, verificando-se mais uma vez a superposição das curvas obtidas. Assim, o primeiro teste realizado para validar numericamente o código computacional desenvolvido para um cilindro finito forneceu um resultado satisfatório.

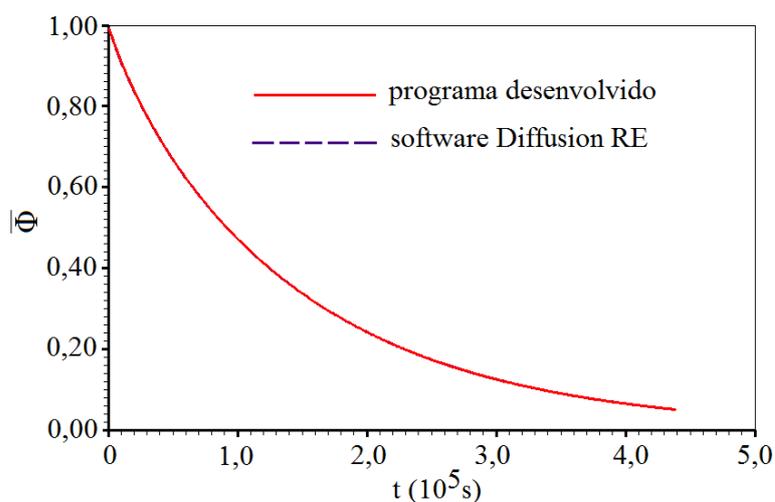


Figura 4.65 – Superposição dos transientes do valor médio de Φ para um cilindro finito obtidos com o programa desenvolvido e com o Diffusion RE.

Continuando com os testes de validação, para um instante arbitrário, $t = 109620$ s foi analisada a distribuição espacial de Φ em uma linha correspondente a $\eta = 16$, localizada no plano central do sólido. A Figura 4.66 mostra os gráficos de Φ em função da variável radial r , obtidos com as duas soluções numéricas, onde se verifica a coincidência das curvas e a coerência física dos resultados, já que o transporte de Φ deve acontecer do centro do corpo em direção à fronteira.

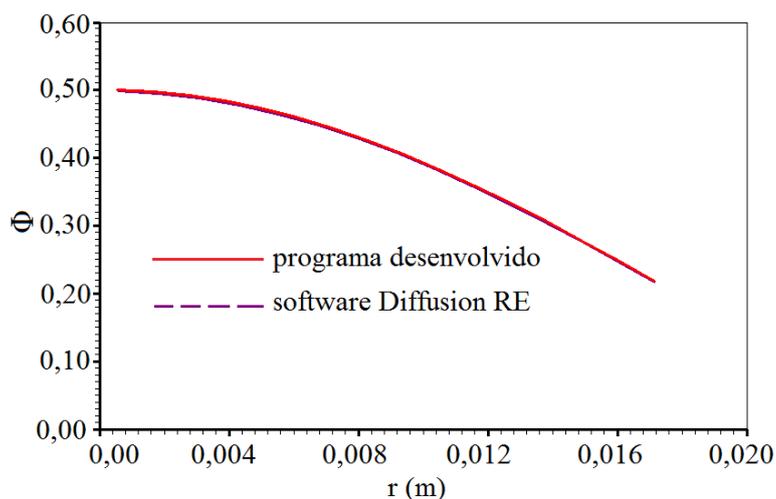


Figura 4.66 – Superposição das curvas da distribuição radial de Φ para um cilindro finito no instante $t = 109620$ s obtida via programa desenvolvido e via Diffusion RE.

Os resultados apresentados nas Figuras 4.65 e 4.66 mostram um bom acordo entre a solução proposta e aquela proveniente do Diffusion RE, o que contribui para consolidar a validade numérica do código computacional desenvolvido. Assim sendo, é possível concluir que o programa desenvolvido é capaz de solucionar a equação de difusão em um domínio mais complexo como aquele que é mostrado na Figura 4.57, desde que os parâmetros do processo e as dimensões do sólido permaneçam constantes durante o processo.

Da mesma forma que as conexões entre os eixos para malhas retilíneas foram examinadas, também foram realizadas simulações com o intuito de examinar as equações que envolvem relações entre as três coordenadas para uma malha curvilínea. Desta forma, um cilindro finito foi obtido a partir da extrusão de um círculo ao longo do eixo y , e para essa nova posição do sólido foram repetidos alguns dos testes feitos anteriormente. A nova posição do cilindro está detalhada na Figura 4.67.

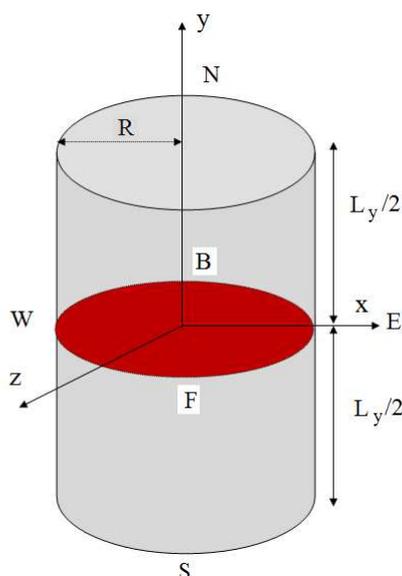


Figura 4.67 – Cilindro obtido a partir da extrusão de um círculo ao longo do eixo y .

Todas as condições físicas e as dimensões do corpo foram as mesmas utilizadas para o cilindro da Figura 4.57, com a devida adaptação (ver Tabela 4.22). O domínio transformado também utilizou a mesma discretização no tempo, a qual foi de 2000 passos para um intervalo de 219,24 s, enquanto que para a malha, naturalmente que se teve que fazer uma pequena alteração, já que houve uma inversão dos eixos y e z . Assim sendo, o corpo foi dividido em uma malha com 31 linhas ξ , 32 linhas η e 31 linhas γ .

Seguindo o mesmo raciocínio utilizado ao longo desta pesquisa para validar a solução numérica proposta, os testes iniciais tiveram como objetivo verificar simultaneamente a consistência e a validade numérica do código computacional desenvolvido. Deste modo, foram avaliados os transientes de volumes de controle localizados em posições simétricas para que os resultados fossem comparados entre si. Os pontos nodais escolhidos estão localizados nos volumes de controle destacados no plano da Figura 4.68. O plano está localizado na fronteira sul do sólido, que tem como condição de contorno, fluxo zero, o que faz com que a condição de simetria inerente à geometria seja explorada. Portanto, os volumes de controle localizados neste plano não se comportam como volumes de fronteira e sim como volumes de controle no plano central do sólido.

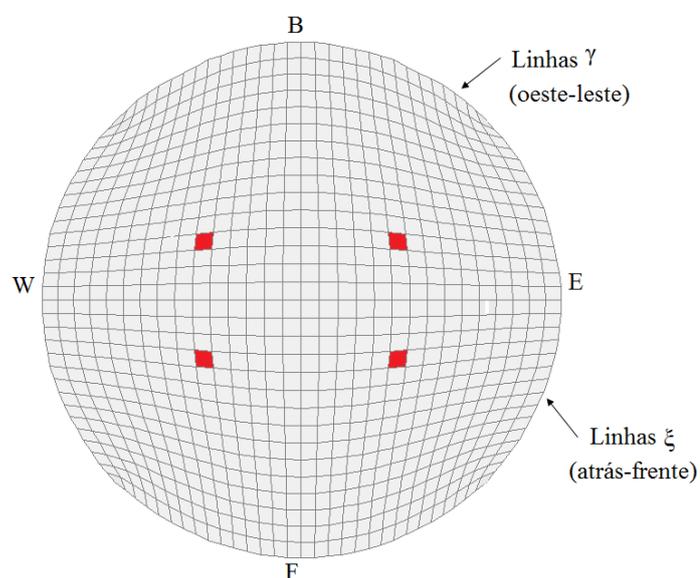


Figura 4.68 – Seção transversal do cilindro finito com destaque para os volumes de controle que tiveram seus transientes analisados.

Os volumes de controle do plano localizado na fronteira sul que tiveram seus transientes analisados são identificados por $(\xi = 10, \eta = 1, \gamma = 12)$; $(\xi = 10, \eta = 1, \gamma = 19)$; $(\xi = 21, \eta = 1, \gamma = 12)$; $(\xi = 21, \eta = 1, \gamma = 19)$. Os resultados obtidos com o código computacional desenvolvido podem ser vistos na Figura 4.69, na qual se verifica uma boa concordância entre as 4 curvas. Isto está em conformidade com o esperado, já que para este teste foi imposta uma condição de simetria, através da aplicação da mesma condição de contorno convectiva nas fronteiras leste, oeste, atrás e frente.

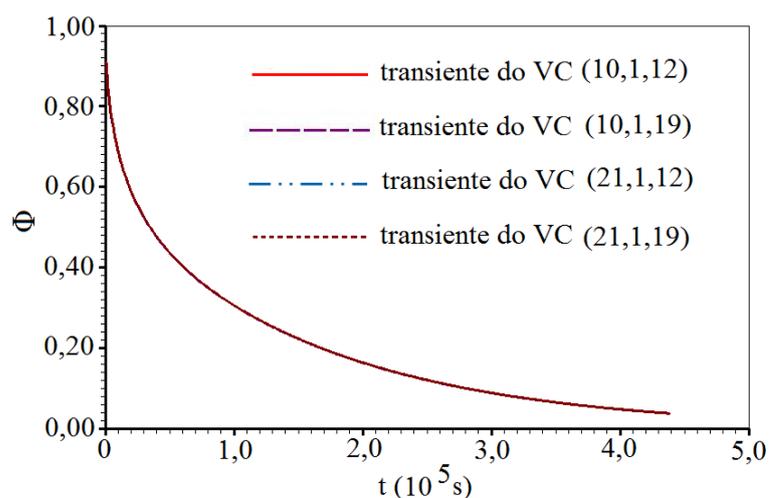


Figura 4.69 – Superposição dos transientes de Φ obtidos com o programa desenvolvido para os volumes de controle destacados no plano da Figura 4.68.

Continuando com os testes de consistência, a distribuição espacial de Φ no plano central do cilindro foi acompanhada ao longo do tempo e a Figura 4.70 mostra os resultados para os seguintes instantes: a) $t = 21924$ s; b) $t = 43848$ s; c) $t = 109620$ s; d) $t = 164430$ s e e) $t = 219240$ s.

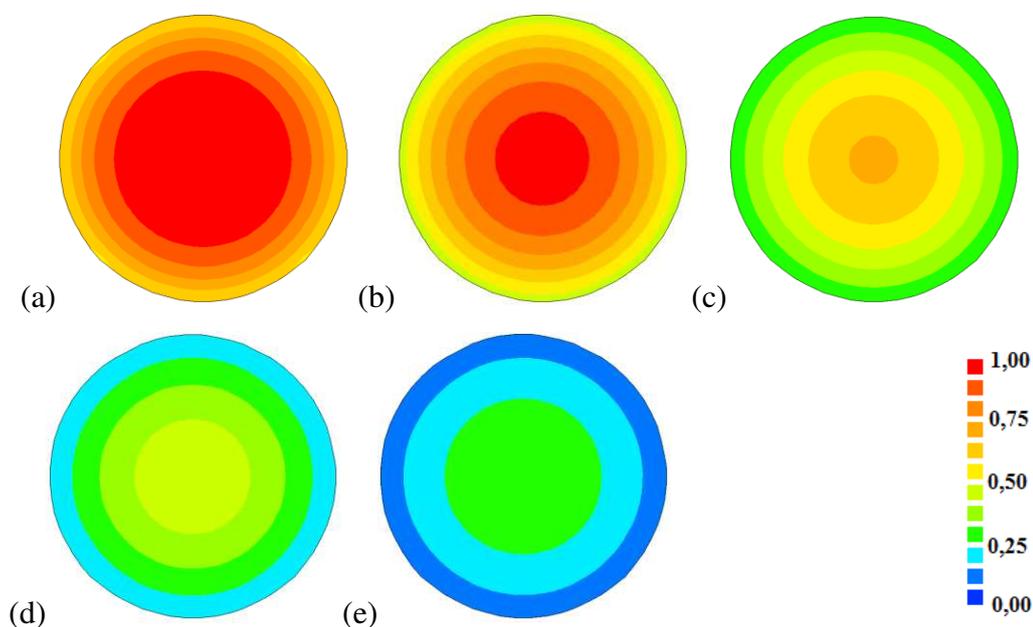


Figura 4.70 - Distribuição espacial de Φ ao longo do tempo sobre o plano central do cilindro: a) $t = 21924$ s; b) $t = 43848$ s; c) $t = 109620$ s; d) $t = 164430$ s e e) $t = 219240$ s.

Mais uma vez, verifica-se que os testes realizados para verificar a consistência do código computacional desenvolvido foram bem sucedidos, visto que os resultados mostrados, através da Figura 4.70, são coerentes e consistentes com o processo da difusão, quando se aplica a condição de contorno convectiva. A grandeza no contorno não assume o valor de equilíbrio instantaneamente, ao invés disso, ela demora um determinado intervalo de tempo até atingir esse valor, o que pode ser visto com clareza na distribuição mostrada nessa figura.

Os testes visando à validação numérica do código computacional desenvolvido tiveram início com a análise do transiente de um volume de controle no meio do sólido, sendo identificado por ($\xi = 16, \eta = 16, \gamma = 16$). No software usado para comparação, o Diffusion RE, que gerou um cilindro a partir da malha retangular mostrada na Figura 4.64, o volume de controle correspondente é identificado por ($\xi = 1, \eta = 16$). Os resultados obtidos com as duas soluções numéricas estão mostrados na Figura 4.71.

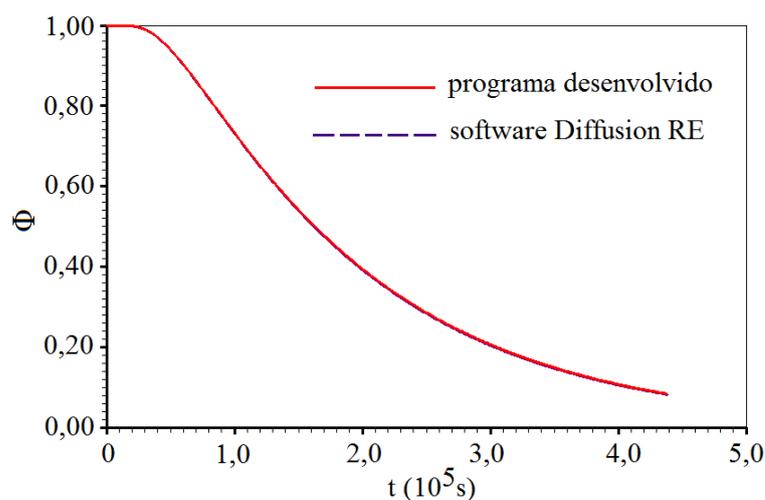


Figura 4.71 – Superposição do transiente de Φ para o volume de controle identificado por ($\xi = 16, \eta = 16, \gamma = 16$) obtido com o programa desenvolvido e com o Diffusion RE.

A Figura 4.71 mostra mais um resultado positivo em relação à validação numérica do código proposto, pois é possível verificar que houve um bom acordo entre o transiente obtido com a solução numérica proposta e aquele obtido com o Diffusion RE. Além disso, o comportamento da curva está em consonância com o fenômeno físico esperado, pois pode ser verificado que, para os instantes iniciais, o valor de Φ tem uma queda bastante suave, o que é uma característica dos volumes de controle localizados no centro do sólido (Silva, 2007).

Outro volume que teve seu transiente avaliado é identificado por $(\xi = 30, \eta = 1, \gamma = 1)$, sendo comparado com o transiente do volume de controle $(\xi = 16, \eta = 1)$ da malha retangular usada para obter um cilindro por revolução pelo software Diffusion RE, conforme está esquematizado na Figura. 4.72. Os respectivos gráficos são mostrados na Figura 4.73.

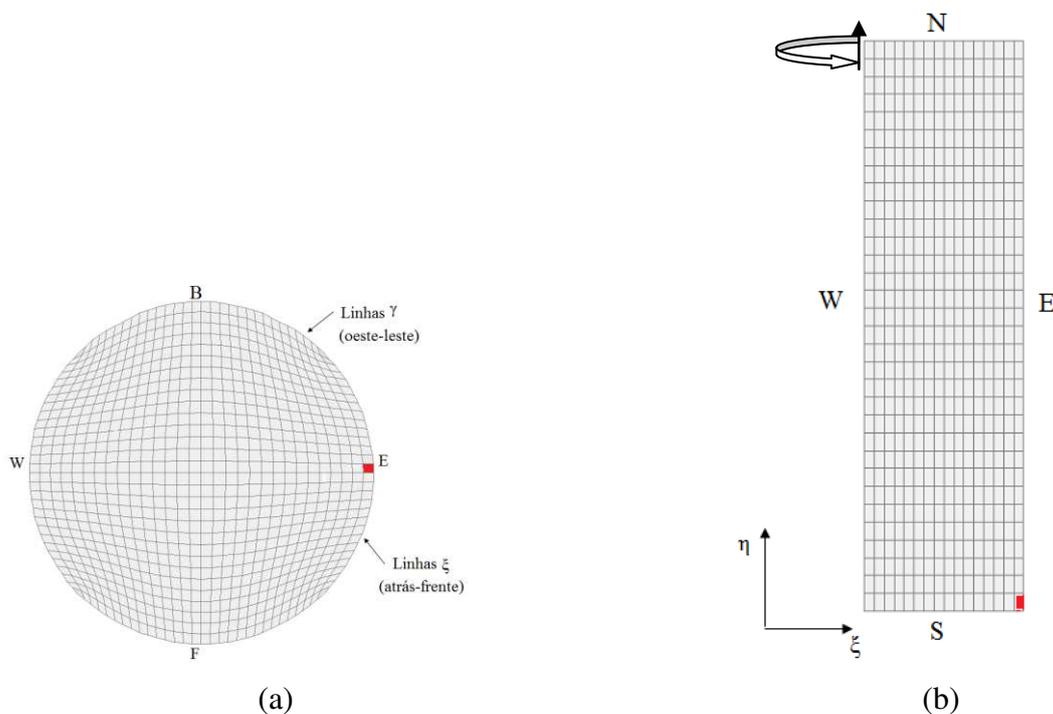


Figura 4.72 – Esquema (fora de escala) usado para estudar os transientes dos volumes de controle destacados: (a) pelo programa desenvolvido e (b) pelo software Diffusion RE.

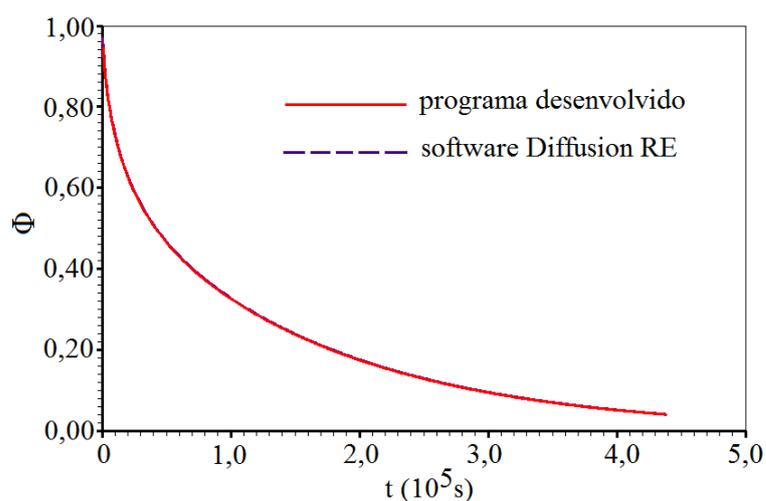


Figura 4.73 - Superposição dos transientes de Φ para os volumes de controle destacados na Figura 4.72 obtidos com o programa desenvolvido e com o Diffusion RE.

A concordância observada entre os resultados apresentados na Figura 4.73 é uma comprovação de um teste realizado com sucesso, o que é mais um indicador positivo para garantir a validação da solução numérica proposta.

Também foi analisado o valor médio de Φ em todo o domínio físico mostrado na Figura 4.67 e as curvas obtidas com as duas soluções numéricas estão apresentadas na Figura 4.74, onde se constata mais um teste com resultados positivos.

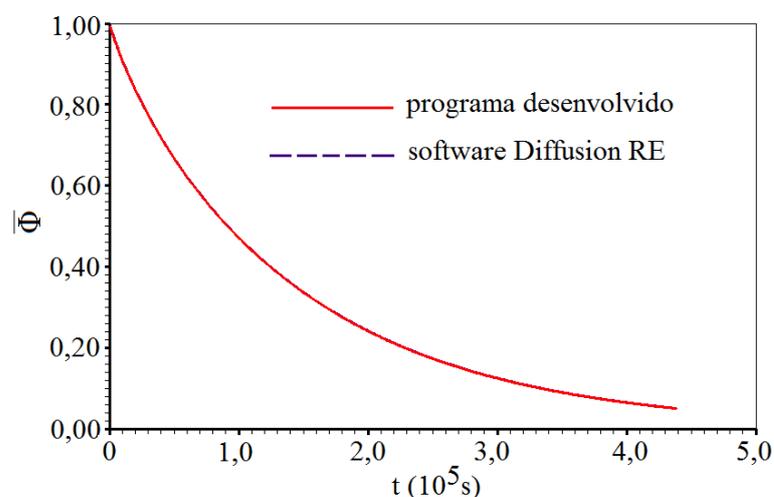


Figura 4.74 – Valor médio de Φ para o cilindro finito apresentado na Figura 4.67 obtido com o programa desenvolvido e o software Diffusion RE.

O acordo verificado na Figura 4.74 aumenta a confiança que se pode ter nos resultados numéricos obtidos com o código computacional desenvolvido neste trabalho.

Para finalizar os testes realizados usando parâmetros termofísicos e dimensões do sólido constantes, a distribuição espacial de Φ em função do raio do cilindro foi analisada e o resultado comparado com aquele proveniente do software Diffusion RE. O instante de tempo escolhido para o referido estudo foi de 109620 s. Para isto, os volumes de controle escolhidos estão localizados em uma linha correspondente a $\gamma = 16$ do plano sul da malha estudada. Os valores de ξ variaram de 16 a 30. As posições correspondentes a esses volumes na malha retangular são identificadas por $\eta = 1$ e ξ variando de 1 a 16. O esquema representando esta simulação pode ser visto na Figura 4.75, enquanto a distribuição radial de Φ obtida através das duas soluções numéricas estão superpostas na Figura 4.76.

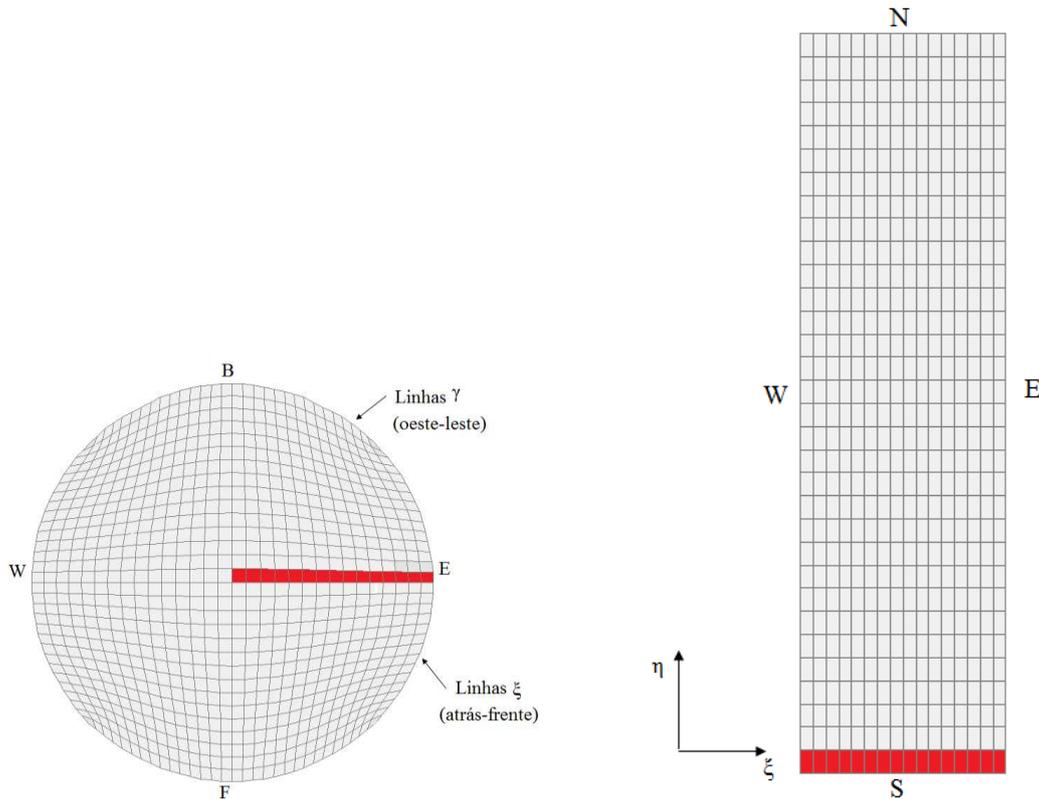


Figura 4.75 – Esquema (fora de escala) usado para analisar a distribuição radial de Φ : (a) destaque para os volumes de controle analisados pelo programa desenvolvido e (b) destaque para os volumes de controle analisados pelo software Diffusion RE.

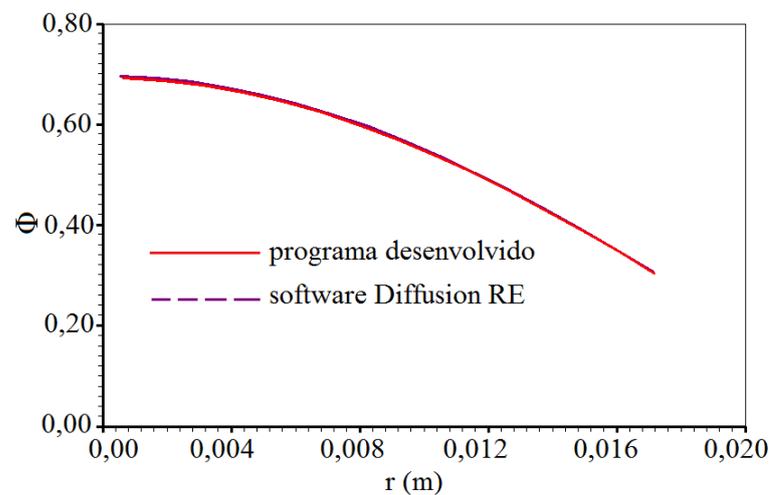


Figura 4.76 – Superposição das curvas da distribuição radial de Φ para um cilindro finito no instante $t = 109620$ s obtida via programa desenvolvido e via Diffusion RE.

Os resultados mostrados na Figura 4.76, além de validar numericamente o programa desenvolvido, estão em consonância com o processo físico da difusão (Silva, 2007), visto que o valor de Φ decresce ao longo do raio, do centro para a borda.

Os últimos resultados apresentados comprovam a validade do código computacional proposto neste trabalho para uma geometria cilíndrica. Pode-se verificar que os testes realizados e descritos detalhadamente nesta seção foram crescendo em complexidade e mesmo assim todos eles apresentaram resultados positivos, nas mais diversas formas de avaliação e comparação com outros softwares disponíveis na literatura. Por isso, neste ponto, de acordo com sugestões de Maliska (2004), é possível atestar a validação numérica do código computacional desenvolvido para resolver a equação de difusão para geometrias arbitrárias, desde que as constantes termofísicas do fenômeno difusivo e as dimensões do sólido não sofram variações no decorrer do processo.

4.2.4 Validação da solução numérica considerando dimensões e difusividade variáveis

Visando ampliar ainda mais o leque de aplicações do código numérico desenvolvido, foram realizadas algumas simulações levando em consideração as variações na difusividade do processo, representado pelo parâmetro Γ^Φ e nas dimensões do sólido.

Deve-se salientar que em um processo difusivo, tanto nos casos de aquecimento e resfriamento e, de forma bem mais acentuada, nos casos de adsorção e dessorção em geral, é observado uma variação no volume do sólido ao longo do tempo. Em adição a isto, para que a situação descrita seja mais próxima possível da situação física real, deve-se levar em consideração também as variações na difusividade durante a ocorrência do processo.

Com o intuito de validar o código numérico proposto neste trabalho, levando em consideração as variações nas dimensões do sólido e no parâmetro Γ^Φ , os resultados obtidos foram comparados com aqueles provenientes da solução numérica obtida por Silva, C. (2010) para a secagem de banana na temperatura de 29,9 °C, cuja geometria foi aproximada para um cilindro infinito. Deve-se ressaltar que para essa solução numérica, a equação de difusão foi discretizada para um cilindro infinito, sendo, portanto, unidimensional. Assim sendo, para

apreciar a variação no volume, foi considerada apenas a retração no raio, mantendo-se o comprimento do cilindro invariável.

As informações sobre os parâmetros da simulação e as dimensões iniciais do cilindro utilizados nesta simulação estão resumidas na Tabela 4.23, lembrando que para o parâmetro Γ^Φ , o valor mencionado é o valor inicial deste parâmetro, assim como, para o raio do cilindro.

Tabela 4.23 – Informações sobre a simulação de um cilindro infinito, reportadas na literatura.

Φ_i	Φ_{eq}	Γ_i^Φ (m ² h ⁻¹)	h (m h ⁻¹)	R_i (m)
1,00	0,00	2,146x10 ⁻⁶	3,83x10 ⁻⁴	1,768x10 ⁻²

As expressões utilizadas para mostrar como o raio do cilindro e o parâmetro Γ^Φ , dependem do valor da grandeza foram extraídas também do referido trabalho, onde podem ser encontrados maiores detalhes. Na Equação (4.1) está a expressão para o raio R, em m, que depende do valor médio da grandeza, enquanto a Equação (4.2) mostra a expressão para Γ^Φ , que por sua vez depende do valor local da grandeza.

$$R = 0,01613 (0,4981 + 0,5979 \bar{\Phi}) \text{ m} \quad (4.1)$$

$$\Gamma^\Phi = 3,96 \times 10^{-7} \exp(1,69\Phi) \text{ m}^2 \text{ h}^{-1} \quad (4.2)$$

As Equações (4.1) e (4.2) mostram que R e Γ^Φ seguem, naturalmente, a mesma tendência de crescimento (ou decréscimo) do valor da grandeza Φ ao longo do tempo.

A malha bidimensional que foi utilizada para gerar um cilindro infinito, explorando condições de simetria, foi obtida pelo software 2D Grid Generation e está esquematizada na Figura 4.77.

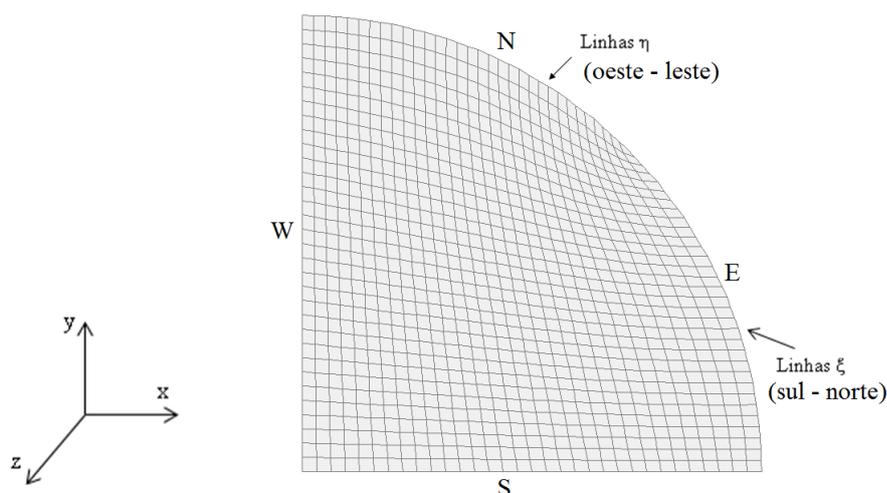


Figura 4.77 – Malha geratriz do cilindro infinito.

Com relação à discretização da equação de difusão, a quantidade estipulada para os números de linhas ξ e η é compatível com a malha utilizada por Silva, C. (2010). Assim, o domínio computacional envolveu 4000 passos no tempo para um intervalo de 0,01218 h, enquanto que o espaço foi trabalhado com 33 linhas η , 33 linhas ξ e 34 linhas γ .

No presente trabalho, o cilindro infinito foi obtido explorando as condições de simetria inerentes a uma malha plana na forma de um quarto de círculo. Esta condição de simetria requer a imposição de fluxo zero ($h=0$) nas fronteiras oeste, sul e atrás para um comprimento ao longo do eixo z de 1,0 m. Nas outras fronteiras foi empregada a condição de contorno convectiva, utilizando para a constante h , o valor informado na Tabela 4.23.

O primeiro teste realizado teve como objetivo verificar a consistência da solução numérica, para esta nova situação física. Para tal, a evolução temporal da distribuição espacial foi analisada no plano localizado atrás do cilindro ($\gamma = 1$) para vários instantes de tempo. O plano corresponde na prática a um plano localizado no centro do cilindro. Na Figura 4.78 aparecem os resultados para os seguintes instantes:

- a) $t = 1,218$ h;
- b) $t = 12,18$ h;
- c) $t = 48,72$ h.

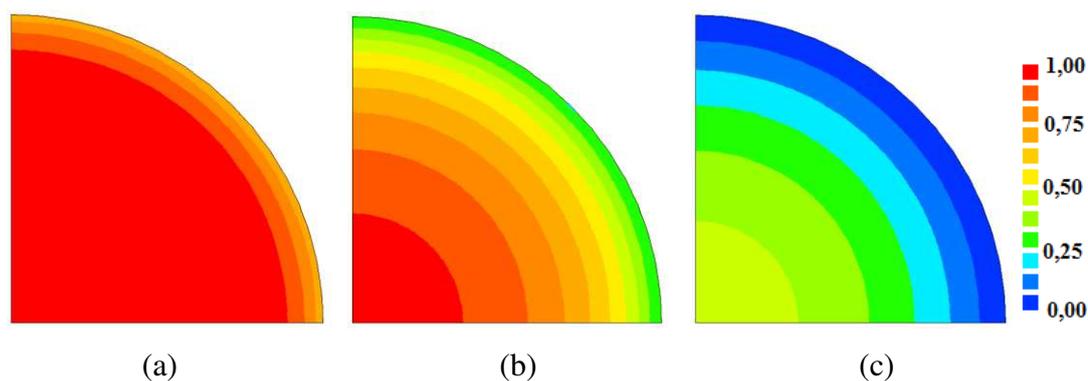


Figura 4.78 – Distribuição espacial de Φ sobre o plano que corresponde a $\gamma = 1$ para os instantes de tempo: a) $t = 1,218$ h; b) $t = 12,18$ h e c) $t = 48,72$ h.

Observa-se, pela distribuição espacial apresentada na Figura 4.78, que o código numérico forneceu uma solução em consonância com o processo físico da difusão de água, pois com a imposição do fluxo zero a oeste e ao sul, essas faces simulam o centro do cilindro (Silva, 2007; Silva, C., 2010). Logo, o transporte da grandeza nessa região ocorre de forma mais lenta quando comparada com o transporte nas outras regiões, sendo bem mais rápido no contorno, identificado, neste caso pelas faces norte e leste (ver Figura 4.77).

A evolução temporal para o raio do cilindro foi analisada e os resultados provenientes das duas soluções numéricas estão superpostos na Figura 4.79.

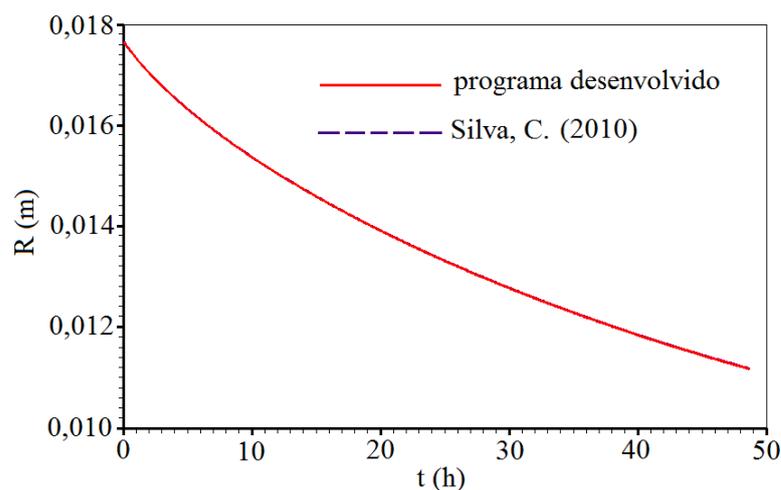


Figura 4. 79 - Raio do cilindro em função do tempo: superposição dos resultados obtidos pelas duas soluções.

A coincidência verificada nas curvas da Figura 4.79 é consequência de mais um teste com resultado satisfatório, sendo um forte indicador positivo para a validação da solução numérica proposta.

No seu trabalho, Silva, C. (2010) utilizou a mesma discretização temporal usada nesta pesquisa, enquanto que para o espaço foi utilizada uma malha com os volumes de controle numerados na direção radial, decorrente da discretização unidimensional da equação de difusão escrita em coordenadas cilíndricas. Assim, o volume de controle de número 1 está localizado no centro do cilindro. Para a solução numérica proposta no presente trabalho, o volume de controle correspondente está destacado na malha apresentada na Figura 4.80, sendo identificado por $(\xi = 1, \eta = 1, \gamma = 1)$.

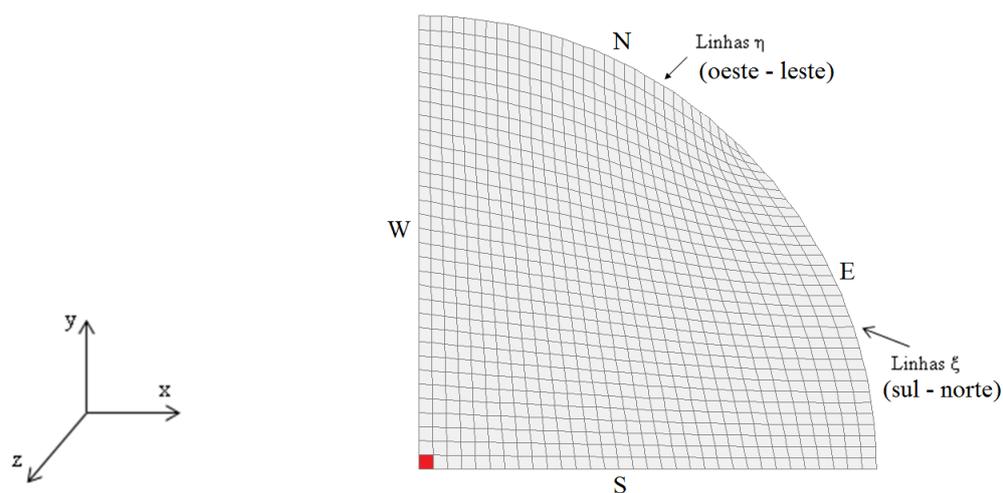


Figura 4.80 – Destaque para o volume de controle identificado por $(\xi = 1, \eta = 1, \gamma = 1)$, que teve o seu transiente analisado.

Os resultados para os transientes obtidos com as duas soluções numéricas para o volume de controle destacado na Figura 4.80 foram traçados num mesmo sistema de eixos e podem ser observados na Figura 4.81. Nesta figura verifica-se um excelente acordo entre os dois resultados, aumentando, com isso, a garantia na validação da solução numérica proposta no presente trabalho.

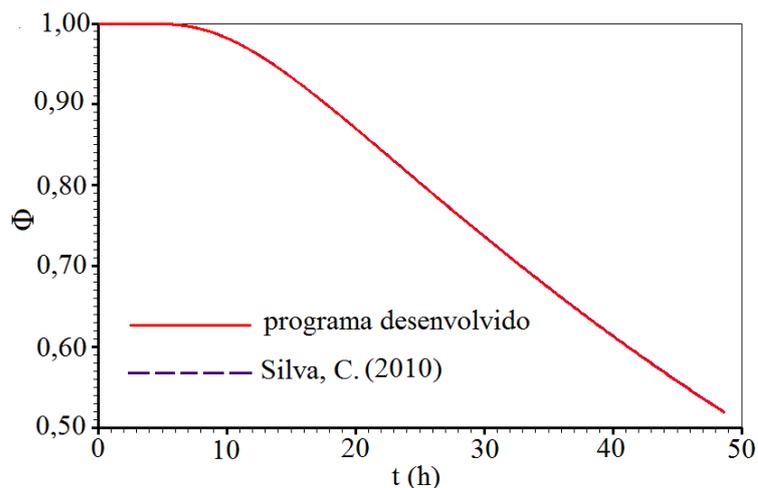


Figura 4.81 – Transiente do volume de controle destacado na Figura 4.80: superposição dos resultados obtidos pelas duas soluções numéricas.

Os resultados para o transiente do valor médio de Φ calculado na seção transversal do cilindro obtidos pelas duas soluções numéricas estão apresentados na Figura 4.82.

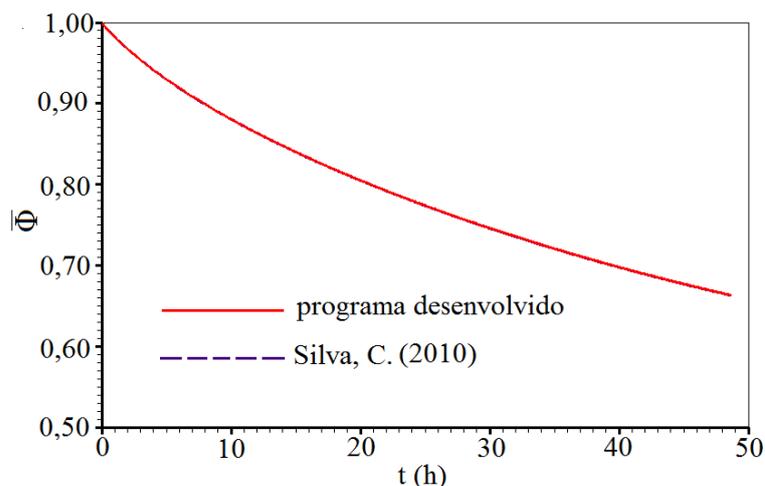


Figura 4.82 – Superposição do valor médio de Φ obtido pelas duas soluções numéricas.

A Figura 4.82 indica, mais uma vez, a coerência entre os resultados obtidos por Silva, C. (2010) e aqueles obtidos através da solução numérica proposta neste trabalho. Este último resultado é mais uma comprovação de que o programa desenvolvido é válido também quando se leva em consideração as variações no parâmetro Γ^Φ e nas dimensões do sólido.

Para avaliar o comportamento do parâmetro Γ^Φ , em um dos testes realizados, foi construída a Tabela 4.24.

Tabela 4.24 – Valores de Γ_n^Φ para VC localizados na linha identificada por ($\eta = 1$; $\gamma = 1$), em $t = 12,18$ h, obtidos com o programa desenvolvido e com o software Diffusion RE.

Posição nodal ξ	Solução proposta	Diffusion RE
1	$2,01776 \times 10^{-6}$	$2,01803 \times 10^{-6}$
2	$2,01605 \times 10^{-6}$	$2,01632 \times 10^{-6}$
3	$2,01259 \times 10^{-6}$	$2,01286 \times 10^{-6}$
4	$2,00735 \times 10^{-6}$	$2,00762 \times 10^{-6}$
5	$2,00028 \times 10^{-6}$	$2,00056 \times 10^{-6}$
6	$1,99133 \times 10^{-6}$	$1,99162 \times 10^{-6}$
7	$1,98044 \times 10^{-6}$	$1,98073 \times 10^{-6}$
8	$1,96752 \times 10^{-6}$	$1,96782 \times 10^{-6}$
9	$1,95247 \times 10^{-6}$	$1,95279 \times 10^{-6}$
10	$1,93521 \times 10^{-6}$	$1,93553 \times 10^{-6}$
11	$1,91561 \times 10^{-6}$	$1,91594 \times 10^{-6}$
12	$1,89356 \times 10^{-6}$	$1,89390 \times 10^{-6}$
13	$1,86892 \times 10^{-6}$	$1,86927 \times 10^{-6}$
14	$1,84155 \times 10^{-6}$	$1,84191 \times 10^{-6}$
15	$1,81132 \times 10^{-6}$	$1,81169 \times 10^{-6}$
16	$1,77808 \times 10^{-6}$	$1,77846 \times 10^{-6}$
17	$1,74168 \times 10^{-6}$	$1,74207 \times 10^{-6}$
18	$1,70197 \times 10^{-6}$	$1,70236 \times 10^{-6}$
19	$1,65879 \times 10^{-6}$	$1,65919 \times 10^{-6}$
20	$1,61200 \times 10^{-6}$	$1,61240 \times 10^{-6}$
21	$1,56144 \times 10^{-6}$	$1,56184 \times 10^{-6}$
22	$1,50697 \times 10^{-6}$	$1,50737 \times 10^{-6}$
23	$1,44847 \times 10^{-6}$	$1,44886 \times 10^{-6}$
24	$1,38580 \times 10^{-6}$	$1,38619 \times 10^{-6}$
25	$1,31887 \times 10^{-6}$	$1,31925 \times 10^{-6}$

A Tabela 4.24 mostra a distribuição espacial do parâmetro Γ^Φ , na face norte (n) de alguns volumes de controle delimitados pelos planos $\eta = 1$; $\eta = 2$; $\gamma = 1$; $\gamma = 2$, no instante de tempo $t = 12,18$ h. Para comparação desses valores, na mesma tabela, aparecem os dados obtidos, nas mesmas condições, através do software Diffusion RE. Com uma inspeção rápida da referida tabela, é possível afirmar, dentro de uma determinada faixa de tolerância, que os resultados podem ser considerados similares. Verifica-se que, se os valores fossem expressos com três casas decimais, os dois resultados praticamente não apresentariam diferença. Diferença essa, que não é detectada ao se traçar as curvas referentes aos dois resultados em um mesmo sistema de eixos, conforme pode ser observado nos gráficos apresentados na Figura 4.83.

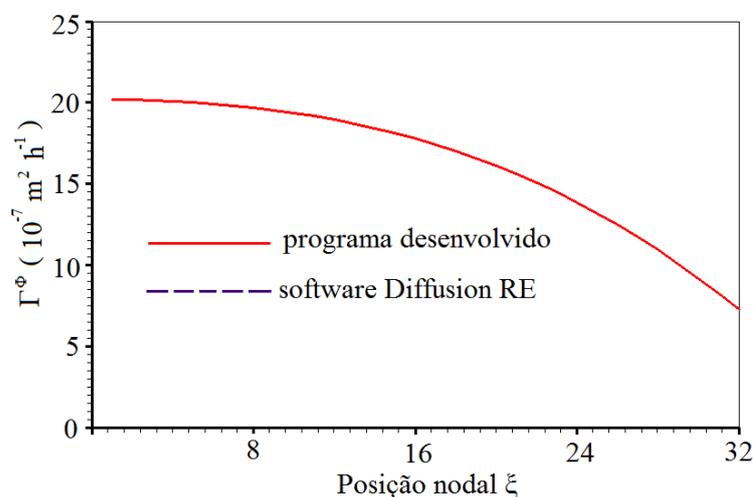


Figura 4.83 – Superposição da distribuição espacial de Γ_n^Φ , em $t = 12,18$ h, obtida via programa desenvolvido e via software Diffusion RE, para alguns volumes de controle delimitado pelos planos identificados por ($\eta = 1$; $\eta = 2$; $\gamma = 1$; $\gamma = 2$).

Uma avaliação do comportamento do parâmetro Γ^Φ em função do tempo pode ser feita através do gráfico da Figura 4.84, que mostra o resultado obtido pelo programa desenvolvido, para o referido parâmetro, no ponto nodal identificado por ($\xi = 30$, $\eta = 30$, $\gamma = 30$). Este volume de controle está localizado próximo à fronteira e, por isso espera-se que a evolução temporal do referido parâmetro apresente uma queda mais acentuada nos instantes iniciais, comportamento esperado para o transiente de Φ neste volume de controle.

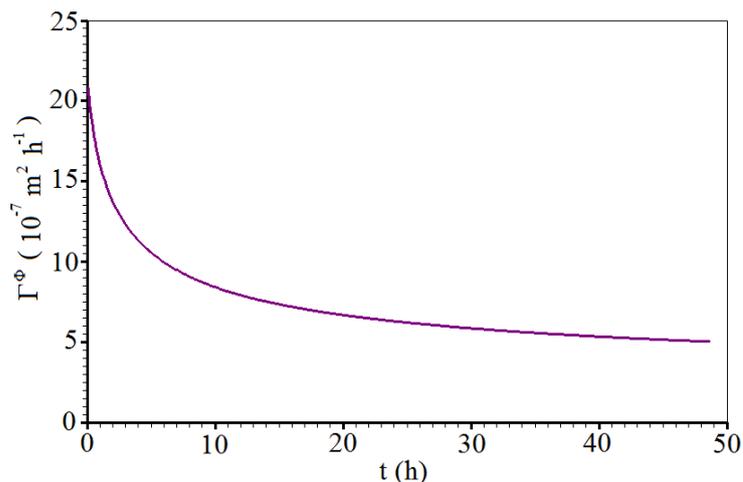


Figura 4.84 – Evolução temporal do parâmetro de transporte Γ^Φ para o ponto nodal identificado por ($\xi = 30, \eta = 30, \gamma = 30$).

A variação ocorrida no volume do cilindro aconteceu devido à retração do raio no decorrer do tempo e a evolução temporal da redução em um quarto da seção transversal pode ser observada na Figura 4.85, para diferentes instantes de tempo. Verifica-se que o encolhimento ocorre em direção ao centro do sólido.

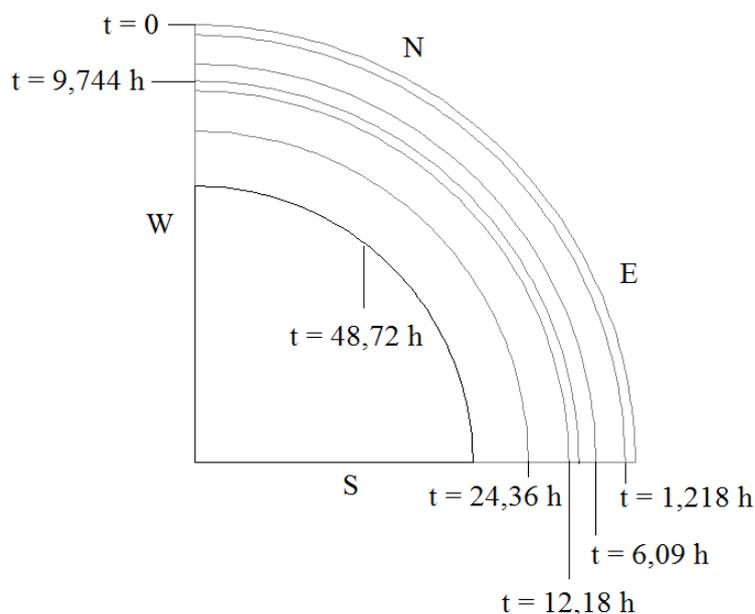


Figura 4.85 – Evolução temporal da retração sofrida por uma seção reta do cilindro infinito devido à redução no raio, para os instantes: a) $t = 0$ h; b) $t = 1,218$ h; c) $t = 6,09$ h; d) $t = 9,744$ h; e) $t = 12,18$ h; f) $t = 24,36$ h e g) $t = 48,72$ h.

Os últimos resultados apresentados, levando em consideração as variações nas dimensões do sólido e no parâmetro Γ^Φ ampliaram as possibilidades de aplicação do programa computacional desenvolvido. Neste ponto da pesquisa, com inúmeros testes realizados e todos com resultados satisfatórios, é possível afirmar que a solução numérica proposta no presente trabalho é válida para descrever o processo de difusão para um grande número de situações físicas.

4.3 Uma aplicação à secagem de sólidos cerâmicos

Visando testar o código computacional proposto, foi feito um estudo de caso usando resultados experimentais da secagem de materiais cerâmicos, mais precisamente de corpos de prova na forma de telhas moldadas com argila vermelha. As metodologias desenvolvidas neste trabalho para a simulação da cinética do transporte difusivo em produtos com a forma geométrica arbitrária são empregadas para determinar valores ótimos para a difusividade efetiva de massa e para a constante de transferência convectiva de massa, a partir de dados experimentais. Tais metodologias também são empregadas para simular a cinética de secagem das telhas usando os valores dos parâmetros determinados via otimização. O primeiro modelo adotado considerou os parâmetros de transporte constantes e não levou em consideração as variações nas dimensões do sólido. No segundo modelo, foram incluídas a retração dos corpos, bem como a variação na difusividade efetiva de massa.

4.3.1 Dados experimentais

A Tabela 4.25 mostra a composição química da matéria-prima utilizada na confecção das telhas cerâmicas usadas nos experimentos realizados em estufa.

Tabela 4.25 - Composição química da argila

Componentes	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	MgO	K ₂ O	CaO	TiO ₂	P.F.*	Outros
Composição química (%)	41,80	22,09	10,43	3,79	2,69	1,25	1,00	16,32	0,62

*Perda ao Fogo

Após uma análise da Tabela 4.25, verifica-se que o material argiloso apresenta uma composição típica de cerâmica vermelha, sendo constituída principalmente de sílica (41,80%) e alumínio (22,09%), possuindo outros constituintes com percentuais menores como, por exemplo, K_2O (2,69%). A quantidade de Óxido de Cálcio e Óxido de Magnésio presentes na argila são 1,25 e 3,79%, respectivamente. O teor de Óxido de Ferro (Fe_2O_3) presente na matéria-prima apresenta um percentual de 10,43% que, após a queima, apresenta coloração avermelhada.

A Figura 4.86 mostra a curva de distribuição granulométrica da argila e curva cumulativa.

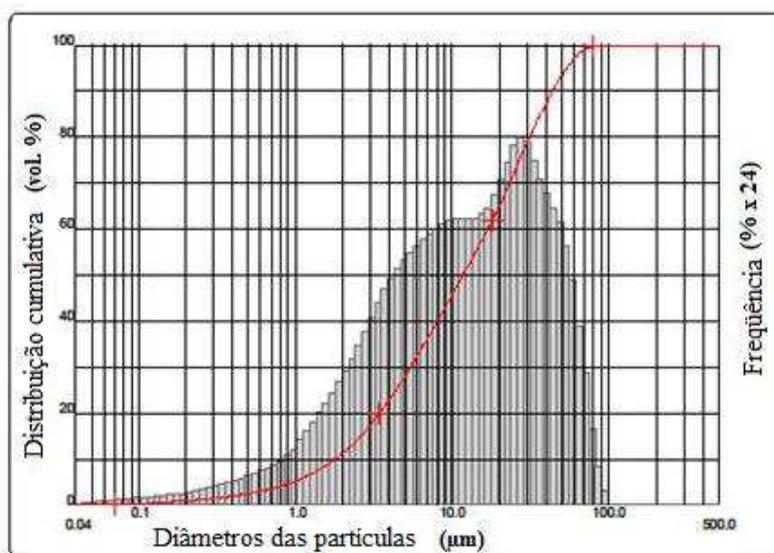


Figura 4.86 – Distribuição granulométrica da argila e curva cumulativa.

Analisando os resultados apresentados na Figura 4.86, verifica-se que a matéria-prima apresenta uma larga faixa de distribuição granulométrica que varia de 0,1 a 100 µm, com D_{10} de 1,78 µm, D_{50} de 11,69 µm, D_{90} de 44,04 µm, e um diâmetro médio de 17,90 µm.

Informações sobre as condições de secagem das telhas cerâmicas para as cinco temperaturas distintas estão disponíveis na Tabela 4.26, enquanto os dados experimentais relativos à cinética de secagem para a temperatura de 55,6 °C estão dispostos na Tabela 4.27. A Tabela 4.26 mostra, para cada temperatura de secagem, as dimensões iniciais das telhas, o teor de umidade inicial (base seca) e o teor de umidade de equilíbrio (base seca).

Tabela 4.26 - Temperatura de secagem (T); teor de umidade inicial (M_i), teor de umidade equilíbrio (M_{eq}) e dimensões iniciais das telhas.

T (°C)	M_i (b.s.)	M_{eq} (b.s.)	Espessura (m)	Largura (m)	Comprimento (m)
55,6	0,2381	0,0133	$6,02 \times 10^{-3}$	$46,16 \times 10^{-3}$	$86,74 \times 10^{-3}$
69,7	0,2418	0,0066	$6,26 \times 10^{-3}$	$45,26 \times 10^{-3}$	$83,92 \times 10^{-3}$
72,8	0,2345	0,0049	$6,40 \times 10^{-3}$	$45,51 \times 10^{-3}$	$83,36 \times 10^{-3}$
82,7	0,2405	0,0020	$6,45 \times 10^{-3}$	$46,47 \times 10^{-3}$	$78,62 \times 10^{-3}$
98,6	0,2404	0,0000	$6,24 \times 10^{-3}$	$46,45 \times 10^{-3}$	$70,48 \times 10^{-3}$

Tabela 4.27 - Dados experimentais relativos à cinética de secagem para T = 55,6 °C.

t (min)	m(g)	C (mm)	L (mm)	E (mm)	\bar{M} (b.s.)	\bar{MR} (b.s.)
0,0	62,273	86,74	46,16	6,02	0,23810	1,000000
12,0	60,442	85,46	45,28	5,82	0,20170	0,838077
25,0	58,654	84,70	44,54	5,48	0,16620	0,680158
40,0	56,704	82,93	43,92	5,37	0,12740	0,507559
55,0	55,257	82,66	43,54	5,55	0,09864	0,379623
80,0	53,807	82,91	43,43	5,31	0,06981	0,251375
105,0	52,943	82,45	43,38	5,37	0,05263	0,174951
125,0	52,520	82,43	42,89	5,40	0,04422	0,137540
155,0	52,080	82,77	43,34	5,48	0,03547	0,098616
185,0	51,790	82,60	43,37	5,33	0,02970	0,072949
215,0	51,595	82,58	43,25	5,14	0,02583	0,055733
275,0	51,358	82,51	43,29	5,37	0,02112	0,034781
425,0	51,083	82,53	43,03	5,53	0,01565	0,010448
545,0	51,010	82,68	43,15	5,53	0,01420	0,003998

Na Tabela 4.27, as grandezas C, L e E, representam, respectivamente, o comprimento, a largura e a espessura da telha. Para esta temperatura, a massa de equilíbrio, medida em $t = 2045$ minutos, foi $m_{eq} = 50,965$ g, enquanto que a massa seca foi $m_s = 50,296$ g.

A Tabela 4.27 contém também as massas e as dimensões das telhas medidas ao longo do tempo, o teor de umidade médio (\overline{M}) e a razão de umidade média, \overline{MR} , calculada como:

$$\overline{MR} = \frac{\overline{M}(t) - M_{eq}}{M_i - M_{eq}} \quad (4.3)$$

Inicialmente, os dados (t , \overline{MR}) foram utilizados para a determinação dos parâmetros de processo para esta temperatura de secagem. Como as incertezas dos pontos experimentais não foram determinadas, todos os pesos estatísticos foram considerados iguais a 1, o que significa $\sigma = 1$. Isto corresponde a minimizar o resíduo na Equação (3.137).

Para a temperatura de 69,7 °C, os dados experimentais encontram-se na Tabela 4.28.

Tabela 4.28 - Dados experimentais relativos à cinética secagem para T = 69,7 °C.

t (min)	m (g)	C (mm)	L (mm)	E (mm)	\overline{M} (b.s.)	\overline{MR} (b.s.)
0,0	58,984	83,92	45,26	6,26	0,24180	1,000000
12,0	56,771	80,98	43,75	5,65	0,19520	0,801862
22,0	54,923	80,28	43,21	5,54	0,15630	0,636463
32,0	53,368	79,24	42,57	5,51	0,12360	0,497426
42,0	52,106	79,02	42,45	5,47	0,09699	0,384283
52,0	51,212	79,75	42,16	5,49	0,07817	0,304263
62,0	50,606	78,26	42,36	5,60	0,06541	0,250009
72,0	50,180	78,66	42,50	5,47	0,05644	0,211869
92,0	49,522	78,86	42,42	5,44	0,04259	0,152980
112,0	49,104	79,42	42,37	5,41	0,03379	0,115564
142,0	48,687	79,44	42,11	5,49	0,02501	0,078232
172,0	48,434	79,24	42,12	5,45	0,02011	0,057398
202,0	48,278	79,05	42,30	5,44	0,01640	0,041623
272,0	48,084	78,86	42,32	5,42	0,01232	0,024276
452,0	47,916	79,69	42,20	5,55	0,08779	0,009220
632,0	47,862	79,76	42,11	5,43	0,07642	0,004385

Para esta temperatura, a medida da massa de equilíbrio, realizada no instante de tempo igual a 2072 minutos foi 47,813 g, enquanto a da massa seca foi 47,499 g.

Os dados experimentais relativos à cinética de secagem para a temperatura de 72,8 °C estão dispostos nas Tabelas 4.29. Para esta temperatura a massa inicial da telha foi de 58,766 g, enquanto que a medida da massa de equilíbrio foi de 47,840 g, medida em $t = 1939$ minutos. Para a massa seca, a medida foi de 47,605 g.

Tabela 4.29 - Dados experimentais relativos à cinética secagem para $T = 72,8$ °C.

t (min)	m (g)	C (mm)	L (mm)	E (mm)	\bar{M} (b.s.)	\overline{MR} (b.s.)
0,0	58,766	83,36	45,51	6,40	0,23450	1,000000
14,0	56,166	81,94	43,67	5,71	0,17980	0,761722
29,0	53,542	80,63	43,02	5,59	0,12470	0,521701
44,0	51,725	80,92	42,97	5,58	0,08655	0,355516
59,0	50,598	80,29	42,66	5,54	0,06287	0,252364
79,0	49,752	80,16	42,30	5,50	0,04510	0,174956
99,0	49,226	79,80	42,48	5,57	0,03405	0,126821
139,0	48,667	79,68	42,35	5,42	0,02231	0,075681
169,0	48,417	79,38	42,54	5,60	0,01706	0,052811
199,0	48,274	79,92	42,69	5,53	0,01405	0,039699
259,0	48,108	79,92	42,68	5,52	0,01057	0,024540
319,0	48,025	80,02	42,68	5,50	0,08823	0,016930
499,0	47,920	80,76	42,54	6,00	0,06617	0,007321

Vale salientar que os dados experimentais obtidos para esta temperatura não foram utilizados no processo de otimização para determinação dos parâmetros de transporte. Ao invés disso, eles foram usados para testar as expressões determinadas para a difusividade efetiva de massa D_{ef} , dada pela Equação (3.141) e para a constante de transferência convectiva h , dada pela Equação (3.142). A equação de Arrhenius foi ajustada aos valores obtidos por otimização para as outras temperaturas e em seguida utilizada para determinar os parâmetros de transporte e conseqüentemente simular a cinética de secagem para esta temperatura.

Os dados experimentais relativos à cinética de secagem para a temperatura de 82,7 °C encontram-se dispostos na Tabela 4.30. Para esta temperatura, a massa inicial da telha foi de 55,491 g, enquanto que o valor medido para a massa de equilíbrio foi de 44,822 g, medida em $t = 1910$ min. Para a massa seca, a realização da medida forneceu um valor de 44,731 g.

Tabela 4.30 - Dados experimentais relativos à cinética secagem para $T = 82,7$ °C.

t (min)	m (g)	C (mm)	L (mm)	E (mm)	\bar{M} (b.s.)	\bar{MR} (b.s.)
0,0	55,491	78,62	46,47	6,45	0,240500	1,000000
10,0	53,317	77,29	45,17	5,93	0,191900	0,796197
20,0	51,265	75,12	44,05	5,73	0,146100	0,604136
30,0	49,498	75,70	43,48	5,43	0,106600	0,438493
40,0	48,345	75,75	42,78	5,43	0,080790	0,330260
50,0	47,548	75,92	42,87	5,39	0,062980	0,255574
60,0	47,011	75,59	43,00	5,41	0,050970	0,205210
70,0	46,634	75,60	42,90	5,37	0,042540	0,169859
80,0	46,316	75,69	43,03	5,33	0,035430	0,140044
100,0	45,872	75,15	43,16	5,29	0,025510	0,098445
130,0	45,471	75,55	42,88	5,27	0,016540	0,060829
160,0	45,256	75,52	42,81	5,25	0,011740	0,040700
190,0	45,151	75,58	42,78	5,19	0,009390	0,030846
250,0	45,027	75,53	42,71	5,35	0,006617	0,019217
310,0	44,962	75,51	42,66	5,45	0,005164	0,013124
470,00	44,889	75,58	43,09	5,28	0,003532	0,006280

A última temperatura a ter os dados experimentais coletados foi a de 98,6 °C. Para esta temperatura, a massa inicial da telha foi de 49,588 g, enquanto que um valor de 39,977 g foi medido tanto para a massa seca como para a massa de equilíbrio. Esta medição foi realizada no instante $t = 1837$ min. Os dados experimentais relativos à cinética de secagem encontram-se na Tabela 4.31.

Tabela 4.31 - Dados experimentais relativos à cinética secagem para $T = 98,6$ °C.

t (min)	m (g)	C (mm)	L (mm)	E (mm)	\bar{M} (b.s.)	\bar{MR} (b.s.)
0,0	49,588	70,48	46,45	6,24	0,240400	1,000000
4,0	48,564	69,64	46,09	5,93	0,214800	0,893511
10,0	47,452	68,46	45,75	5,73	0,175700	0,730865
22,0	46,494	67,60	44,50	5,61	0,112300	0,467138
32,0	43,142	67,71	43,36	5,57	0,079170	0,329326
42,0	42,302	67,65	43,24	5,56	0,058160	0,241930
52,0	41,760	67,43	42,77	5,45	0,044600	0,185524
62,0	41,334	67,76	43,09	5,39	0,033940	0,141181
77,0	40,904	67,65	43,24	5,56	0,023310	0,096963
97,0	40,560	67,56	43,21	5,54	0,014580	0,060649
127,0	40,312	67,44	43,12	5,52	0,008380	0,034859
157,0	40,197	67,31	43,08	5,50	0,005503	0,022891
217,0	40,096	67,22	43,01	5,53	0,002977	0,012384
337,0	40,026	67,29	43,01	5,40	0,001226	0,005100

4.3.2 Resultados da análise da cinética de secagem para telhas cerâmicas usando a solução numérica proposta

A aplicação do código computacional desenvolvido neste trabalho na secagem de telhas cerâmicas pressupõe que as seguintes hipóteses sejam assumidas:

- O sólido é considerado homogêneo e isotrópico.
- O campo do teor de umidade é axi-simétrico com relação aos eixos x e z. Assim, a malha gerada representa $\frac{1}{4}$ da telha, o que resulta num menor esforço computacional para um melhor refinamento da malha.
- O campo do teor de umidade é uniforme no início da secagem.
- O único mecanismo de transporte de massa no interior do sólido é o mecanismo da difusão líquida.

- Para todos os contornos das telhas cerâmicas é suposto o mesmo valor para o coeficiente de transferência convectiva de massa, que é admitido constante;
- A difusividade efetiva de uma dada massa numa dada posição ou é constante ou depende somente do teor de umidade naquele ponto;
- No caso da inclusão de variação no volume da telha ao longo da simulação, considera-se que a sua forma não seja alterada, mas apenas as suas dimensões são reduzidas.

4.3.2.1 Refinamento de malha e de tempo

Os resultados numéricos obtidos a partir da discretização de uma equação diferencial parcial são influenciados pelo número de volumes de controle que irá formar a malha numérica e do intervalo de tempo Δt estabelecido para a discretização temporal da equação diferencial. Para uma escolha otimizada destes valores, vários estudos foram feitos, considerando as dimensões do sólido e os parâmetros de transporte constantes e empregando a condição de contorno do terceiro tipo ou convectiva.

Com o objetivo de realizar um refino no intervalo de tempo, foram utilizados os dados experimentais para a temperatura de 55,6 °C, que estão dispostos na Tabela 4.27. Para fazer este estudo, foi utilizada uma malha base inicial dividida em 10 volumes de controle, tanto para a largura quanto para o comprimento da telha, enquanto a espessura foi dividida em 5 volumes de controle. A determinação dos parâmetros de interesse obedeceu à metodologia estabelecida na Seção 3.7, tendo sido obtido os seguintes valores para os indicadores estatísticos: $\chi^2 = 4,0796 \times 10^{-3}$ e $R^2 = 0,9988114$. O valor médio da grandeza foi calculado para dois instantes arbitrariamente escolhidos, $t = 5,45$ min e $t = 109$ min para várias discretizações no tempo e os resultados são apresentados nas Tabelas 4.32 e 4.33.

Tabela 4.32 – Refino do intervalo de tempo para a malha tridimensional 10x5x10 em $t = 5,45$ min.

Passo	500	1000	2000	4000	5000	10000
$\Delta t(\text{min})$	1,0900	0,54500	0,27250	0,13625	0,10900	0,05450
$\bar{\Phi}(t)$	0,9129740	0,9125644	0,9123466	0,9122537	0,9122330	0,9121913

Tabela 4.33 – Refino do intervalo de tempo para a malha tridimensional 10x5x10 em $t = 109,0$ min.

Passo	500	1000	2000	4000	5000	10000
$\Delta t(\text{min})$	1,0900	0,54500	0,27250	0,13625	0,10900	0,05450
$\bar{\Phi}(t)$	0,1697606	0,1686485	0,1676991	0,1676618	0,1675960	0,1671697

Observando as Tabelas 4.32 e 4.33, pode-se afirmar que, para uma tolerância de 10^{-3} , pode-se utilizar na análise dos dados experimentais, um intervalo de 0,5450 min, com um número de 1000 para a discretização no tempo. Para os casos em que haja necessidade de um refinamento maior no tempo, pode-se estabelecer uma tolerância de 10^{-4} , o que resulta em 2000 passos no tempo para um intervalo de 0,2725 min.

Para o intervalo de tempo estabelecido em 0,545 min, foi feito um estudo de refino de malha com $t = 5,45$ min, cujo resultado é apresentado na Tabela 4.34.

Tabela 4.34 – Refino de malha com $\Delta t = 0,5450$ min em $t = 5,45$ min.

Malha	10x5x10	14x12x14	20x10x20	20x20x20	28x12x28	28x24x28
$\bar{\Phi}(t)$	0,9130918	0,9129178	0,9128105	0,9127487	0,9127471	0,9127047

Para as três primeiras malhas mostradas na Tabela 4.34, a diferença do valor médio da grandeza calculada para duas malhas consecutivas apresenta um valor maior que 1×10^{-4} . A partir da malha 20x20x20, essa diferença cai para um valor menor que 1×10^{-4} .

Quanto ao esforço computacional, para a malha 28x24x28, o tempo gasto na simulação da cinética de secagem foi de 15 minutos, utilizando 1000 passos no tempo. Para a malha 20x20x20, o tempo de simulação foi cerca de 5 minutos para o mesmo número de passos no tempo. No caso da malha 10x4x10, o tempo gasto na simulação levou menos de 1 minuto. No entanto, os resultados obtidos com esta malha não foram muito satisfatórios, havendo divergência entre a curva simulada e os dados experimentais. Portanto, a análise final mostra que uma malha 20x20x20 com 1000 passos no tempo apresenta resultados

satisfatórios. Análises e conclusões semelhantes para o refino de malha são encontradas em Nascimento (2002) ao estudar a secagem de tijolos na forma de paralelepípedo.

Embora o estudo de refino de tempo e de malha tenha sido feito para a temperatura de 55,6 °C, estes resultados serão utilizados na análise dos dados experimentais coletados para as outras temperaturas, a menos de uma indicação em contrário.

Na Figura 4.87 está apresentada a malha bidimensional obtida com o software 2D Grid Generation e que foi usada como geratriz da malha tridimensional, a ser obtida por extrusão no próprio código desenvolvido.

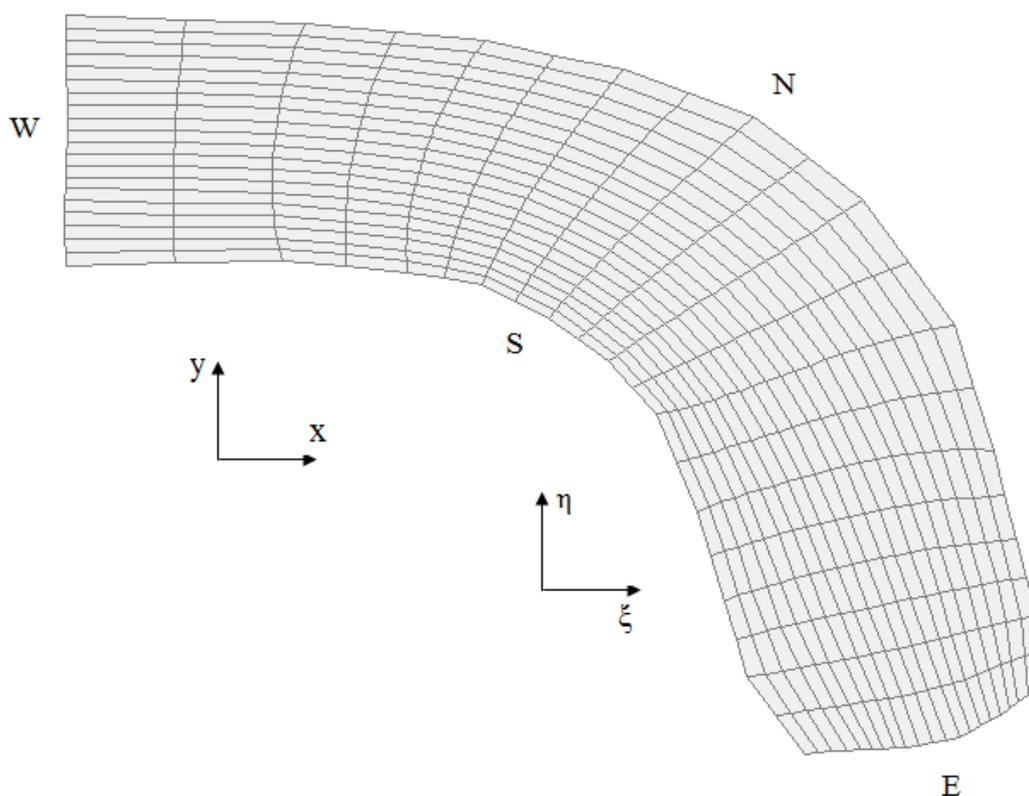


Figura 4.87 – Malha bidimensional 20X20 geratriz da malha 3D para as telhas cerâmicas.

4.3.2.2 Análise numérica considerando difusividade efetiva e volume constantes

Uma vez que os parâmetros D_{ef} e h foram determinados por otimização, o teor de umidade médio para cada instante pode ser calculado pela Equação (3.129), para cada

temperatura. Assim sendo, usando os resultados obtidos do estudo para o refino de tempo e da malha, e para os parâmetros de transporte da seção anterior, foi feita a simulação da cinética de secagem para a temperatura de 55,6 °C. Os resultados podem ser observados na Figura 4.88. Neste gráfico, podem ser vistos, também, os indicadores estatísticos do ajuste, os quais podem ser considerados razoáveis.

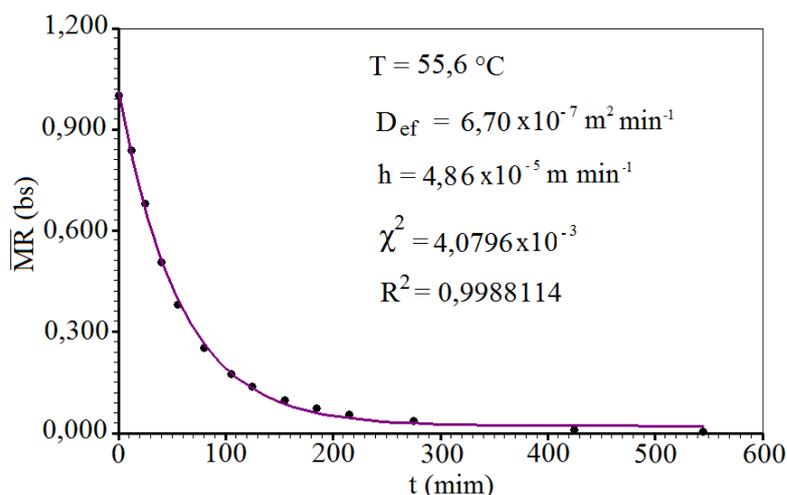


Figura 4.88 – Razão de umidade média obtida com a solução proposta e os dados experimentais, considerando volume e parâmetros termofísicos constantes para uma temperatura de secagem de 55,6 °C.

Uma inspeção na Figura 4.88, possibilita concluir que existe uma boa concordância entre dados experimentais e simulação nos instantes iniciais até cerca de 100 min. A partir deste instante, até 300 min aproximadamente, percebe-se certa discrepância entre os resultados simulados e os dados experimentais, indicando que a difusividade efetiva neste intervalo de tempo deveria ter um valor menor do que nos instantes iniciais.

A obtenção de informações sobre como o teor de umidade é distribuído no interior e no contorno do sólido é importante, porque essas diferenças geram tensões que podem provocar danos ao produto, tais como trincas, fissuras ou deformações (Nascimento, 2002). Assim, foi analisada a distribuição espacial da razão de umidade no sólido para algumas seções transversais em alguns instantes de tempo escolhidos arbitrariamente.

Os gráficos apresentados na Figura 4.89 detalham a evolução temporal da distribuição de água nos volumes de controle localizados no plano identificado por $\gamma = 1$, que devido à condição de simetria imposta, corresponde ao plano central da telha, para os seguintes instantes de tempo: a) 4,36 min; b) 21,80 min; c) 49,05 min e d) 109,00 min.

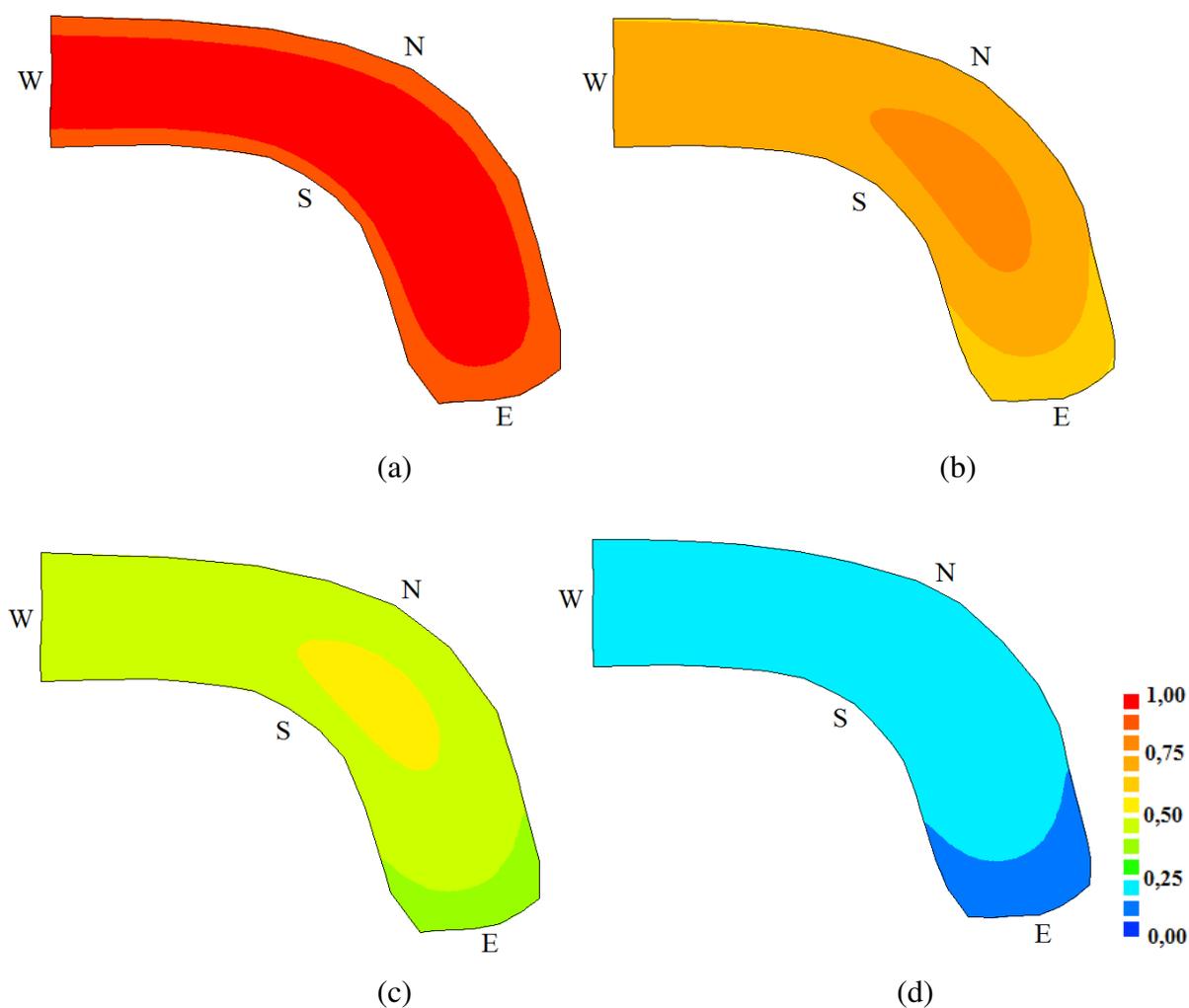


Figura 4.89 – Distribuição da razão de umidade no plano central de uma telha cerâmica, considerando parâmetros de transporte e volume constantes, para uma temperatura secagem de $55,6\text{ }^{\circ}\text{C}$ nos seguintes instantes: (a) 4,36 min; (b) 21,80min; (c) 49,05 min e (d) 109,0 min.

Através de uma inspeção na Figura 4.89, pode-se perceber a diferença entre as cinéticas de secagem dos volumes de controle localizados no interior do sólido daqueles situados nas fronteiras. Nota-se que os volumes de controle localizados na face leste são os que secam de forma mais rápida, já que além de serem volumes de fronteira, estão localizados numa região mais estreita. Nos instantes iniciais, nota-se também, uma ligeira assimetria na

distribuição de água em relação às faces sul e norte. A face mais interna (sul) seca mais lentamente do que a face mais externa (norte). Isto se deve ao fato de que a face norte possui uma maior área de contato com o meio e, conseqüentemente, uma maior transferência de água. Para o instante 109,0 min, percebe-se que os volumes de controle internos, bem como os volumes localizados nas faces norte e sul, possuem uma distribuição quase uniforme da razão de umidade, diferenciando-se dos volumes de controle localizados na fronteira leste.

Na Figura 4.90, pode-se ver a distribuição da razão de umidade para o instante de tempo igual a 4,36 min, nos volumes de controle localizados em alguns planos da telha.

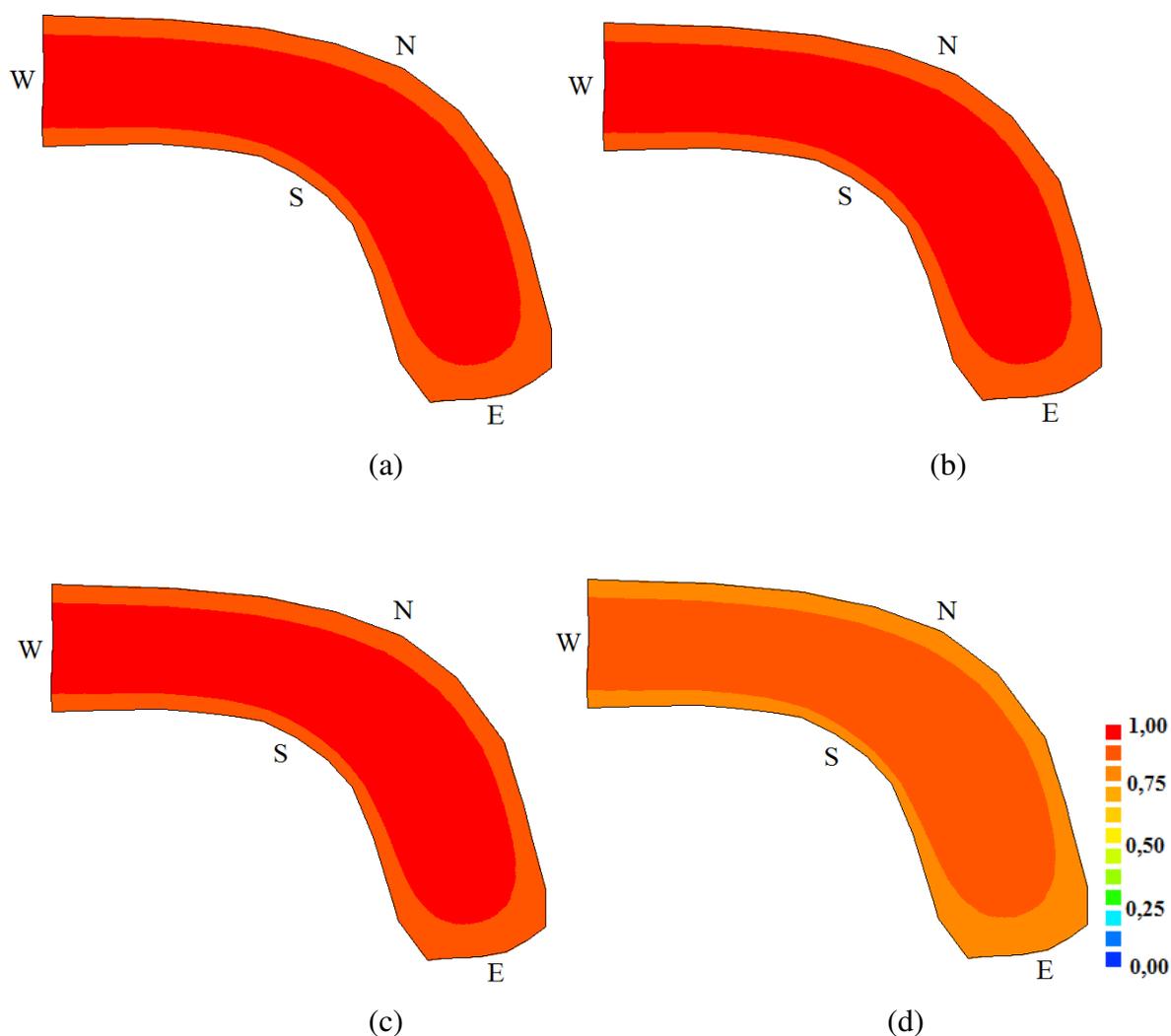


Figura 4.90 – Distribuição da razão de umidade de uma telha cerâmica no instante de tempo 4,36 min, considerando parâmetros de transporte e volume constantes, para uma temperatura de secagem de 55,6 °C nos seguintes planos: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 5$; (c) $\gamma = 10$ e (d) $\gamma = 20$.

Fazendo uma análise dos gráficos apresentados na Figura 4.90, pode-se concluir que, para os instantes iniciais do processo, os planos localizados no interior da telha possuem praticamente o mesmo perfil da distribuição espacial da razão de umidade, o que é comprovado pelas Figuras 4.90a a 4.90c. Por outro lado o plano localizado na face frontal do sólido possui uma maior velocidade de secagem, e, conseqüentemente um menor teor de umidade para todos os volumes localizados no referido plano.

Na Figura 4.91 está apresentada a distribuição espacial da razão de umidade para os mesmos planos da Figura 4.90, desta vez para um instante de tempo maior: $t = 109,0$ min.

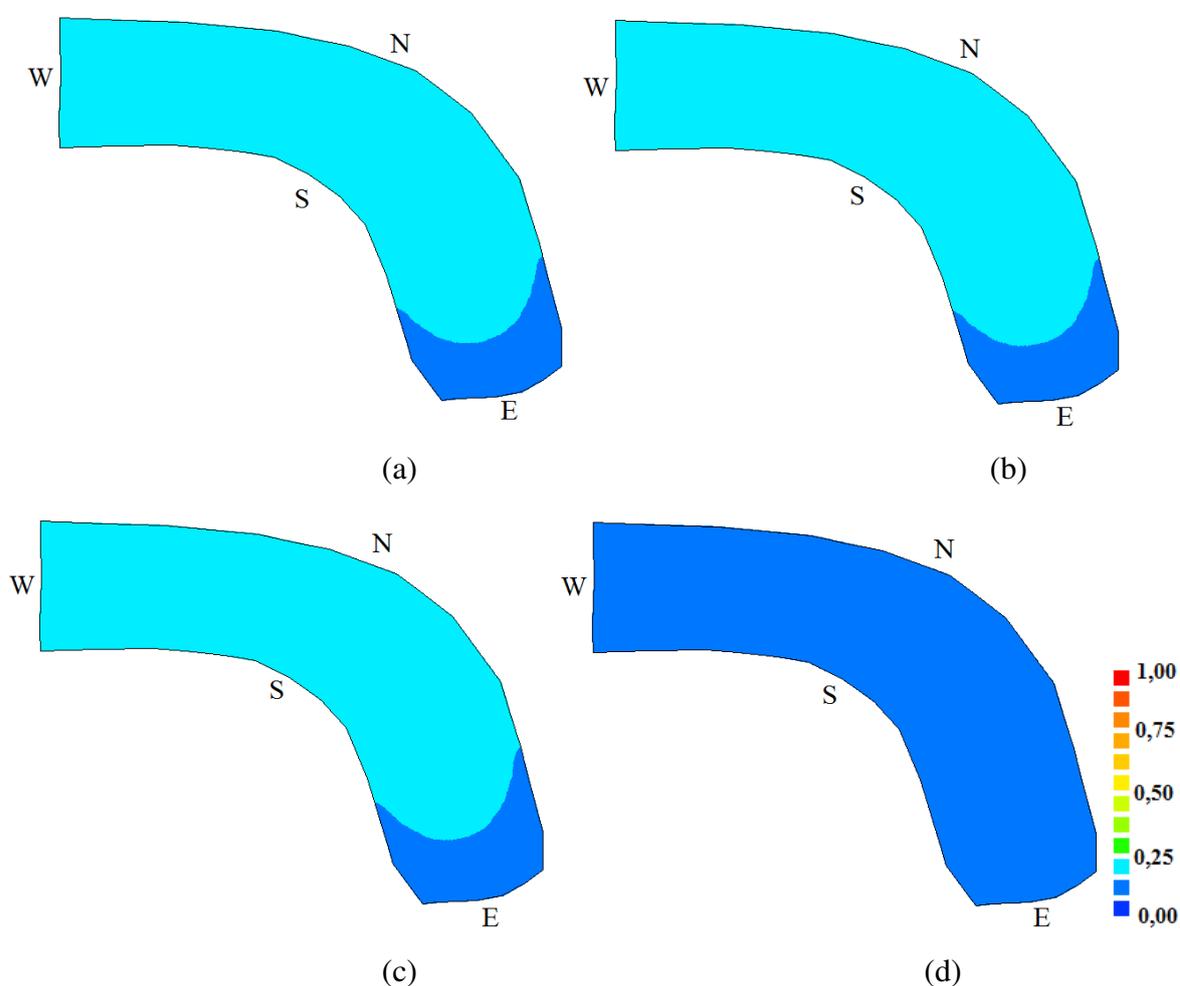


Figura 4.91 – Distribuição da razão de umidade de uma telha cerâmica no instante de tempo 109,0 min, considerando parâmetros de transporte e volume constantes, para uma temperatura de secagem de $55,6$ °C nos seguintes planos: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 5$; (c) $\gamma = 10$ e (d) $\gamma = 20$.

Ao se observar os gráficos da Figura 4.91, percebe-se que, para um instante de tempo bem maior (109,0 min), o perfil da distribuição espacial da razão de umidade ainda se mantém aproximadamente o mesmo para os planos localizados no interior do sólido. Isto pode ser evidenciado através das Figuras 4.91a, 4.91b e 4.91c, que mostram os perfis para os planos no interior do sólido, $\gamma = 1$, $\gamma = 5$ e $\gamma = 10$, respectivamente. Por outro lado, para todos os volumes localizados no plano da fronteira ($\gamma = 20$), em todo o decorrer do tempo, o transporte de água acontece de forma mais rápida, o que pode ser observado nas Figuras 4.90d e 4.91d.

As cinéticas de secagem para as outras temperaturas foram analisadas usando o mesmo modelo utilizado para a temperatura de 55,6 °C, isto é, aplicando-se ao problema de secagem uma condição de contorno de terceiro tipo (convectiva) e mantendo-se ainda volume e parâmetros de transporte constantes. Os refinamentos utilizados para o tempo e espaço também foram os mesmos usados para a temperatura de 55,6 °C, enquanto que os parâmetros de transportes foram determinados pela mesma metodologia descrita na seção 3.7.

Os resultados referentes à temperatura de 69,7 °C podem ser vistos na Figura 4.92.

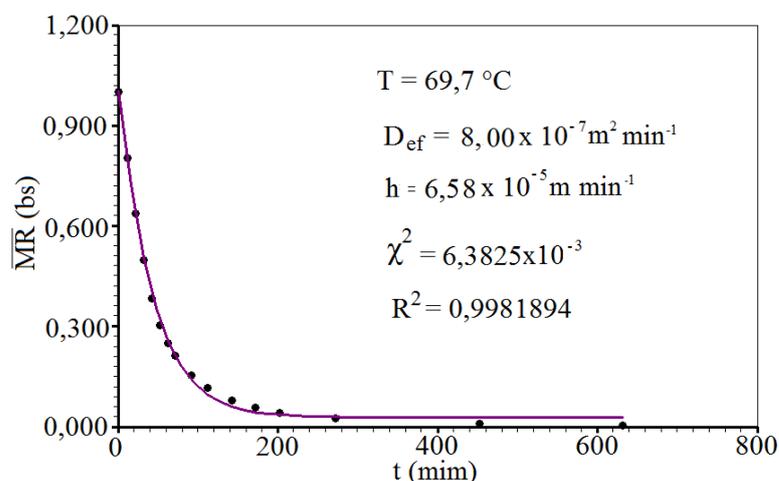


Figura 4.92 – Razão de umidade média obtida com a solução proposta e os dados experimentais, considerando volume e parâmetros termofísicos constantes para uma temperatura de secagem de 69,7 °C.

Para esta temperatura, foi obtido para a difusividade efetiva de massa o valor de $8,0 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ min}^{-1}$, enquanto para o coeficiente de transporte convectivo de massa, o valor

encontrado foi de $6,58 \times 10^{-5} \text{ m min}^{-1}$ para um qui-quadrado de $6,3825 \times 10^{-3}$ e um valor do coeficiente de determinação dado por $R^2 = 9981894$. Os indicadores estatísticos podem ser considerados razoáveis.

Para a temperatura de $82,7 \text{ }^\circ\text{C}$, os resultados para a razão de umidade média em função do tempo são apresentados na Figura 4.93. Esta figura mostra também os valores dos parâmetros encontrados ($h = 8,20 \times 10^{-5} \text{ m min}^{-1}$ e $D_{\text{ef}} = 9,30 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ min}^{-1}$) e dos indicadores estatísticos ($\chi^2 = 5,1702 \times 10^{-3}$ e $R^2 = 0,9985397$) que também são considerados razoáveis.

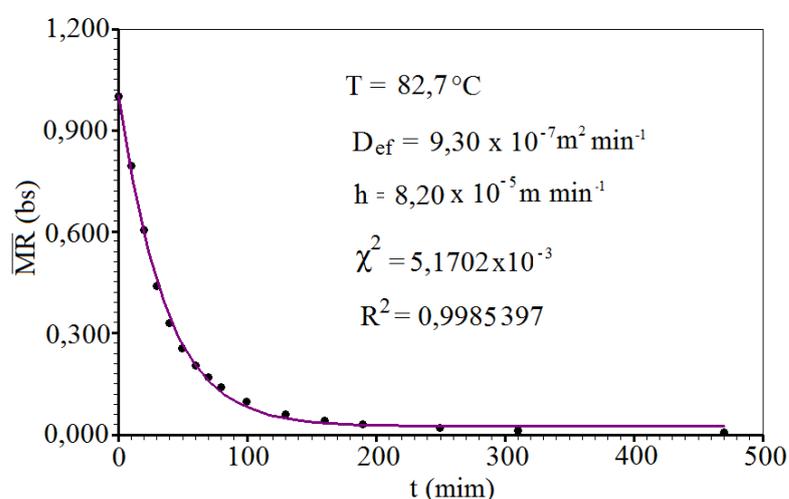


Figura 4.93 – Razão de umidade média obtida com a solução proposta e os dados experimentais, considerando volume e parâmetros termofísicos constantes para uma temperatura de $82,7 \text{ }^\circ\text{C}$.

Finalmente, os resultados da cinética de secagem referente à temperatura de secagem de $98,6 \text{ }^\circ\text{C}$ estão mostrados na Figura 4.94. Neste caso foram obtidos os seguintes valores para os parâmetros de transporte: $h = 10,20 \times 10^{-5} \text{ m min}^{-1}$ e $D_{\text{ef}} = 10,82 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ min}^{-1}$, enquanto que para os indicadores estatísticos os valores encontrados foram: $\chi^2 = 2,8184 \times 10^{-3}$ e $R^2 = 0,9993174$. Para esta temperatura, os indicadores estatísticos obtidos foram melhores do que os obtidos para as demais temperaturas.

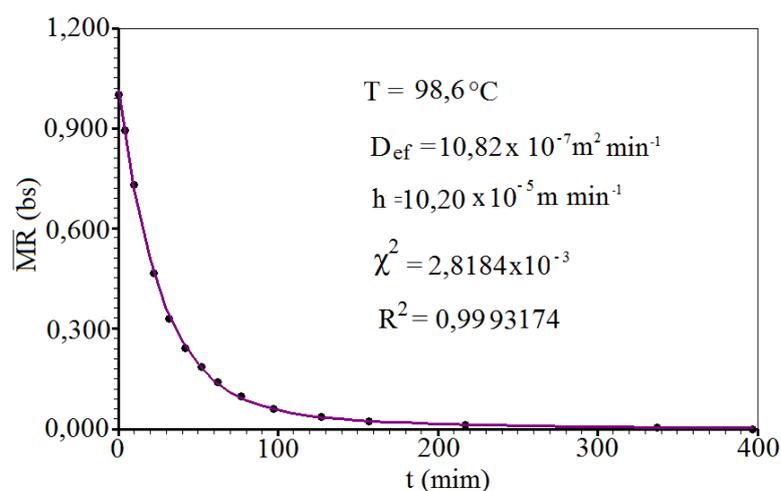


Figura 4.94 – Razão de umidade média obtida com a solução proposta e os dados experimentais, considerando volume e parâmetros termofísicos constantes para uma temperatura de 98,6 °C.

Na Tabela 4.35 estão resumidos os principais resultados para os parâmetros ótimos e indicadores estatísticos obtidos ao se considerar constantes o volume das telhas e os coeficientes de transporte.

Tabela 4.35 – Coeficientes de transporte considerando constantes a difusividade efetiva e o volume da telha.

T (°C)	D_{ef} ($\text{m}^2 \text{ min}^{-1}$)	h (m min^{-1})	χ^2	R^2
55,6	$6,70 \times 10^{-7}$	$4,86 \times 10^{-5}$	$4,0796 \times 10^{-3}$	0,9988114
69,7	$8,00 \times 10^{-7}$	$6,58 \times 10^{-5}$	$6,3825 \times 10^{-3}$	0,9981894
82,7	$9,30 \times 10^{-7}$	$8,20 \times 10^{-5}$	$5,1702 \times 10^{-3}$	0,9985397
98,6	$10,82 \times 10^{-7}$	$10,20 \times 10^{-5}$	$2,8184 \times 10^{-3}$	0,9993174

Analisando os resultados, através de uma inspeção das Figuras 4.88 a 4.94 e da Tabela 4.35, é possível afirmar que o modelo empregado para descrever a cinética de secagem de telhas cerâmicas, considerando volume e parâmetros de transporte constantes, pode ser considerado razoavelmente bom. Esta conclusão pode ser tirada devido aos indicadores

estatísticos obtidos e à razoável coincidência das curvas simuladas com os dados experimentais. No entanto, pode-se tentar melhorar ainda mais os resultados, levando-se em consideração a variação dimensional das telhas, o que deve afetar o valor da difusividade efetiva de massa.

Uma vez que os parâmetros D_{ef} e h já foram determinados por otimização, o teor de umidade médio para cada instante pode ser calculado pela Equação (3.129), para cada temperatura. A superposição das curvas que representam as cinéticas de secagem para as quatro temperaturas investigadas pode ser observada através da Figura 4.95.

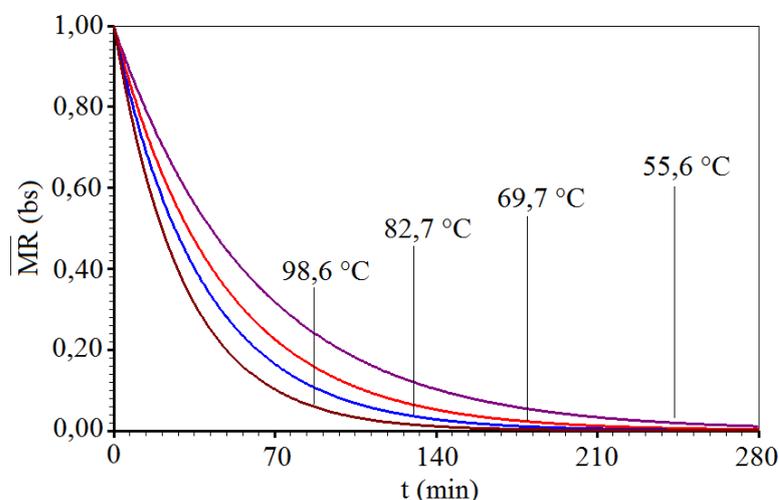


Figura 4.95 - Superposição das cinéticas de secagem para as quatro temperaturas.

Em relação ao tempo gasto para simular a cinética de secagem, considerando constantes o volume do sólido e os parâmetros de transporte, foi verificado que o seu valor médio foi aproximadamente 5 min. Assim, pode-se dizer que o tempo de execução do código computacional desenvolvido pode ser considerado razoável, levando em consideração que o programa foi executado num computador portátil convencional sem requerer memória adicional. No entanto, o tempo gasto no processo de otimização foi bem variado, dependendo do refino requerido nos intervalos dos parâmetros investigados, bem como dos valores iniciais atribuídos a esses parâmetros. Algumas vezes, o tempo de otimização atingiu o valor de 72 horas no mesmo PC.

O resultado do ajuste da Equação (3.141), identificada como equação de Arrhenius, aos resultados obtidos para a difusividade efetiva da água em função da temperatura de secagem é dada pela expressão:

$$D_{ef} = 4,1647 \times 10^{-5} \exp \left[-\frac{1356}{(T + 273,15)} \right] \quad (4.4)$$

em que D_{ef} é dado em $m^2 \text{ min}^{-1}$.

Uma comparação entre as Equações (4.4) e (3.141) resulta nos seguintes valores para os parâmetros de ajuste: $D_0 = 4,1647 \times 10^{-5} m^2 \text{ min}^{-1}$ e $E_a = 11,27 \text{ kJ mol}^{-1}$. O gráfico da dependência da difusividade efetiva de massa com a temperatura é mostrado na Figura 4.96.

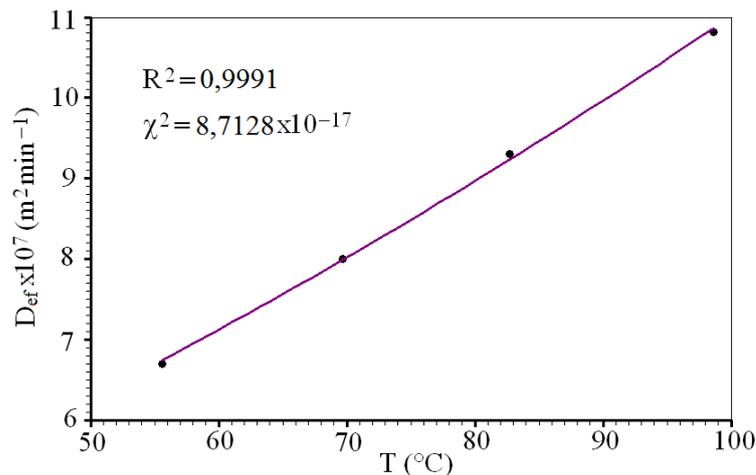


Figura 4.96 - Difusividade efetiva como função da temperatura: equação de Arrhenius.

Foi realizado através da técnica de regressão não-linear, o ajuste da Equação (3.142) aos resultados obtidos para a constante de transferência convectiva de massa em função da temperatura de secagem, obtendo-se a seguinte expressão para h em função da temperatura:

$$h = 2,496 \times 10^{-2} \exp \left[-\frac{2041}{(T + 273,15)} \right], \quad (4.5)$$

onde h é dado em $m \text{ min}^{-1}$.

O gráfico de h em função da temperatura é apresentado na Figura 4.97.

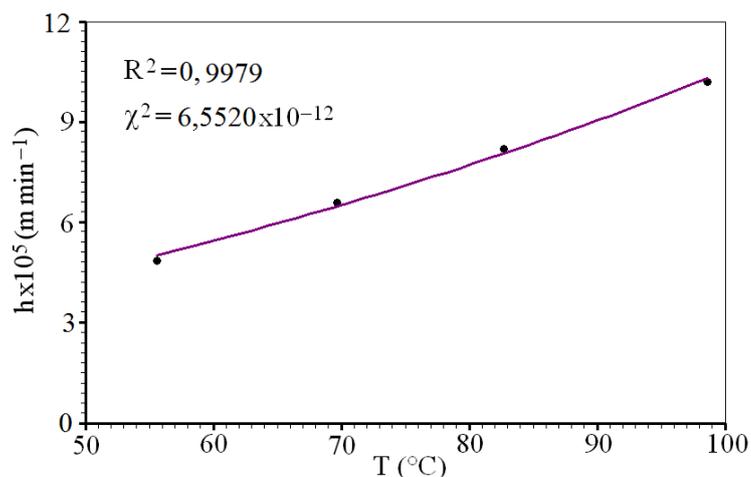


Figura 4.97 - Coeficiente de transferência convectivo de massa em função da temperatura

Uma comparação entre a Equação (4.5) e a Equação (3.142) resulta na igualdade $h_0 = 2,496 \times 10^{-2} \text{ m}^2 \text{ min}^{-1}$. A validade das Equações (4.4) e (4.5) é referente ao intervalo de temperatura usado nos experimentos: de 55,6 a 98,6 °C.

Usando as Equações (4.4) e (4.5), a Tabela 4.36 pode ser apresentada, com os valores de D_{ef} e h calculados por essas equações, para as quatro temperaturas de secagem.

Tabela 4.36 - Parâmetros determinados pelas Equações (4.4) e (4.5) e os erros percentuais calculados em relação aos valores ótimos da Tabela 4.35.

T (°C)	D_{ef} (m ² min ⁻¹)	Erro (%)	h (m min ⁻¹)	Erro (%)
55,6	$6,73 \times 10^{-7}$	0,45	$5,02 \times 10^{-5}$	3,3
69,7	$7,99 \times 10^{-7}$	0,12	$6,49 \times 10^{-5}$	1,4
82,7	$9,22 \times 10^{-7}$	0,86	$8,06 \times 10^{-5}$	1,7
98,6	$10,85 \times 10^{-7}$	0,28	$10,30 \times 10^{-5}$	0,98

Uma inspeção na Tabela 4.36 torna possível observar que os erros entre os valores de D_{ef} e h calculados pelas Equações (4.4) e (4.5), e os valores correspondentes obtidos por otimização são pequenos. Esta observação permite supor que, para temperaturas entre 55,6 e 98,6 °C, os parâmetros do processo podem ser calculados pelas Equações (4.4) e (4.5). Então, se esta suposição for correta, é possível simular a cinética de secagem em outras temperaturas, sem a necessidade de um novo processo de otimização.

A fim de testar as expressões dadas pelas Equações (4.4) e (4.5), os valores dos parâmetros de transporte D_{ef} e h foram calculados para a temperatura de 78,2 °C. Os resultados obtidos foram $D_{ef} = 8,27 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ min}^{-1}$ e $h = 6,84 \times 10^{-5} \text{ m min}^{-1}$. Estes valores foram usados para simular a cinética de secagem, através da solução numérica proposta, a qual é mostrada na Figura 4.98 junto com os dados experimentais. O refinamento de malha e de tempo foram os mesmos utilizados para as outras temperaturas.

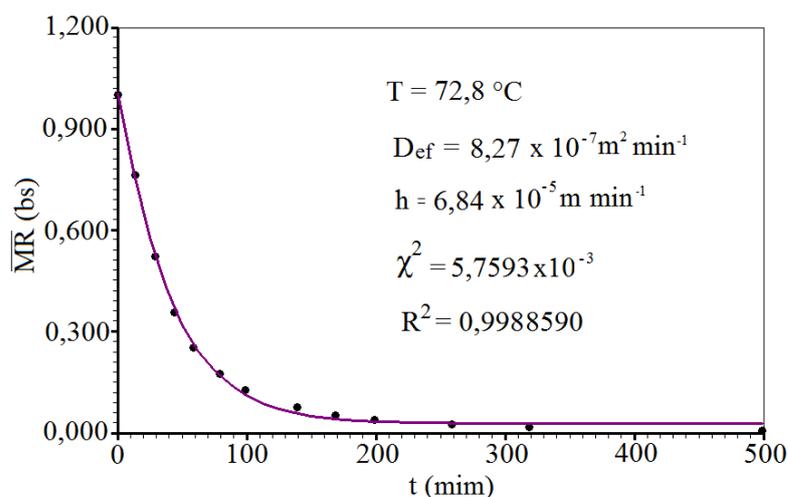


Figura 4.98 – Simulação da cinética de secagem para $T = 72,8 \text{ °C}$ com parâmetros determinados pelas Equações (4.4) e (4.5).

Uma comparação entre os dados experimentais e a curva simulada, e uma inspeção dos indicadores estatísticos apresentados na Figura 4.98, torna possível afirmar que a simulação realizada representa bem o processo de secagem a $T = 72,8 \text{ °C}$. Então, é possível

admitir que as Equações (4.4) e (4.5) podem substituir o processo de otimização na determinação dos parâmetros D_{ef} e h para as temperaturas de secagem entre 55,6 e 98,6 ° C.

Para finalizar este subitem, pode-se dizer que em vários processos de secagem, a retração é tão significativa que ela não pode ser desprezada na descrição do processo. Em adição a isto, pode acontecer que os parâmetros termofísicos sejam variáveis. Nestes casos, o modelo usado nesta seção não é o mais apropriado para descrever o processo de difusão, o qual pode ser descrito de forma mais precisa levando em consideração as variações tanto nas dimensões das telhas quanto na difusividade efetiva de massa.

4.3.2.3 Análise numérica considerando difusividade efetiva e volume variáveis

Com o intuito de melhorar os resultados para a simulação da cinética de secagem, um novo modelo foi proposto. Essencialmente, neste modelo, a condição de contorno é convectiva, enquanto a difusividade efetiva de massa varia com o teor de umidade local e o volume em função da razão de umidade média.

É importante mencionar, neste ponto, que um modelo considerando o volume variável e a difusividade efetiva de massa constante foi analisado por Silva, C. (2010), para dados de secagem de bananas. A sua conclusão foi de que a descrição do processo de secagem através deste modelo foi pior do que a do modelo que considera a difusividade efetiva de massa e volumes constantes. Este aparente paradoxo teve como explicação o fato de que a superposição de erros que foram introduzidos neste último modelo devem se cancelar: volume e difusividade constantes. Assim, a correção de um único erro (variação de volume) poderia piorar os resultados, ao invés de melhorá-los. Por este motivo, o modelo considerando volume variável e difusividade efetiva de massa constante não foi considerado no presente trabalho.

4.3.2.3.1 Expressões para as dimensões das telhas

Visando incluir a variação do volume das telhas cerâmicas na determinação dos parâmetros do processo foi necessário determinar uma expressão que descrevesse de forma satisfatória a relação entre o volume e o valor médio da razão de umidade. Para tal, foi

considerado que a retração ocorre diferentemente nas três direções, de modo que foi necessário determinar uma expressão para cada uma das dimensões (Nascimento, 2002). Assim, a partir dos valores medidos experimentalmente para as dimensões das telhas ao longo do tempo, foram determinadas expressões por uma opção de busca de funções compactas na descrição de dados, disponível no software LAB fit.

A expressão de três parâmetros encontrada para a espessura normalizada que serve para todas as temperaturas consiste na soma de uma constante com uma função exponencial, de acordo com o que é apresentado na Equação (4.6):

$$\frac{E}{E_0} = A + B \exp(C \overline{MR}) \quad (4.6)$$

em que A, B e C são os parâmetros do ajuste.

As expressões da espessura normalizada em função da razão de umidade média para cada temperatura estão dispostas na Tabela 4.37.

Tabela 4.37 – Expressões para a espessura das telhas em função da razão de umidade média.

T (°C)	E/E ₀
55,6	$0,8947 + 1,5578 \times 10^{-04} \exp(6,533 \overline{MR})$
69,7	$0,8754 + 8,3834 \times 10^{-12} \exp(23,41 \overline{MR})$
82,7	$0,8070 + 3,7674 \times 10^{-03} \exp(3,905 \overline{MR})$
98,6	$0,8833 + 2,0789 \times 10^{-06} \exp(10,94 \overline{MR})$

Para a temperatura de 55,6 °C, o gráfico relativo ao ajuste pode ser observado na Figura 4.99, através da qual é possível concluir que a retração na espessura da telha é da ordem de 12 % para esta temperatura de secagem e acontece nos instantes iniciais, quando o teor de umidade médio decresce cerca de 30 %.

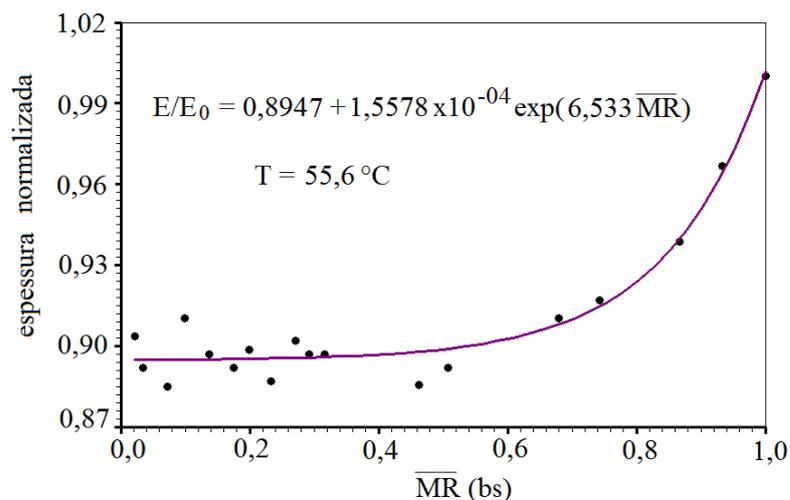


Figura 4.99 – Espessura normalizada versus a razão de umidade média para $T = 55,6 \text{ }^\circ\text{C}$.

Para a temperatura de secagem de $69,7 \text{ }^\circ\text{C}$, o gráfico da espessura normalizada em função da razão de umidade média pode ser visto na Figura 4.100.

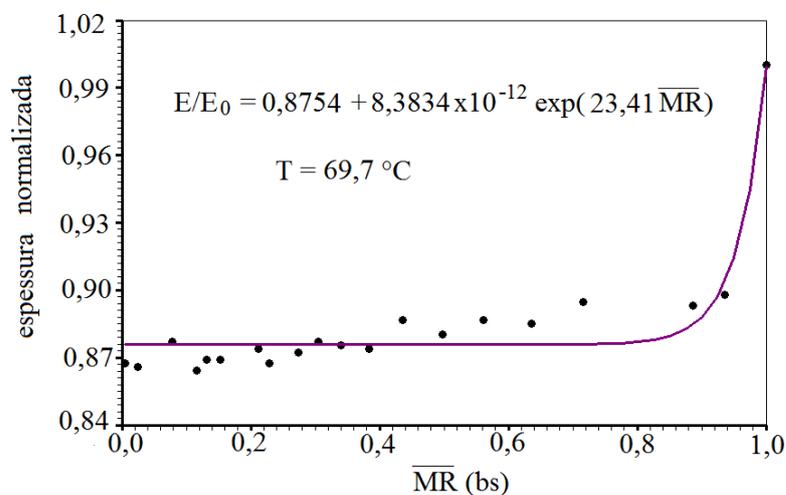


Figura 4.100 – Espessura normalizada versus a razão de umidade média para $T = 69,7 \text{ }^\circ\text{C}$.

Através de uma inspeção da Figura 4.100, verifica-se que, para esta temperatura, o valor na redução da espessura é algo em torno de 12 % e também acontece nos instantes iniciais, quando a razão de umidade média decresce cerca de 20 %.

Para a temperatura de 82,7 °C, o gráfico da espessura normalizada em função da razão de umidade média está mostrado na Figura 4.101, na qual se verifica que a espessura sofre uma redução de aproximadamente 18 %. Esta redução ocorre de forma bastante suave nos instantes iniciais até o momento em que a razão de umidade média atinge aproximadamente 60 % do valor inicial.

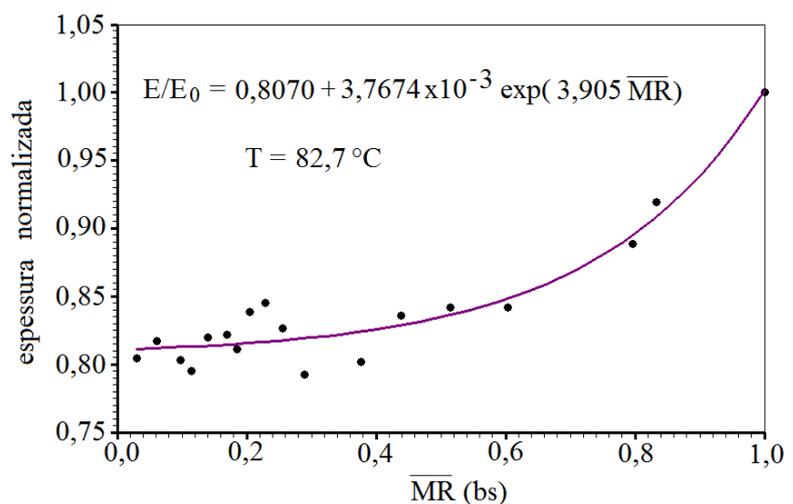


Figura 4.101 – Espessura normalizada versus a razão de umidade média para $T = 82,7$ °C.

O gráfico da espessura normalizada em função da razão de umidade média para a temperatura de 98,6 °C pode ser visto na Figura 4.102.

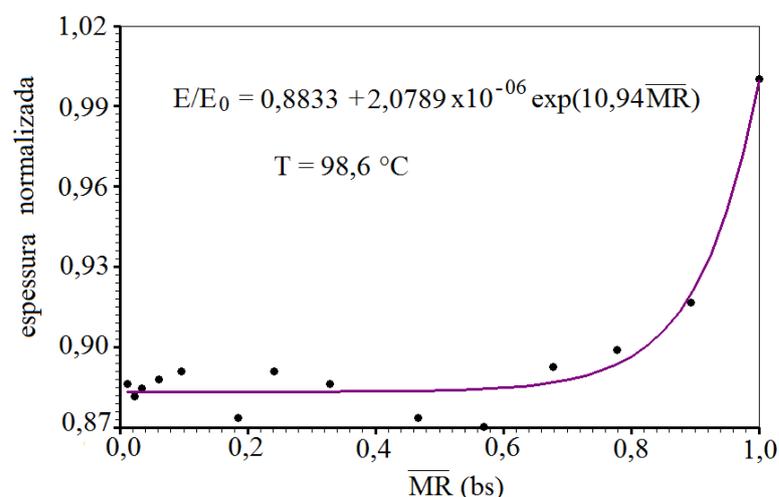


Figura 4.102 – Espessura normalizada da telha em função da razão de umidade média para a temperatura de 98,6 °C.

A Figura 4.102 mostra uma retração aproximada de 12 % na espessura, quando a temperatura de secagem é de 98,6 °C, o que acontece dos instantes iniciais até o momento em que a razão de umidade média sofre uma redução de um pouco mais que 20 %.

Expressões para a largura normalizada das telhas em função da razão de umidade média são apresentadas na Tabela 4.38.

Tabela 4.38 – Expressões para a largura normalizada das telhas em função da razão de umidade média.

T (°C)	L/L_0
55,6	$0,9370 + 6,358 \times 10^{-2} \times \overline{MR}^{2,292}$
69,7	$0,9275 + 4,700 \times 10^{-3} \exp(2,712 \overline{MR})$
82,7	$0,9231 + \frac{3,675 \times 10^{-6}}{\overline{MR}} + 0,4095 \exp(-1,674 \overline{MR})$
98,6	$0,9221 + 4,723 \times 10^{-3} \exp(2,827 \overline{MR})$

O gráfico da largura normalizada em função da razão de umidade média para a temperatura de 55,6 °C está mostrado na Figura 4.103.

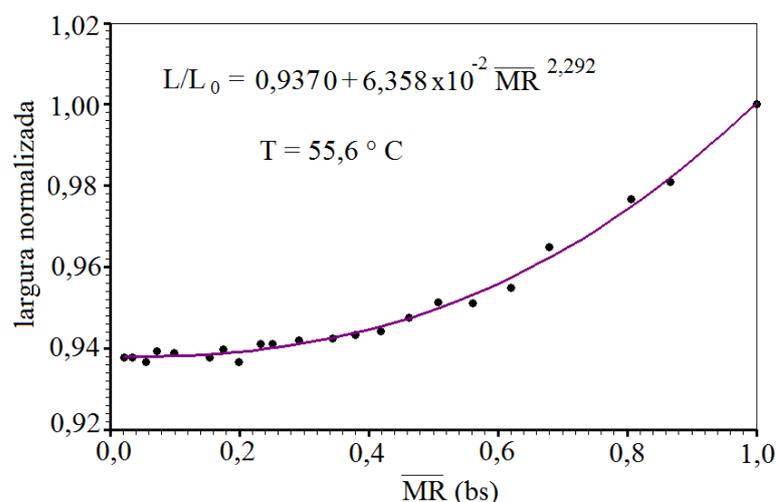


Figura 4.103 – Largura normalizada da telha em função da razão de umidade média para a temperatura de 55,6 °C.

Observa-se na Figura 4.103 que, para a temperatura de 55,6 °C, a largura final da telha é aproximadamente 93,8% da largura inicial. Este percentual de redução é menor do que o da espessura para a mesma temperatura.

O comportamento da largura normalizada em função da razão de umidade média, para a temperatura de 69,7 °C, pode ser visto na Figura 4.104. Para esta caso, o fator de redução na largura, cerca de 6,8 %, também é menor do que o fator de redução na espessura.

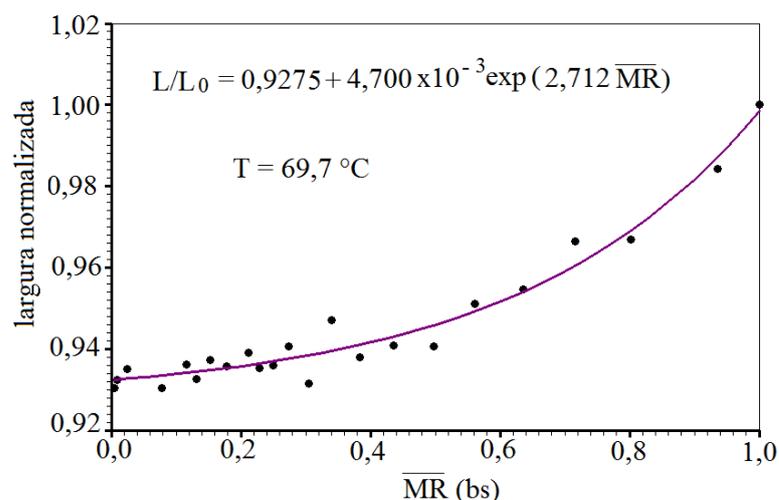


Figura 4.104 – Largura normalizada em função da razão de umidade média para $T = 69,7 \text{ } ^\circ\text{C}$.

A Figura 4.105 apresenta o comportamento da largura normalizada para $T = 82,7 \text{ } ^\circ\text{C}$.

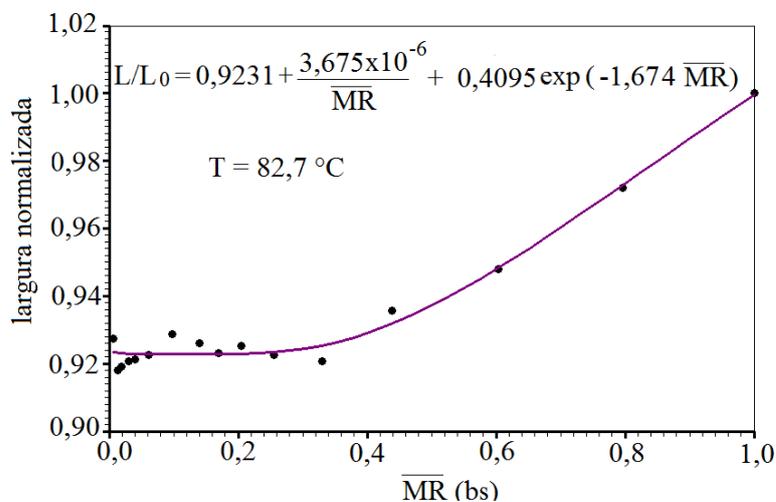


Figura 4.105 – Largura normalizada em função da razão de umidade média para $T = 82,7 \text{ } ^\circ\text{C}$.

Neste caso o percentual de redução na largura foi cerca de 7,6 % e aconteceu no período em que a razão de umidade média decresceu um percentual aproximado de 60 %.

A representação gráfica da largura normalizada para a temperatura de 98,6 °C aparece na Figura 4.106, que mostra o valor da largura final como 92,6 % do valor inicial.

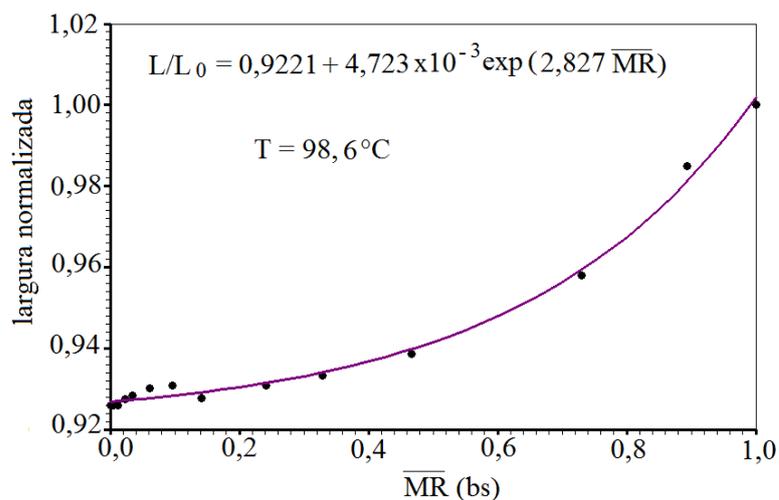


Figura 4.106 – Largura normalizada da telha em função da razão de umidade média para a temperatura de 98,6 °C.

Expressões para o comprimento normalizado das telhas em função da razão de umidade média encontram-se na Tabela 4.39 para as quatro temperaturas investigadas.

Tabela 4.39 – Expressões para o comprimento normalizado das telhas em função da razão de umidade média.

T (°C)	C/C_0
55,6	$0,9519 + 5,089 \times 10^{-2} \times \overline{MR}^{3,534}$
69,7	$0,9415 + 1,482 \times 10^{-3} \exp(3,678 \overline{MR})$
82,7	$0,9614 + 3,895 \times 10^{-2} \times \overline{MR}^{2,711}$
98,6	$0,9552 + 1,199 \times 10^{-3} \exp(3,535 \overline{MR})$

Na Figura 4.107 está apresentado o gráfico do comprimento em função da razão de umidade média para a temperatura de 55,6 °C. Neste caso, a redução percentual, para esta dimensão, foi aproximadamente 4,8 %.

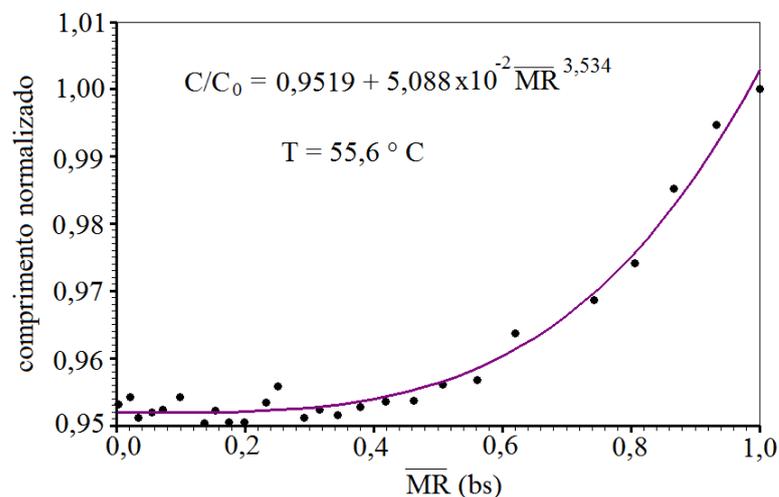


Figura 4.107 – Comprimento normalizado versus a razão de umidade média para $T = 55,6$ °C.

Para a temperatura de 69,7 °C, a representação gráfica do comprimento da telha com a razão de umidade média aparece na Figura 4.108, através da qual, pode-se afirmar que o valor final do comprimento é próximo de 94,4 % do valor inicial.

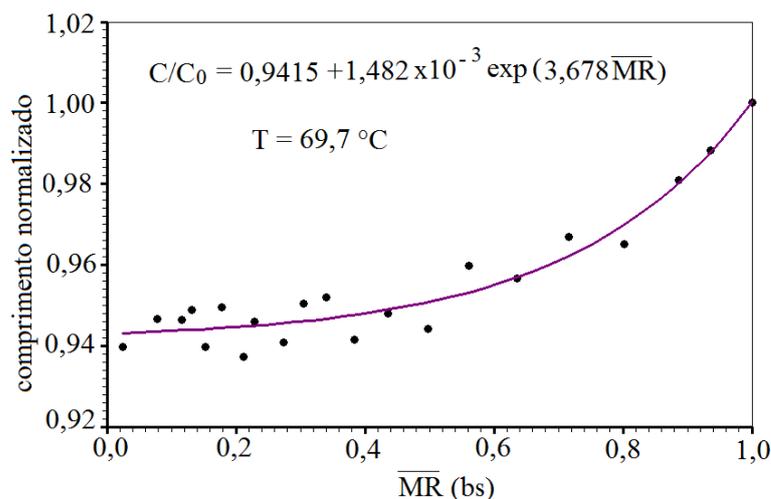


Figura 4.108 – Comprimento normalizado versus a razão de umidade média para a temperatura de 69,7 °C.

Para a temperatura de 82,7 °C, o gráfico do comprimento normalizado em função da razão de umidade média pode ser visualizado através da Figura 4.109, que mostra um percentual de redução de 3,6 %.

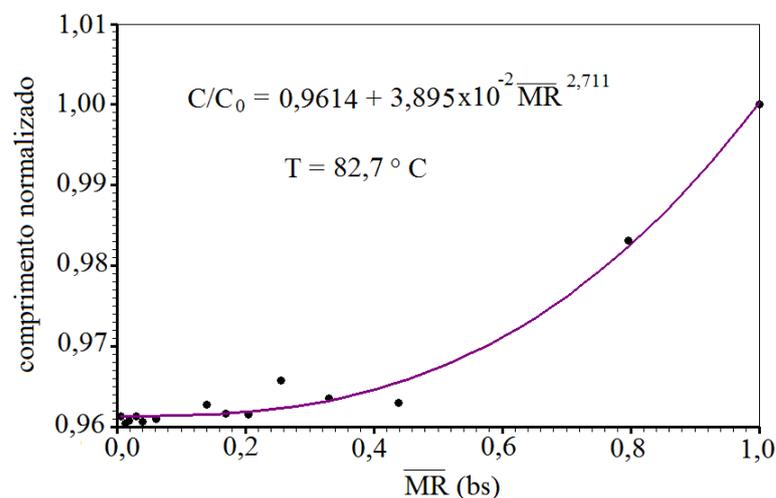


Figura 4.109 – Comprimento normalizado versus a razão de umidade média para T = 82,7 °C.

O gráfico da Figura 4.110 mostra o comportamento normalizado da telha em função do valor médio da razão de umidade para a temperatura de secagem de 98,6 °C, que mostra um percentual de redução aproximada de 4,4 %.

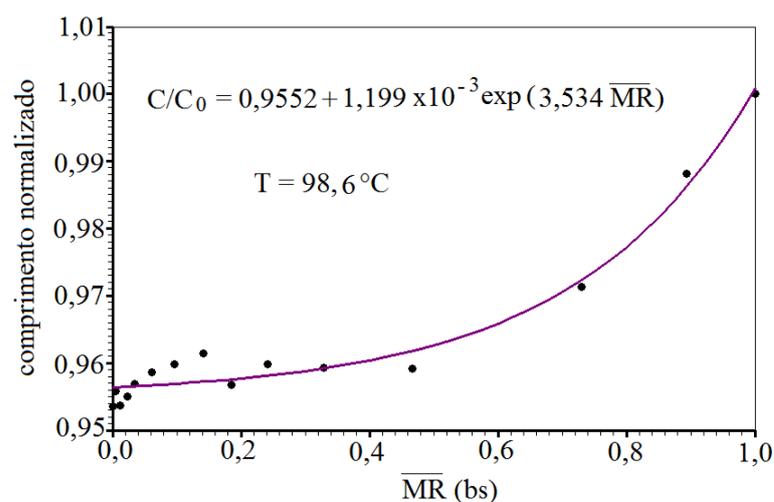


Figura 4.110 – Comprimento normalizado da telha em função da razão de umidade média para a temperatura de 98,6 °C.

É importante frisar que estes resultados foram utilizados para calcular as coordenadas dos pontos de intersecção das malhas ao longo do tempo. Quanto ao volume, este foi calculado a partir do Jacobiano da transformação, de acordo com o que foi apresentado no Capítulo 3. A evolução temporal do volume será apresentada posteriormente.

4.3.2.3.2 Expressão para a difusividade efetiva de massa

Com o intuito de se obter uma função adequada para descrever a difusividade efetiva de massa ao longo do processo de secagem, será considerado o raciocínio a seguir. Os gráficos das Figuras 4.88, 4.92, 4.93 e 4.94 indicam que a difusividade deveria ser menor quando a razão de umidade diminui, ao final do processo. Isto significa que a difusividade e a razão de umidade devem ter o mesmo sentido de crescimento durante a secagem. Desta forma, uma difusividade dada por uma função crescente em relação à razão de umidade deve descrever melhor os dados da cinética do transporte de água do que uma difusividade constante. Existem, disponíveis na literatura, várias expressões para a difusividade efetiva de massa em função da razão de umidade local e/ou da temperatura (Lima, 1999). Após algumas tentativas, optou-se pela expressão dada da seguinte forma (Lima, 1999; Carmo e Lima, 2005; Silva et al. 2009f):

$$D_{ef} = A_0 + A_1 MR \quad (4.7)$$

em que A_0 e A_1 são os parâmetros que devem ser obtidos por otimização.

Desta forma, realizando os processos de otimização para as quatro temperaturas investigadas, obtêm-se os resultados sumarizados na Tabela 4.40. Vale salientar que a constante de transferência convectiva de massa embora tenha sido representada por uma função constante em cada simulação, foi recalculada de acordo com o processo de otimização descrito na Seção 3.7.

Tabela 4.40 – Resultados para os parâmetros de transporte considerando volume e difusividade efetiva variáveis.

56,8 °C	D_{ef} ($m^2 \text{ min}^{-1}$)	$1,28 \times 10^{-6} MR + 0,90 \times 10^{-10}$
	h ($m \text{ min}^{-1}$)	$4,55 \times 10^{-5}$
	χ^2	$1,6934 \times 10^{-3}$
	R^2	0,999466
69,7 °C	D_{ef} ($m^2 \text{ min}^{-1}$)	$1,35 \times 10^{-6} MR + 1,0 \times 10^{-10}$
	h ($m \text{ min}^{-1}$)	$6,00 \times 10^{-5}$
	χ^2	$2,8481 \times 10^{-3}$
	R^2	0,999410
82,7 °C	D_{ef} ($m^2 \text{ min}^{-1}$)	$1,50 \times 10^{-6} MR + 2,8 \times 10^{-10}$
	h ($m \text{ min}^{-1}$)	$7,50 \times 10^{-5}$
	χ^2	$1,6171 \times 10^{-3}$
	R^2	0,999467
98,6 °C	D_{ef} ($m^2 \text{ min}^{-1}$)	$2,60 \times 10^{-6} MR + 20,0 \times 10^{-10}$
	h ($m \text{ min}^{-1}$)	$9,15 \times 10^{-5}$
	χ^2	$9,6700 \times 10^{-4}$
	R^2	0,999771

Como a difusividade é variável, existem não-linearidades a serem consideradas na solução numérica da equação de difusão: os coeficientes do sistema de equações resultante da discretização da equação de difusão dependem da difusividade e, conseqüentemente, da razão de umidade local, que é a grandeza a ser determinada em cada passo de tempo. O problema pode ser contornado diminuindo o intervalo de tempo em que os coeficientes do sistema de equações são considerados constantes.

Assim, as soluções numéricas da equação de difusão para este modelo foram obtidas com o tempo total de secagem dividido em 2000 passos (ao invés de 1000).

4.3.2.3.3 Secagem a 55,6 °C

Utilizando os resultados obtidos para D_{ef} e h através do processo de otimização, foi feita a simulação da cinética de secagem para a temperatura de 55,6 °C, cujos resultados são expostos nesta seção. Na Figura 4.111 são apresentados, além da cinética de secagem, os indicadores estatísticos, o valor do coeficiente de transporte convectivo e a expressão para a difusividade efetiva.

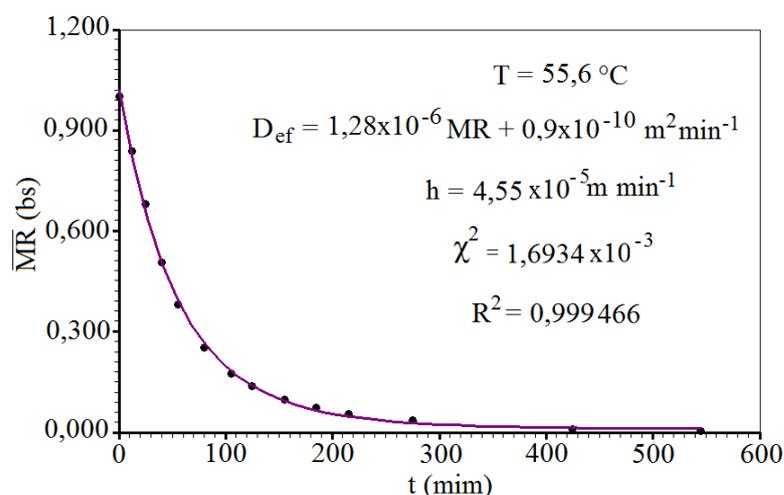


Figura 4.111 – Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 55,6 °C, considerando volume e difusividade variáveis.

Ao se comparar os resultados expostos na Figura 4.111 com aqueles mostrados na Figura 4.88, observa-se que os indicadores estatísticos são significativamente melhores quando se inclui as variações nas dimensões e na difusividade efetiva de massa do que os valores obtidos ao se considerar tais parâmetros constantes.

A evolução temporal da distribuição espacial da razão de umidade no plano central da telha, correspondente a $\gamma = 1$, é apresentada na Figura 4.112 para os seguintes instantes de tempo:

- a) 8,175min; b) 13,625 min; c) 46,325 min; d) 79,025 min e e) 122,625 min.

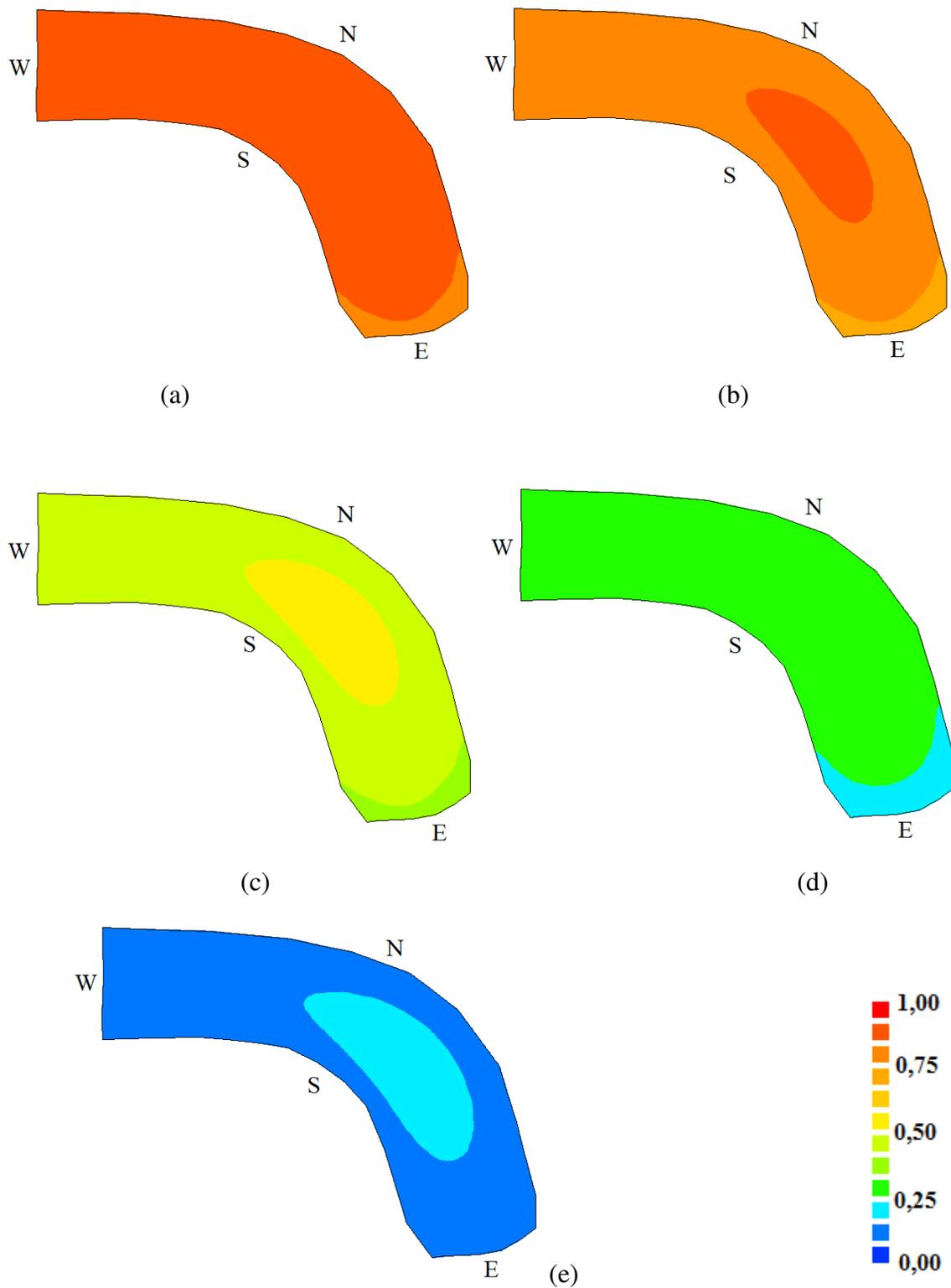


Figura 4.112 – Distribuição da razão de umidade no plano central de uma telha cerâmica, considerando parâmetros de transporte e volume variáveis para uma temperatura secagem de 55,6 °C nos seguintes instantes de tempo: (a) 8,175min; (b) 13,625 min; (c) 46,325 min; (d) 79,025 min e (e) 122,625 min.

Os gráficos apresentados na Figura 4.112 mostram que para os instantes iniciais, $t = 8,175$ min, os volumes de controle internos e os das faces sul e norte apresentam praticamente o mesmo valor para a razão de umidade (Figuras 4.112a). Os volumes que apresentam secagem mais rápida são os da fronteira leste, devido à área superficial de contato com o meio ser mais estreita. Isto pode ser observado no decorrer de todo processo. Por outro lado, torna-se nítido que quanto mais os volumes de controle estão localizados no interior da telha, mais lento acontece o transporte da água. Esta observação pode ser verificada de forma mais acentuada nas Figuras 4.112b, 4.112c e 4.112e.

Com o intuito de analisar a distribuição da razão de umidade ao longo do eixo z , a Figura 4.113 apresenta, para um dado instante de tempo, escolhido arbitrariamente como $t = 122,625$ min, a distribuição espacial da razão de umidade para os volumes de controle localizados em uma linha paralela ao eixo z (γ), localizada no centro da telha e identificada por ($\xi = 1$; $\eta = 10$). Esta linha corta a telha ao meio no sentido do comprimento.

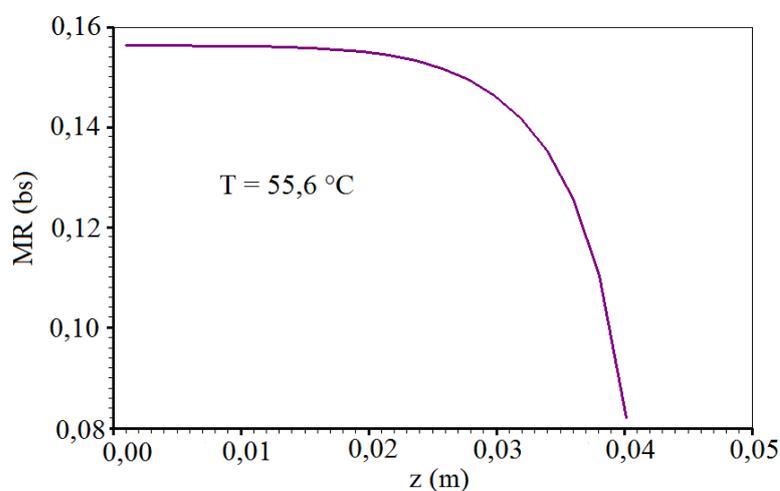


Figura 4.113 – Distribuição da razão de umidade em uma linha paralela ao eixo z e identificada por ($\xi = 1$; $\eta = 10$) em $t = 122,625$ min.

A Figura 4.113 mostra uma distribuição com pequenas variações para a razão de umidade até a posição $z = 0,027$ m. A partir deste ponto acontece uma queda mais acentuada no teor de umidade até a extremidade da telha. Portanto, pode-se concluir que, para este instante de tempo, os volumes de controle localizados no centro do sólido apresentam distribuições espaciais com pequenas variações para o teor de umidade, cujo valor é

aproximadamente o dobro do valor da razão de umidade para o volume de controle localizado na extremidade frontal desta mesma linha.

Na Figura 4.114 está apresentada a distribuição espacial da razão de umidade, em um instante de tempo arbitrariamente escolhido como $t = 8,175$ min, para vários planos da telha, que vão desde o meio até a face frontal (varredura na direção do eixo z). Estes planos são identificados por: a) $\gamma = 1$; b) $\gamma = 10$; c) $\gamma = 15$ e d) $\gamma = 20$.

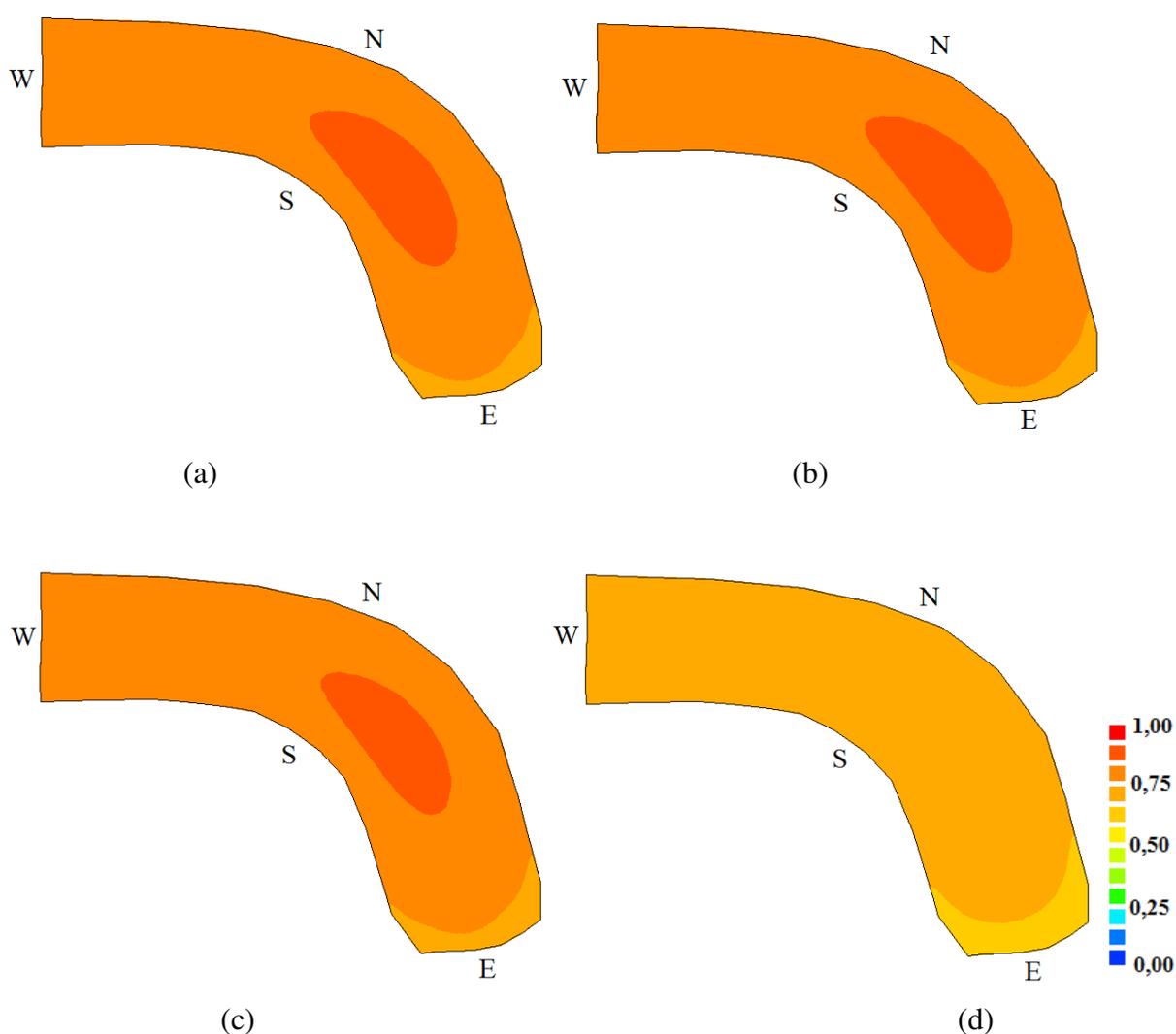


Figura 4.114 – Distribuição da razão de umidade de uma telha cerâmica no instante de tempo 8,175 min, considerando parâmetros de transporte e volume variáveis, para uma temperatura de secagem de 55,6 °C nos planos: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 10$; (c) $\gamma = 15$ e (d) $\gamma = 20$.

Por meio de uma análise da Figura 4.114, pode-se verificar que os planos no interior do sólido possuem um perfil semelhante para a razão de umidade, enquanto o plano da face frontal, correspondente a $\gamma = 20$ possui um perfil diferente, com uma secagem mais rápida. Naturalmente que isto é devido a sua maior proximidade com o meio ambiente, em relação aos demais planos.

Para verificar se este comportamento acontece em outros instantes do processo, a Figura 4.115 mostra a distribuição espacial da razão de umidade para os planos identificados por: a) $\gamma = 1$; b) $\gamma = 5$; c) $\gamma = 10$ e d) $\gamma = 20$, para um instante de tempo bem maior que o anterior: $t = 122,625$ min.

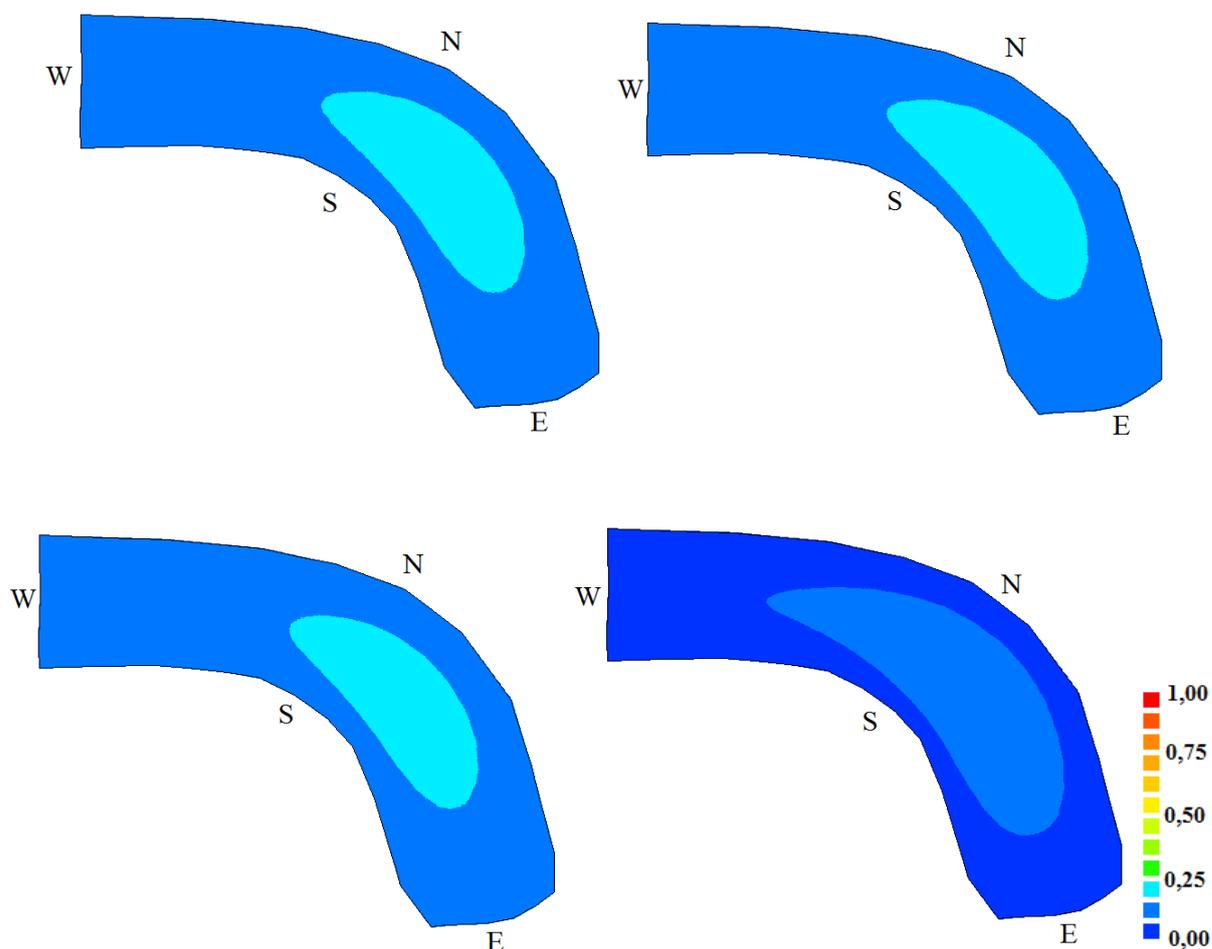


Figura 4.115 – Distribuição da razão de umidade de uma telha cerâmica no instante de tempo 122,625 min, considerando parâmetros de transporte e volume variáveis, para uma temperatura de secagem de 55,6 °C nos planos: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 5$; (c) $\gamma = 10$ e (d) $\gamma = 20$.

Como pode ser visto na Figura 4.115, os planos do interior do sólido apresentam perfis semelhantes para a distribuição da razão de umidade, enquanto que o plano frontal apresenta um perfil diferente dos demais, com valores menores para o teor de umidade em todos os seus volumes de controle quando comparados com os volumes de controle dos demais planos.

A fim de se obter uma idéia sobre o quanto a cinética de secagem difere nos volumes de controle internos e externos da telha, na Figura 4.116 são apresentados gráficos da razão de umidade para três volumes de controle. O volume de controle de número 1 está localizado no centro do sólido e, lembrando a condição de simetria imposta neste estudo, sua identificação é feita por ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 1$). Por outro lado, o segundo volume de controle localiza-se na face frontal da telha, sendo identificado por ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 20$), enquanto o terceiro volume de controle que teve o seu transiente analisado corresponde à identificação ($\xi = 20$; $\eta = 20$; $\gamma = 20$).

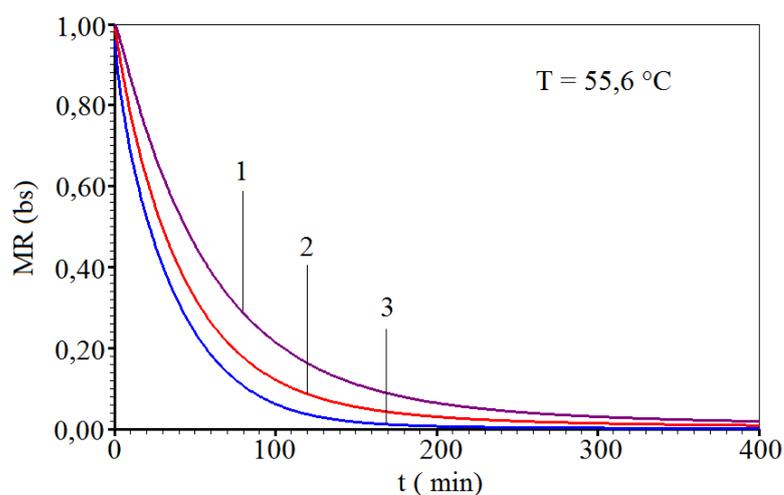


Figura 4.116 - Perfis da razão de umidade: (1) ponto nodal no centro ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 1$); (2) ponto médio frontal ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 20$); (3) ponto externo ($\xi = 20$; $\eta = 20$; $\gamma = 20$).

Ao se analisar esta figura, pode-se observar que o volume de controle 3, localizado na extremidade da telha seca mais rápido do que o volume de controle 1, correspondente ao centro do sólido. Por outro lado, o volume de controle 2 tem uma velocidade de secagem intermediária entre os volumes 1 e 3 (Silva, 2007). Este comportamento é observado durante todo processo de secagem.

Com o objetivo de se ter uma idéia da evolução temporal da retração volumétrica da telha, a Figura 4.117 mostra o volume da telha, calculado pelo Jacobiano, em função do tempo de secagem, enquanto a Figura 4.118 mostra o volume normalizado em função da razão de umidade.

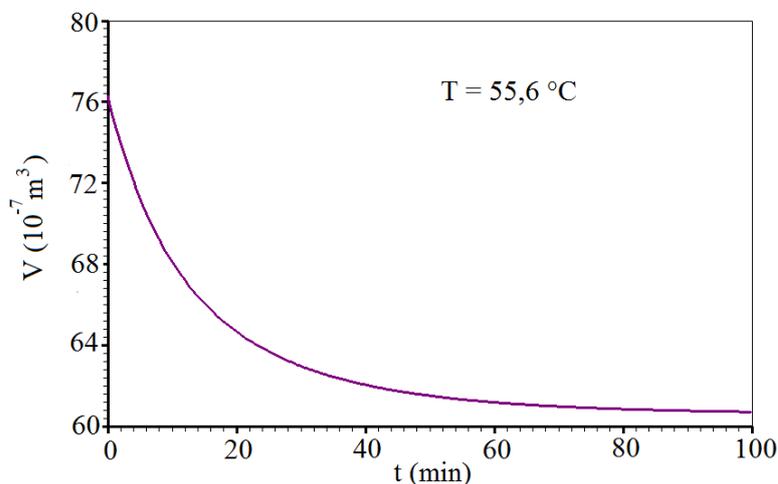


Figura 4.117 – Volume da telha em função do tempo de secagem.

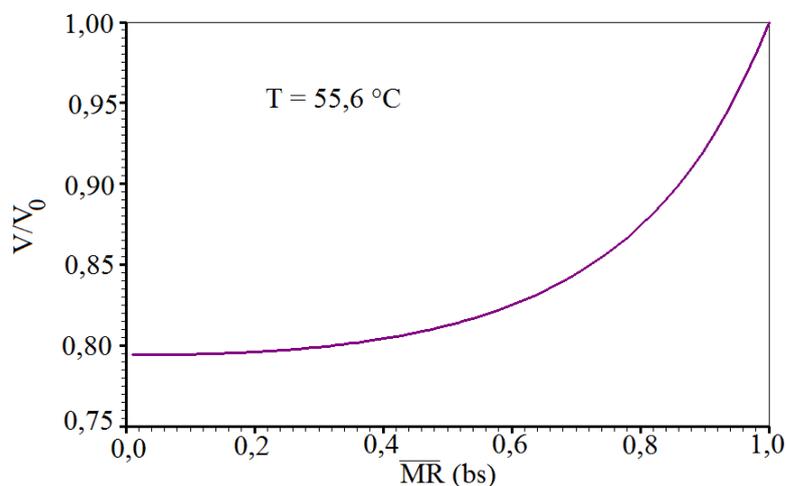


Figura 4.118 – Volume normalizado em função da razão de umidade média.

Através dos resultados apresentados nestes dois gráficos, é possível verificar que para a temperatura de secagem de $55,6 \text{ }^\circ\text{C}$, a retração no volume da telha é cerca de 20 % e ocorre nos instantes iniciais, isto é, antes de atingir os 50 minutos de secagem, o que corresponde a um decréscimo na razão de umidade de 1,0 até 0,5. Este resultado está em concordância com o fato de que a quantidade de água presente no início do processo era de aproximadamente

20 % (teor de umidade em base úmida). Deve-se, portanto, ressaltar a importância de se incorporar o encolhimento na modelagem matemática, sob pena de haver discrepâncias entre os resultados numéricos e experimentais, fato comprovado por Lima (1999). Esse mesmo autor, estudando a secagem de sólidos com geometria esferoidal prolata e usando a teoria da difusão líquida, obteve excelente ajuste entre os resultados experimentais e numéricos, ao considerar o fenômeno de encolhimento na modelagem matemática, incorporando assim um maior realismo físico ao modelo matemático proposto.

O efeito geral do encolhimento pode ser observado na Figura 4.119, a qual mostra a redução da malha, para alguns instantes de tempo.

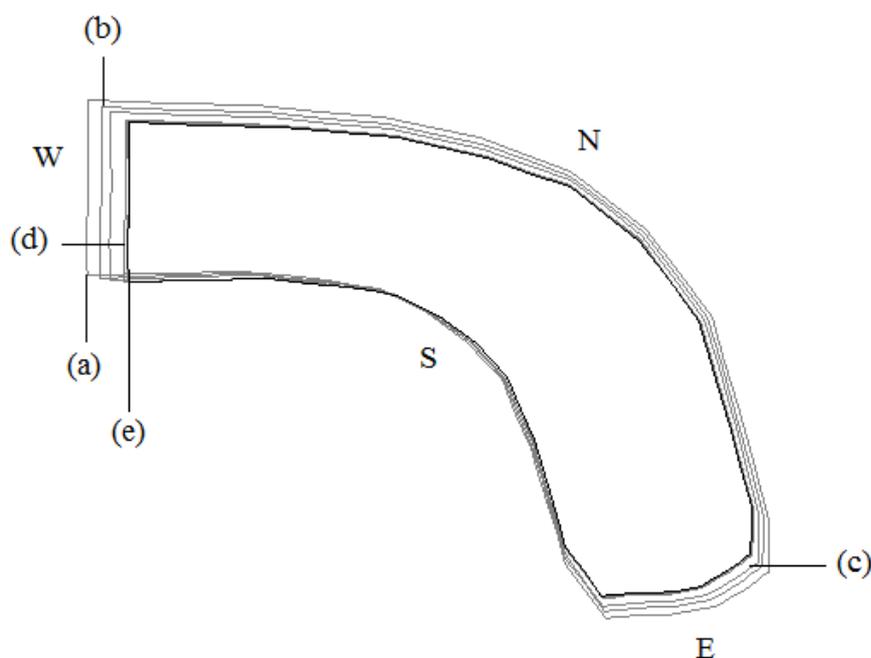


Figura 4.119 – Malha bidimensional usada para gerar a malha tridimensional: detalhes do encolhimento nos instantes: (a) 5,46 min; (b) 10,92 min; (c) 16,32min; (d) 21,84 min e (e) 46,325 min.

Por meio de uma análise da Figura 4.119 e da Tabela 4.27, é possível verificar que a grande redução no volume do sólido ocorre durante os vinte primeiros minutos de secagem, aproximadamente. Depois de quarenta e cinco minutos do início do processo, praticamente não é mais possível detectar redução nas dimensões do sólido.

O comportamento do parâmetro D_{ef} em função da razão de umidade MR, pode ser visto na Figura 4.120, na qual se observa também, o seu valor médio, \bar{D}_{ef} e o valor referente ao modelo que considerou tal parâmetro constante, identificado no gráfico como D_{ef} const.

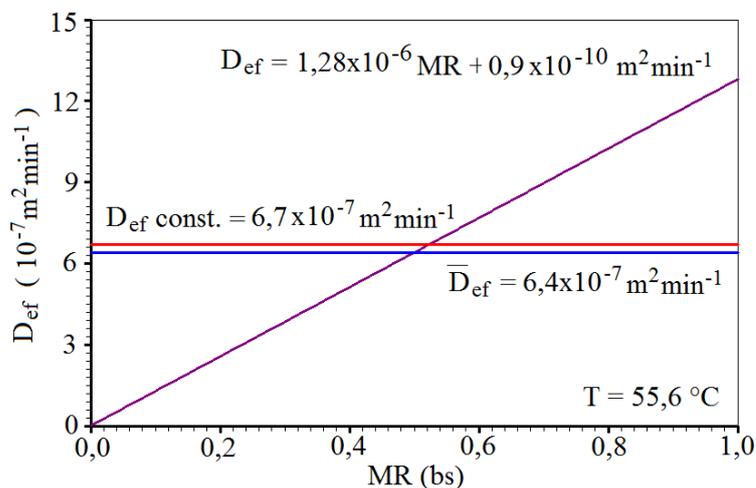


Figura 4.120 – Expressão determinada para D_{ef} de massa para $T = 55,6 \text{ }^\circ\text{C}$.

4.3.2.3.4 Secagem a 69,7; 82,7 e 98,6 °C

Para a temperatura de 69,7 °C, a cinética de secagem é apresentada na Figura 4.121.

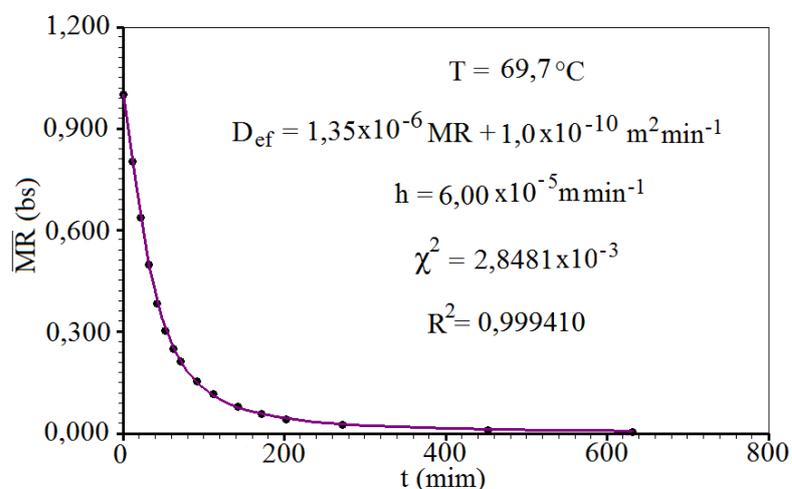


Figura 4.121 - Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 69,7 °C, considerando volume e difusividade variáveis.

Além da curva de cinética simulada, na Figura 4.121 também aparecem os indicadores estatísticos, o valor do coeficiente de transporte convectivo e a expressão para a difusividade efetiva. Observa-se que os indicadores estatísticos são significativamente melhores do que aqueles obtidos ao se considerar a difusividade e o volume constantes.

A evolução temporal do transporte de água no interior do sólido (plano central) pode ser visualizada através dos gráficos da Figura 4.122.

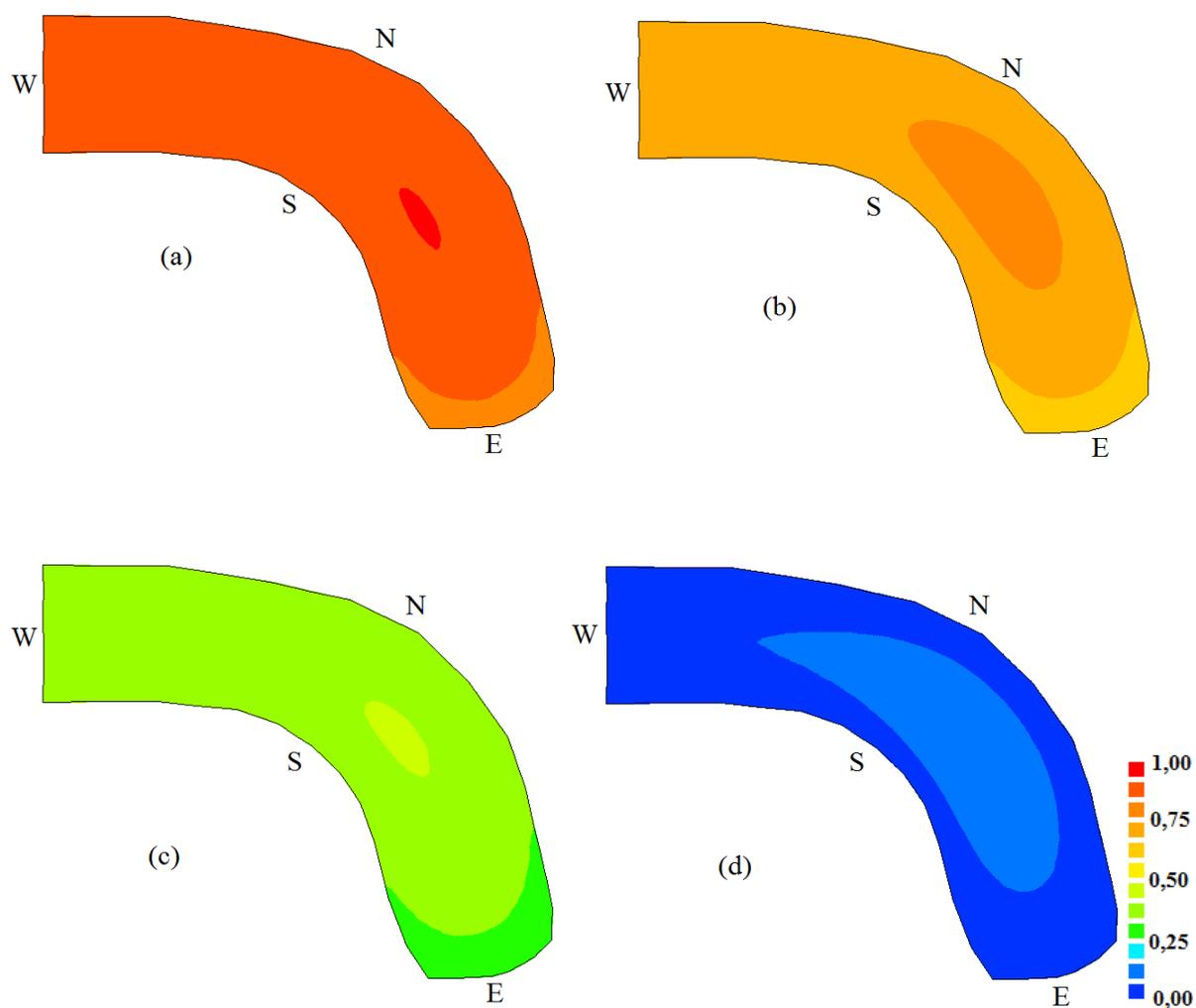


Figura 4.122 – Distribuição da razão de umidade no plano central de uma telha cerâmica, considerando difusividade e volume variáveis para uma temperatura de secagem de $69,7\text{ }^{\circ}\text{C}$ nos seguintes instantes de tempo: (a) 6,32 min; (b) 15,80 min; (c) 47,40 min e (d) 142,20 min.

Percebe-se, através da Figura 4.122, que os volumes de controle que demoram mais a secar são os volumes internos localizados na região da curvatura da telha e os que secam mais rápido são os volumes localizados na face leste.

A Figura 4.123 apresenta, para um dado instante de tempo, escolhido arbitrariamente como 142,20 min, a distribuição espacial da razão de umidade para vários planos da telha, com varredura na direção do eixo z, iniciando no plano mais central e terminando no plano mais externo.

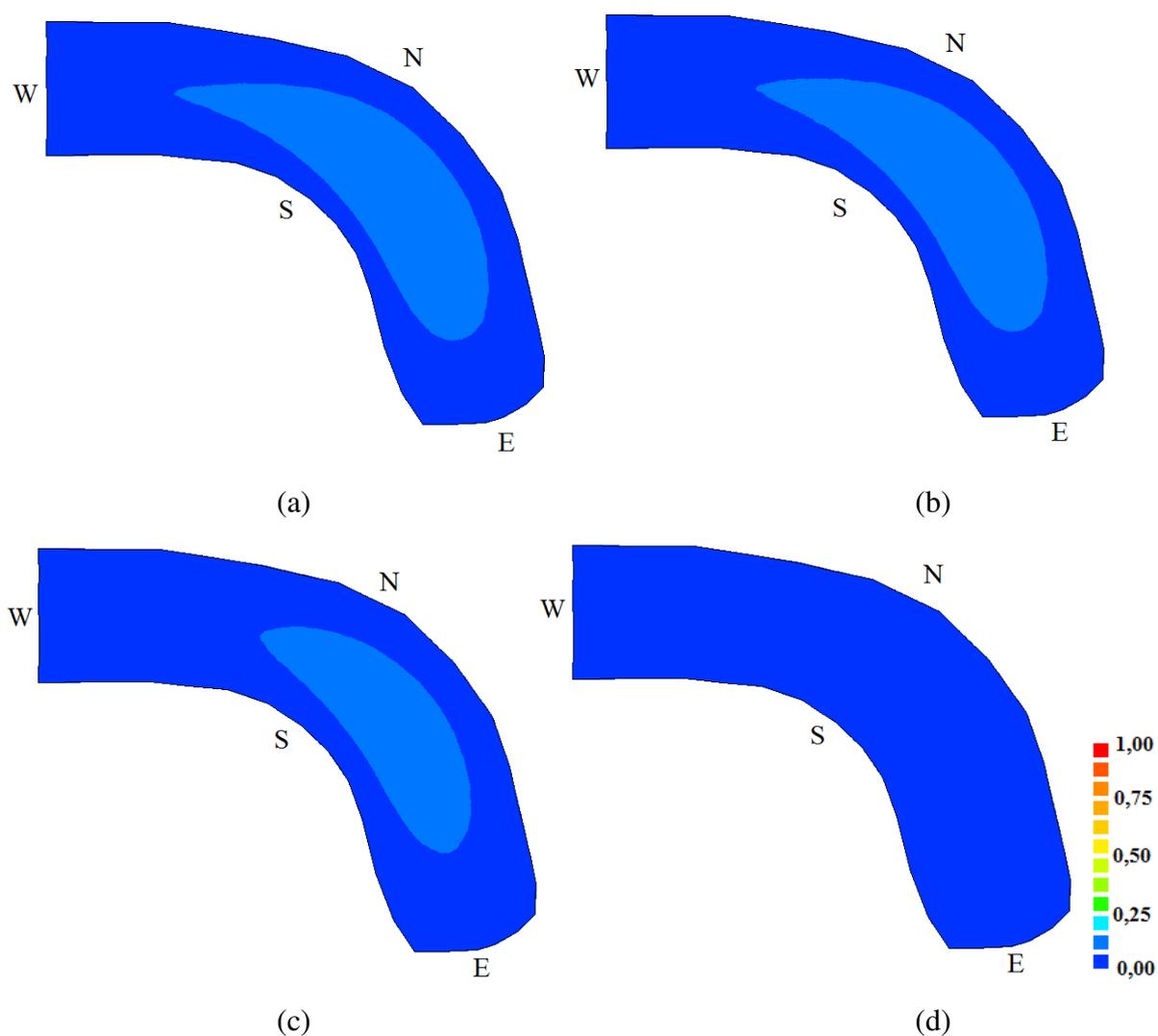


Figura 4.123 – Distribuição da razão de umidade de uma telha cerâmica no instante de tempo 142,20 min, para uma temperatura de secagem de 69,7 °C, considerando parâmetros de transporte e volume variáveis, nos planos: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 10$; (c) $\gamma = 15$ e (d) $\gamma = 20$.

É importante lembrar, que devido à condição de simetria imposta, o plano identificado por $\gamma = 1$ na Figura 4.123, corresponde ao plano central da telha. Em adição a isto, pode ser observado que para este instante de tempo, os volumes de controle localizados na face frontal estão praticamente secos, diferentemente dos volumes localizados nos planos internos, que ainda possuem uma distribuição não uniforme de água.

A simulação da cinética de secagem para a temperatura de 82,7 °C pode ser vista na Figura 4.124.

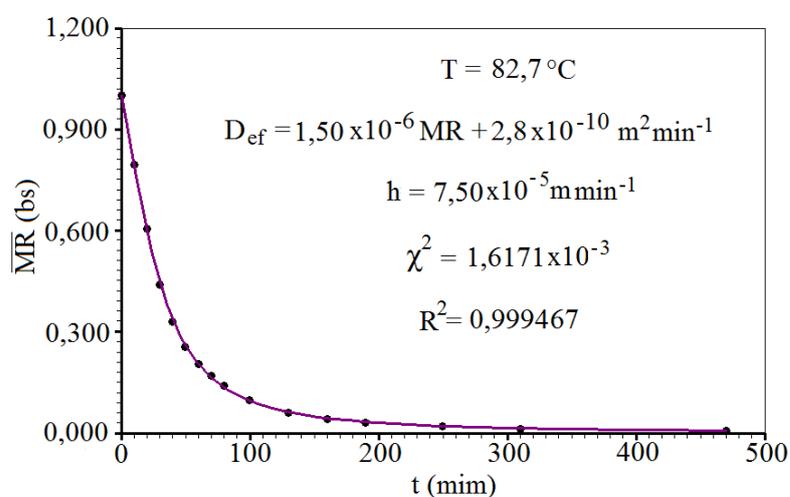


Figura 4.124 - Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 82,7 °C, considerando volume e difusividade variáveis.

A Figura 4.124 contém ainda o valor do coeficiente de transporte convectivo de massa, os indicadores estatísticos e a expressão para a difusividade efetiva. Observa-se que para este caso, os indicadores estatísticos também são expressivamente melhores do que aqueles obtidos ao se considerar a difusividade e o volume constantes.

Para se obter informações sobre a evolução ao longo do tempo do teor de umidade no centro da telha a uma temperatura de 82,7 °C, foi analisada a distribuição da razão de umidade para os volumes de controle localizados no plano central, identificado por $\gamma = 1$. Assim, a Figura 4.125 mostra para o referido plano, a distribuição da razão de umidade nos seguintes instantes de tempo: a) $t = 5,17$ min; b) $t = 13,16$ min; c) $t = 23,50$ min; d) $t = 47,00$ min e e) $t = 117,50$ min.

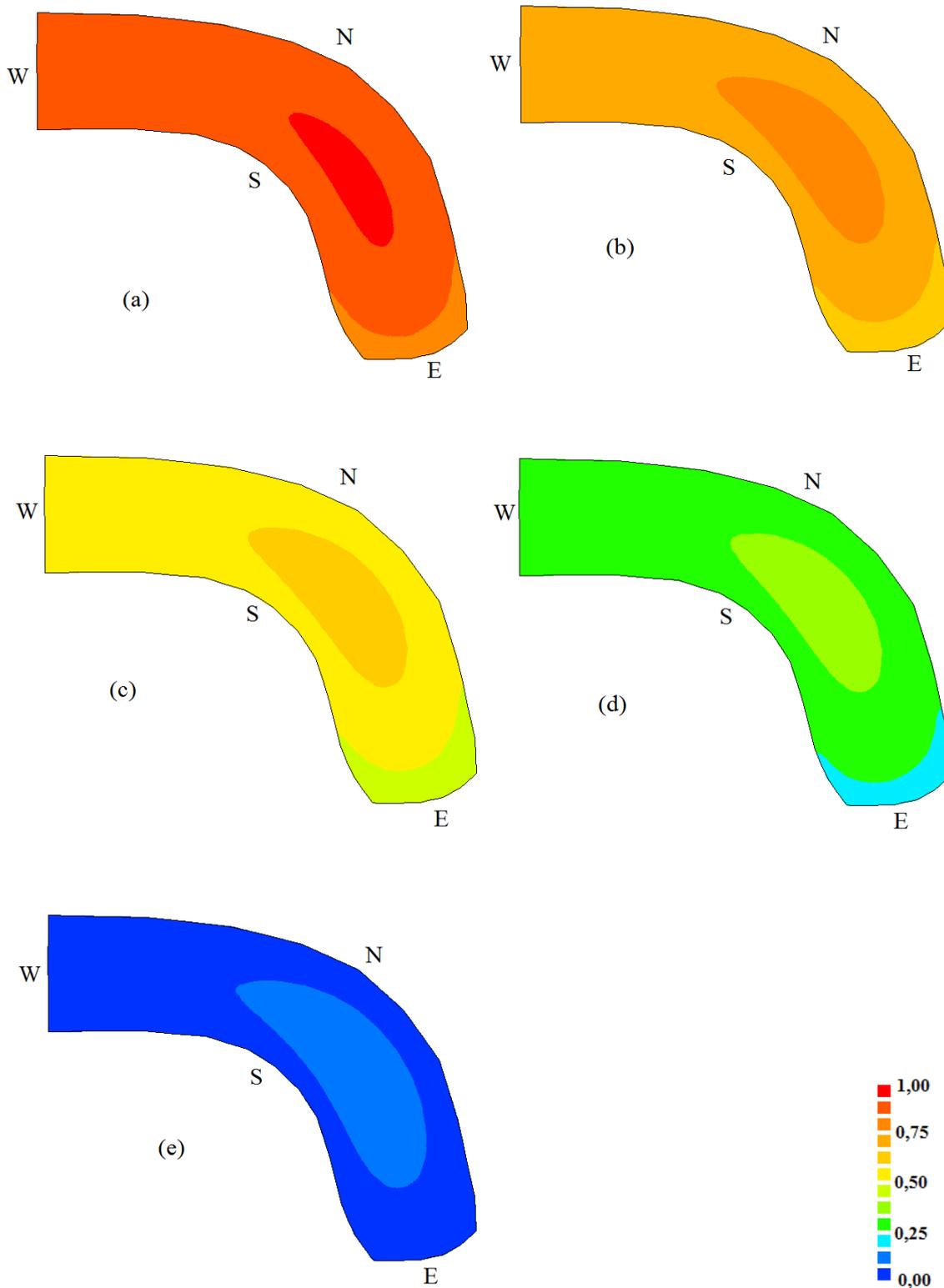


Figura 4.125 – Distribuição da razão de umidade no plano central de uma telha cerâmica, considerando difusividade e volume variáveis, para uma temperatura de secagem de $82,7\text{ }^{\circ}\text{C}$ nos seguintes instantes de tempo: (a) $t = 5,17$ min; (b) $t = 13,16$ min; (c) $t = 23,50$ min; (d) $t = 47,00$ min e (e) $t = 117,50$ min.

Através da Figura 4.125, verifica-se que para esta temperatura, a telha possui uma distribuição para o teor de umidade parecida com as das outras duas temperaturas investigadas. Nota-se que os volumes de controle internos localizados na região curva da telha possuem a menor taxa de secagem no decorrer de todo processo, enquanto os volumes da face leste secam mais rápido.

A Figura 4.126 apresenta, para o instante de tempo $t = 5,17$ min, escolhido arbitrariamente, a distribuição espacial da razão de umidade para vários planos da telha, com varredura na direção do eixo z , iniciando no plano mais central e terminando no plano mais externo.

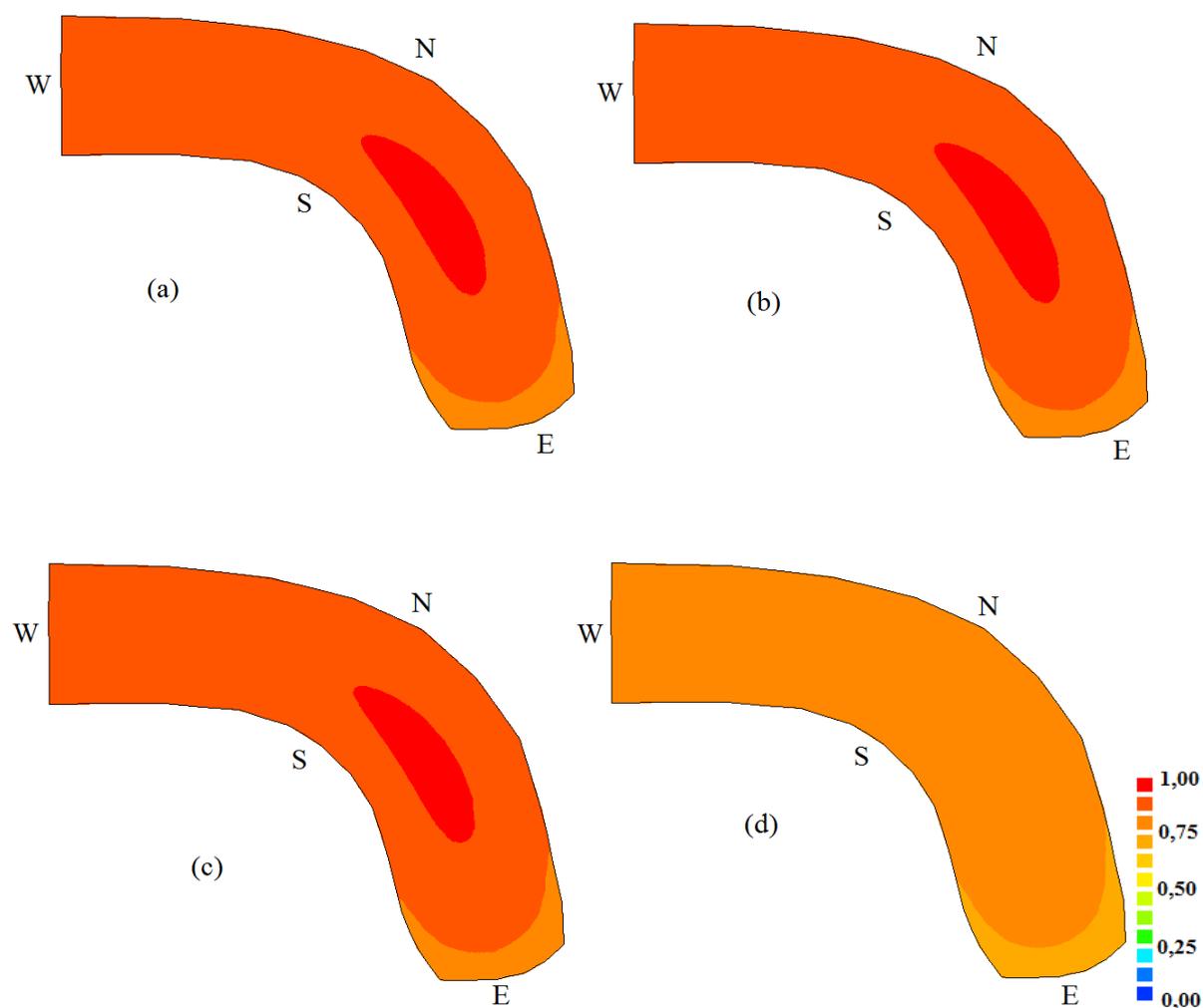


Figura 4.126 – Distribuição da razão de umidade de uma telha cerâmica no instante de tempo 5,17 min, para uma temperatura de secagem de 82,7 °C, considerando parâmetros de transporte e volume variáveis, nos planos: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 10$; (c) $\gamma = 15$ e (d) $\gamma = 20$.

A Figura 4.126 mostra perfis quase iguais para os dois planos localizados mais no interior do sólido, identificados por $\gamma = 1$ e $\gamma = 10$, enquanto o plano identificado por $\gamma = 15$ apresenta-se ligeiramente mais seco e finalmente o plano da face frontal, correspondente a $\gamma = 20$ possui um perfil diferente, com uma secagem mais rápida para todos os seus volumes de controle. Isto é esperado devido a sua maior proximidade com o meio ambiente, em relação aos demais planos.

A simulação da cinética de secagem para a temperatura 98,6 °C, calculada com os dados da Tabela 4.40, podem ser observados na Figura 4.127.

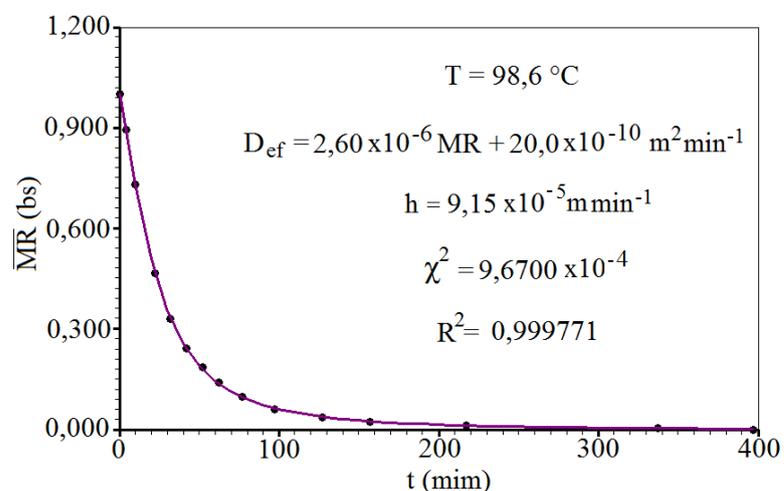


Figura 4.127 - Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 98,6 °C, considerando volume e difusividade variáveis.

Observa-se que os indicadores estatísticos apresentados na Figura 4.127 também são expressivamente melhores do que aqueles obtidos ao se considerar a difusividade e o volume constantes.

Informações sobre o perfil do teor de umidade no plano central do sólido, para a temperatura do ar de secagem de 98,7 °C, ao longo do tempo, podem ser obtidas na Figura 4.128. Através desta figura, observa que aos 91,319 min de secagem vários volumes de controle já atingiram o valor de equilíbrio.

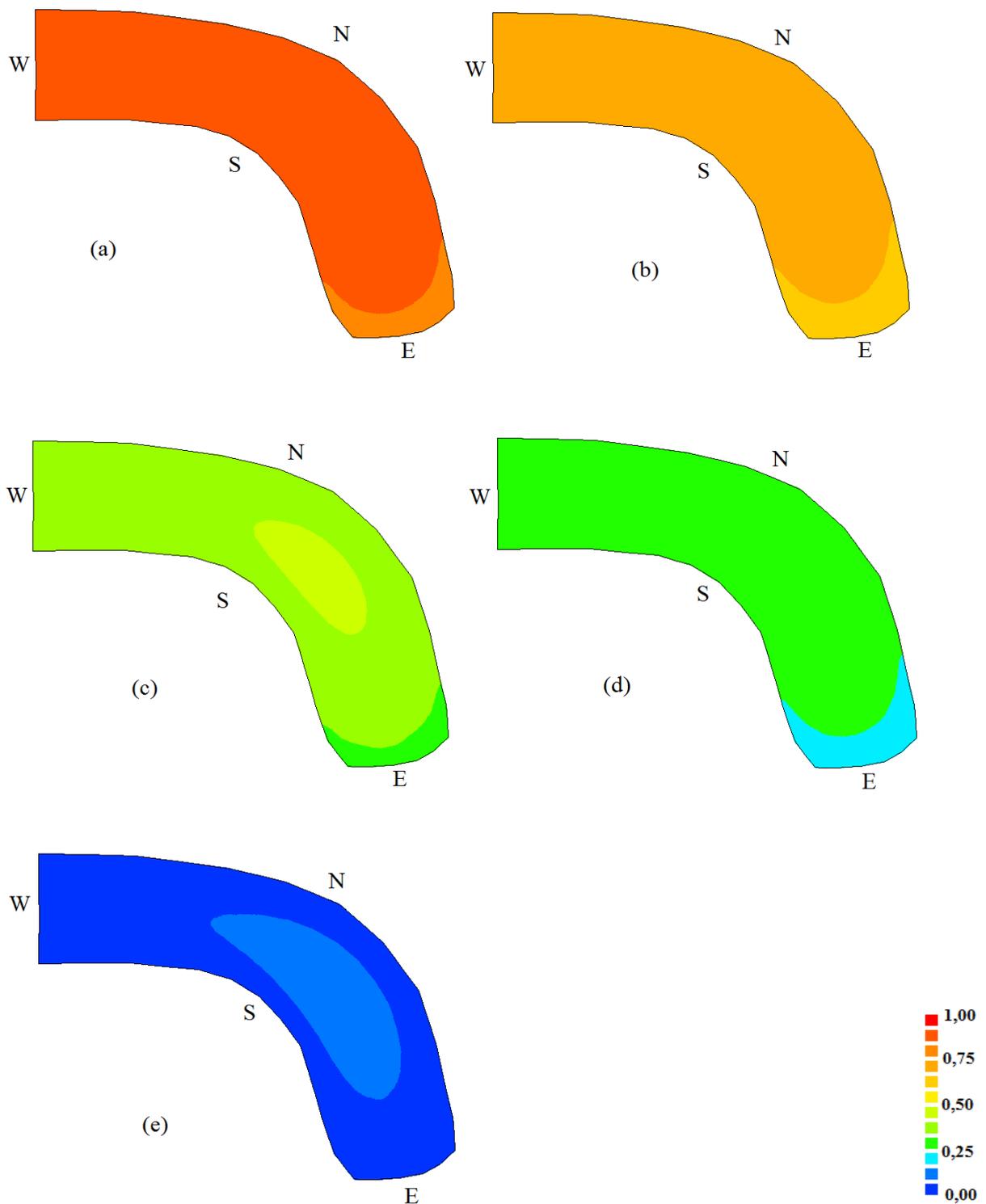


Figura 4.128 – Distribuição da razão de umidade no plano central de uma telha cerâmica, considerando difusividade e volume variáveis, para uma temperatura de secagem de $98,6$ °C nos seguintes instantes de tempo: (a) $t = 4,367$ min; (b) $t = 11,116$ min; (c) $t = 29,775$ min; (d) $t = 39,700$ min e (e) $t = 91,310$ min.

Informações sobre a distribuição de umidade no instante 91,310 min para vários planos da telha podem ser obtidas na Figura 4.129.

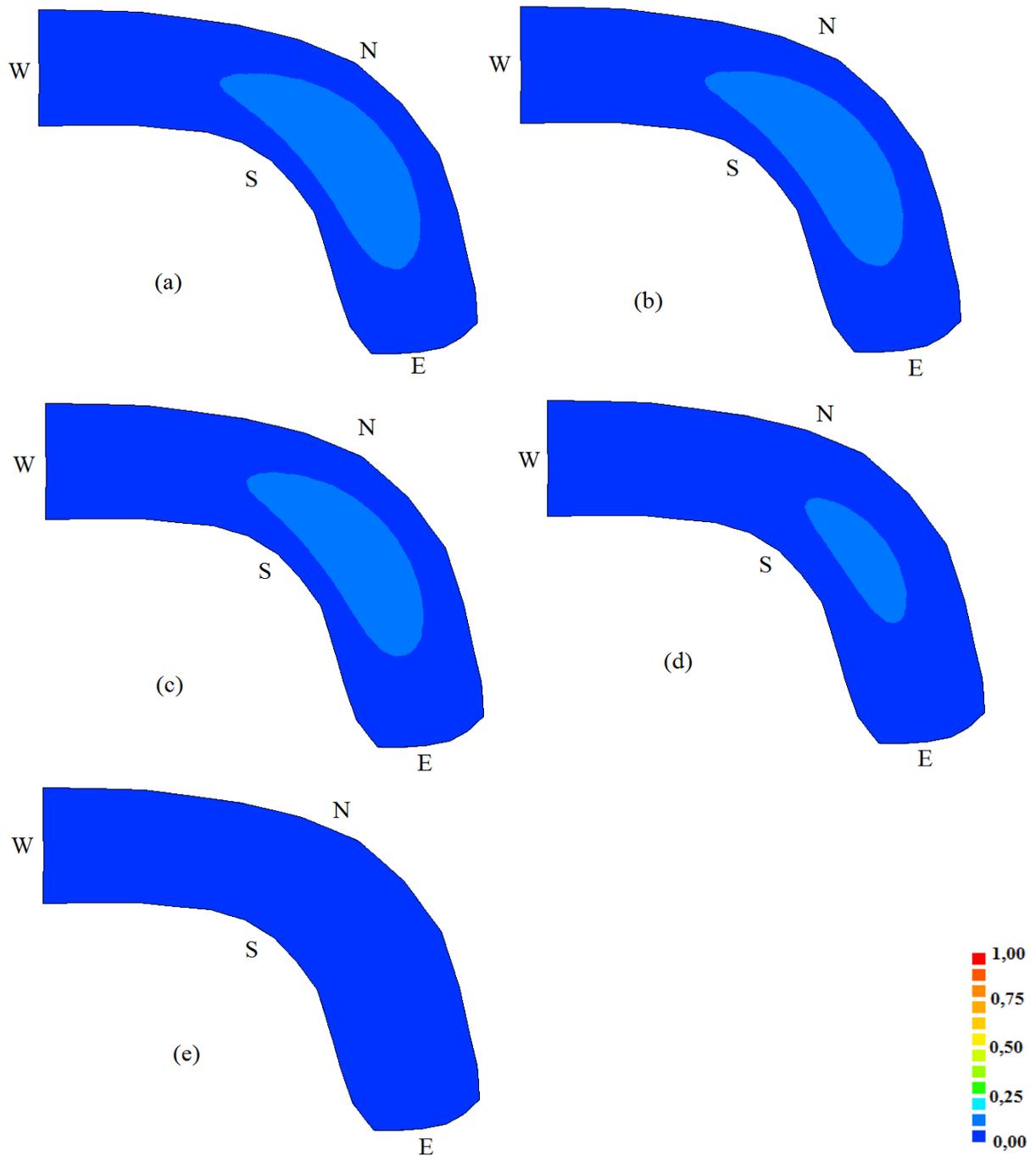
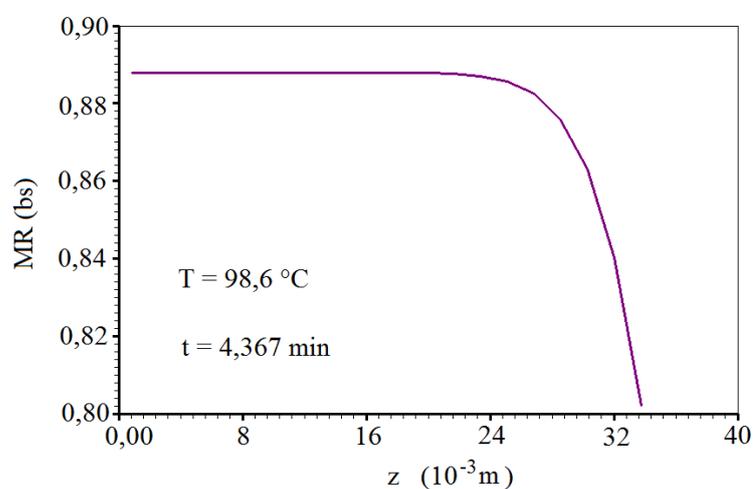


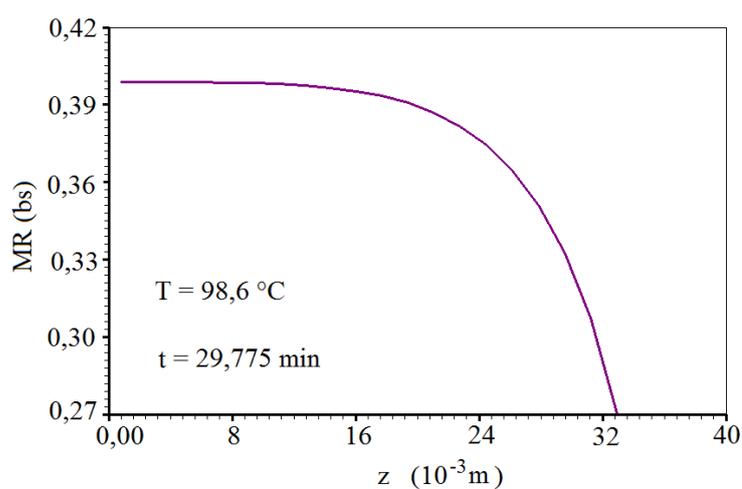
Figura 4.129 – Distribuição da razão de umidade de uma telha cerâmica no instante de tempo 91,31 min, para uma temperatura de secagem de 98,6 °C, considerando parâmetros de transporte e volume variáveis, nos seguintes planos: (a) $\gamma = 1$; (b) $\gamma = 5$; (c) $\gamma = 10$; (d) $\gamma = 15$ e (e) $\gamma = 20$.

A Figura 4.129 mostra um comportamento semelhante ao das outras temperaturas para o perfil do teor de umidade em diferentes planos da telha com varredura na direção z . No plano identificado por $\gamma = 15$, a distribuição de água é ligeiramente diferente dos planos mais internos ($\gamma = 1$; $\gamma = 5$ e $\gamma = 10$), enquanto que para os volumes de controle do plano frontal, a razão de umidade atingiu o valor de equilíbrio em pouco mais de 90 min de secagem.

Para adicionar mais informações sobre a distribuição de umidade, na Figura 4.130 são apresentados os gráficos da razão de umidade em função da coordenada z , para uma linha identificada por ($\xi = 1$, $\eta = 10$). Esta linha corta a telha ao meio no sentido do comprimento.



(a)



(b)

Figura 4.130 – Gráficos da razão de umidade em função da coordenada z para uma temperatura de secagem de $98,6$ °C em (a) $t = 4,367$ min e (b) $t = 29,775$ min.

A distribuição espacial da razão de umidade para $t = 120$ min, sobre o plano central da telha, correspondente a $\gamma = 1$, são mostrados na Figura 4.131, para todas as temperaturas do ar de secagem usadas no processo de otimização.

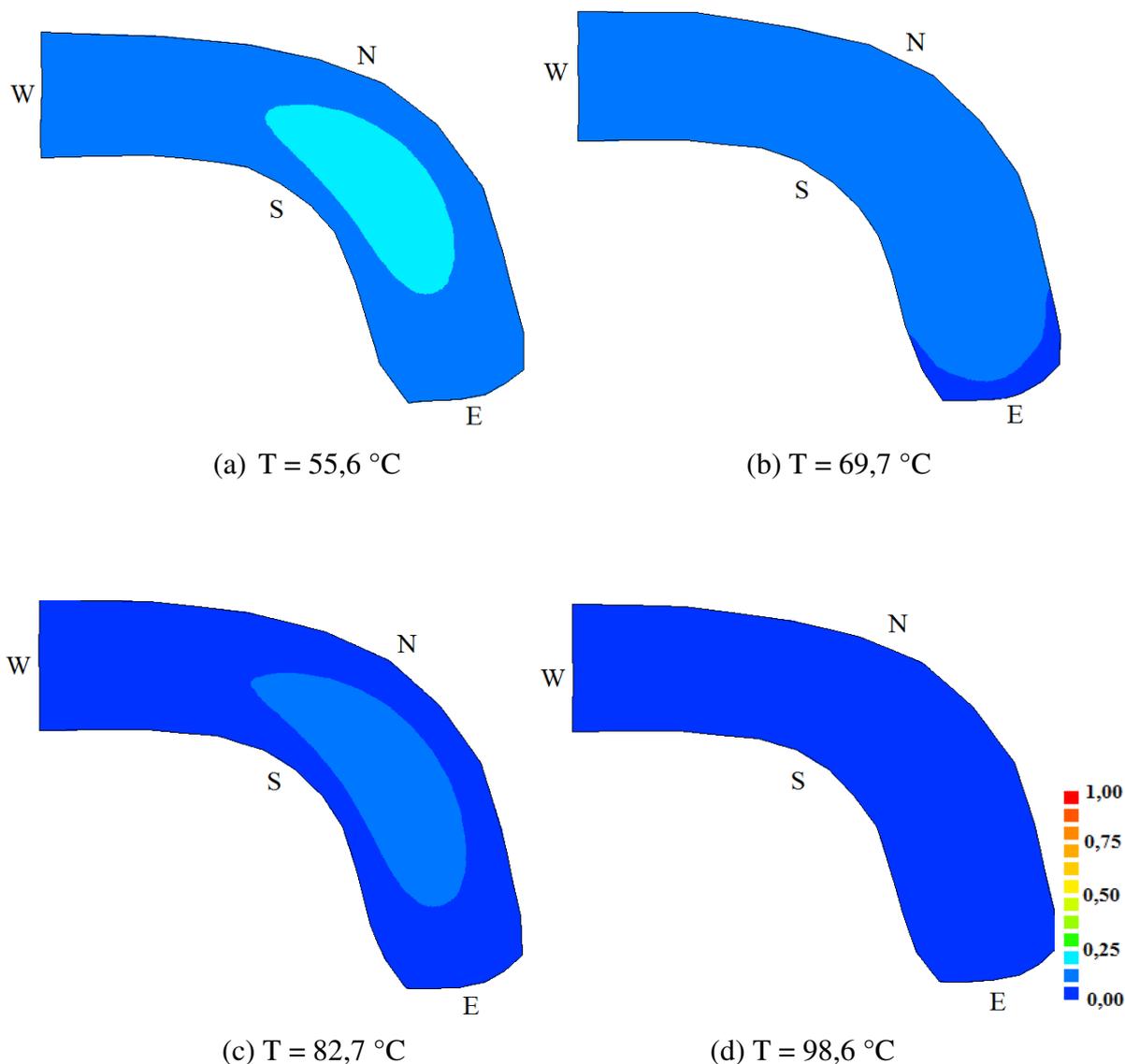


Figura 4.131 - Distribuição do teor de umidade sobre o plano central da telha, em

$t = 120,0$ min, para as seguintes temperaturas do ar de secagem:

(a) $55,6 \text{ }^\circ\text{C}$; (b) $69,7 \text{ }^\circ\text{C}$; (c) $82,7 \text{ }^\circ\text{C}$; (d) $98,6 \text{ }^\circ\text{C}$.

Através da Figura 4.131 pode-se concluir que, como esperado, as telhas secam mais rapidamente à medida que a temperatura do ar de secagem cresce. Para $98,6 \text{ }^\circ\text{C}$, por exemplo,

o plano central já está seco em $t = 120$ min, enquanto que para a temperatura de $55,6$ °C nenhum volume de controle atingiu o valor de equilíbrio para esse instante.

Os três volumes de controle que tiveram os transientes analisados na temperatura de $55,6$ °C e cujo resultado foi apresentado na Figura 4.116, também foram alvo de estudos para as outras três temperaturas. Os resultados estão apresentados nas Figuras 4.132 a 4.134.

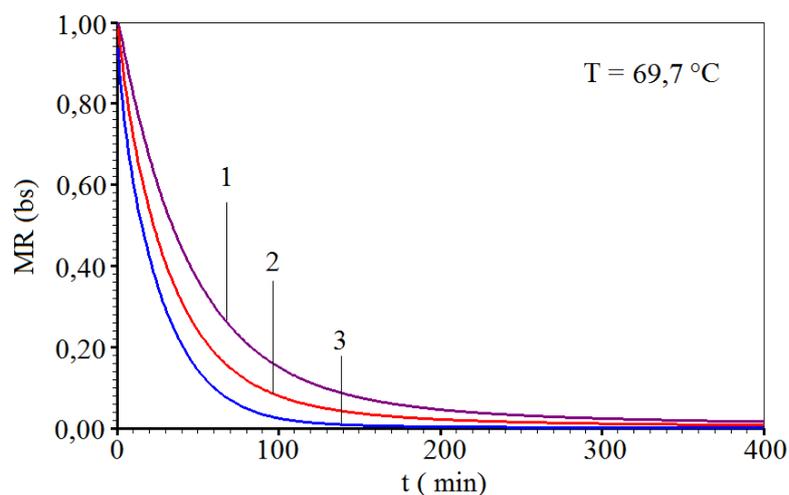


Figura 4.132 - Perfis da razão de umidade para uma temperatura de secagem de $69,7$ °C:
 (1) VC no centro ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 1$); (2) ponto médio externo ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 20$);
 (3) ponto externo ($\xi = 20$; $\eta = 20$; $\gamma = 20$).

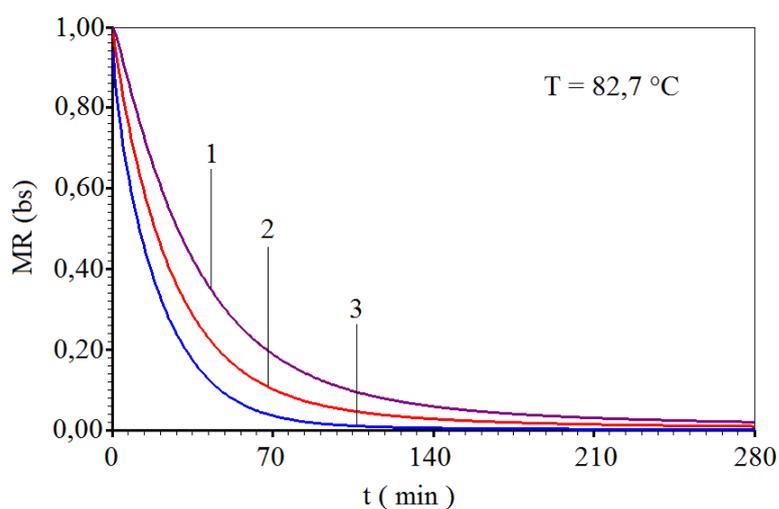


Figura 4.133 - Perfis da razão de umidade para uma temperatura de secagem de $82,7$ °C:
 (1) VC no centro ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 1$); (2) ponto médio externo ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 20$);
 (3) ponto externo ($\xi = 20$; $\eta = 20$; $\gamma = 20$).

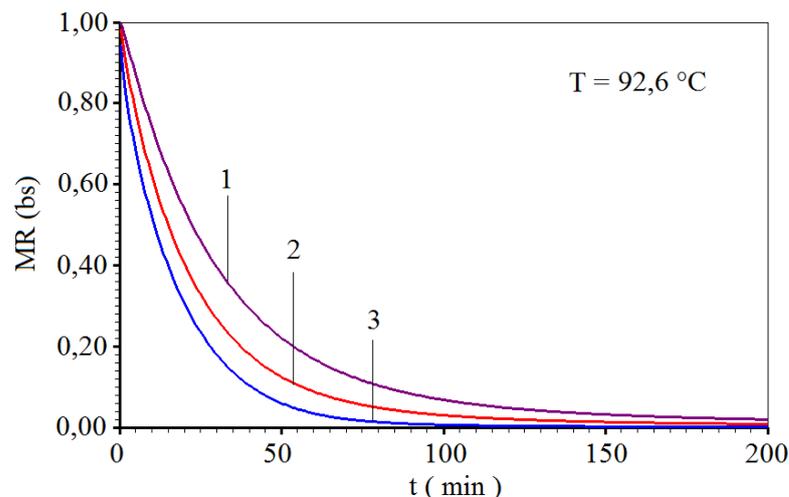


Figura 4.134 - Perfis da razão de umidade para uma temperatura de secagem de 98,6 °C:

- (1) VC no centro ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 1$); (2) ponto médio externo ($\xi = 1$; $\eta = 10$; $\gamma = 20$);
 (3) ponto externo ($\xi = 20$; $\eta = 20$; $\gamma = 20$).

Os gráficos das Figuras 4.132 a 4.134 foram traçados com o objetivo de se obter informações sobre como o teor de umidade no centro difere do teor de umidade no contorno da telha, pois estas informações são importantes porque esses gradientes de umidade geram tensões que podem danificar o produto (Nascimento, 2002).

A superposição das curvas que representam as cinéticas de secagem para as quatro temperaturas investigadas pode ser observada através da Figura 4.135.

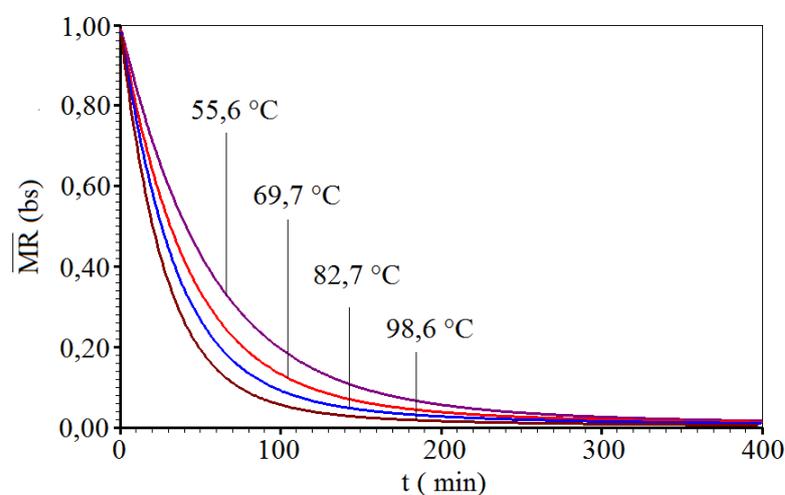


Figura 4.135 - Superposição das cinéticas de secagem para as quatro temperaturas.

Os resultados apresentados na Figura 4.135 possibilitam verificar que não há grandes diferenças quanto ao comportamento da cinética de secagem para as quatro temperaturas investigadas.

Gráficos referentes às difusividades efetivas variáveis, obtidas por otimização, podem ser vistos através das Figuras 4.136 a 4.138. Deve-se observar que esses gráficos representam as difusividades efetivas em função da razão de umidade local, no interior das telhas, para cada temperatura do ar de secagem nos dois modelos estudados: a) o primeiro modelo que trabalhou com a difusividade constante (D_{ef} const.) e b) o segundo modelo que considerou a difusividade variável e o seu respectivo valor médio (\bar{D}_{ef}).

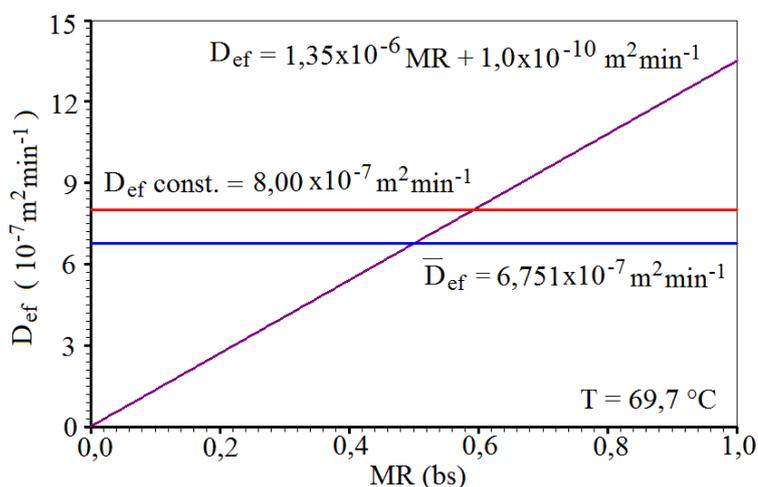


Figura 4.136 – Expressão determinada para a D_{ef} de massa para a temperatura de $69,7 \text{ }^\circ\text{C}$.

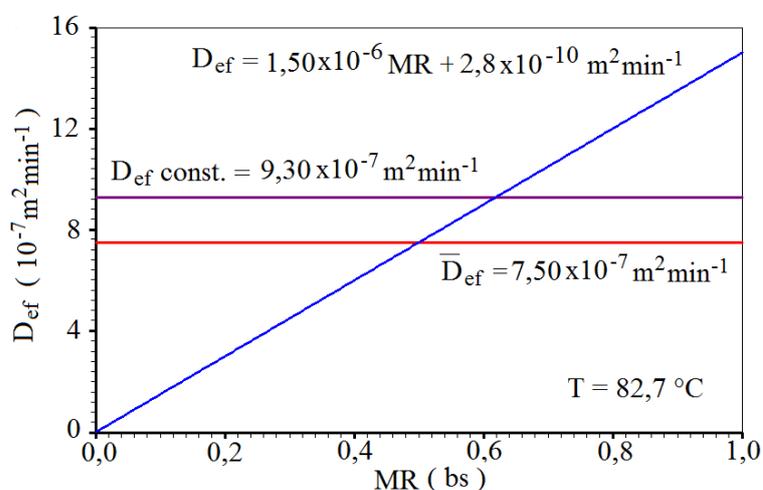


Figura 4.137 – Expressão determinada para a D_{ef} de massa para a temperatura de $82,7 \text{ }^\circ\text{C}$.

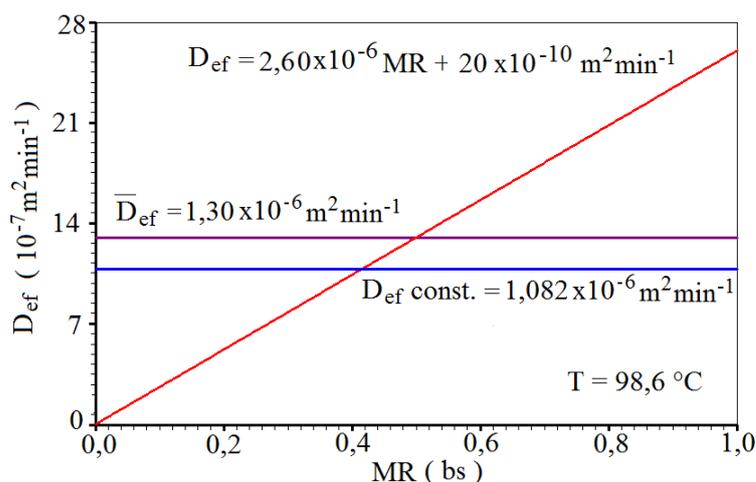


Figura 4.138 – Expressão determinada para a D_{ef} de massa para a temperatura de $98,6 \text{ }^\circ\text{C}$.

Um resumo com os valores médios para a difusividade efetiva de massa e com os valores ao se considerar tal parâmetro constante, para as quatro temperaturas, aparece na Tabela 4.41. Deve ser observado que tais valores estão devidamente transformados para o S.I.

Tabela 4.41 – Valores para a difusividade efetiva de massa.

T ($^\circ\text{C}$)	\overline{D}_{ef} ($\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$)	$D_{ef} \text{ const.}$ ($\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$)
55,6	$1,0667 \times 10^{-8}$	$1,1167 \times 10^{-8}$
69,7	$1,1250 \times 10^{-8}$	$1,3333 \times 10^{-8}$
82,7	$1,2500 \times 10^{-8}$	$1,5500 \times 10^{-8}$
98,6	$2,1667 \times 10^{-8}$	$1,8033 \times 10^{-8}$

Os valores que aparecem na Tabela 4.41, embora fortemente dependentes da geometria e composição do produto, bem como do processo de fabricação e temperatura de secagem, são compatíveis com valores disponíveis na literatura para a D_{ef} de água em materiais cerâmicos (Nascimento, 2002; Silva, 2007).

As expressões da difusividade efetiva de massa em função da razão de umidade, obtidas para as quatro temperaturas, foram plotadas num único sistema de eixos, e o resultado pode ser visualizado através da Figura 4.139.

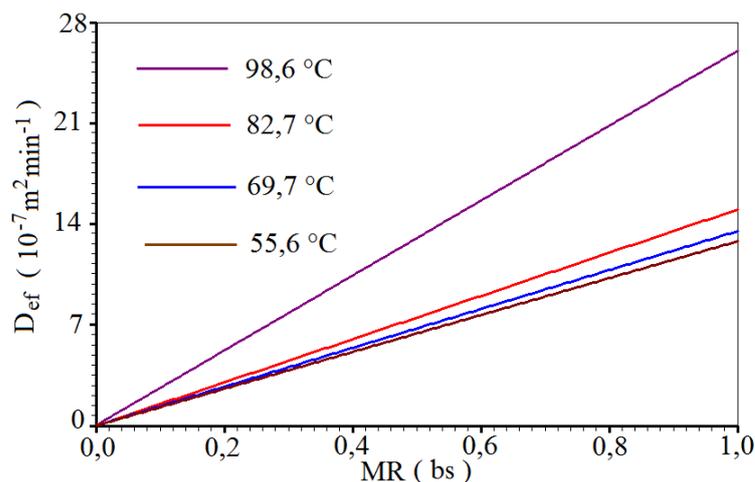


Figura 4.139 - Difusividades efetivas para as quatro temperaturas em função da razão de umidade local, considerando parâmetros variáveis.

O objetivo, agora, é determinar uma única expressão que represente as difusividades, em todas as temperaturas investigadas (T) e em função da razão de umidade local (MR). Para tal, através das expressões obtidas foram determinados valores para as difusividades efetivas, para cada temperatura, referentes a razões de umidade previamente estipuladas:

$$MR = 0,0; 0,2; 0,4; 0,8 \text{ e } 1,0.$$

Dessa forma, a Tabela 4.42 foi montada com valores das difusividades efetivas dependentes da temperatura T e da razão de umidade MR , através da qual é possível perceber que a difusividade aumenta tanto com o aumento da temperatura quanto com o aumento da razão de umidade local.

Outros autores também encontraram o mesmo tipo de comportamento para a difusividade de água em estudos de secagem (Silva, 2007; Silva, C. 2010).

Tabela 4.42 – Estrutura dos dados para determinar uma única expressão que represente D_{ef} .

T (°C)	MR	$D_{ef} \times 10^8$ (m ² min ⁻¹)
55,6	0,0	0,009
55,6	0,2	25,609
55,6	0,4	51,209
55,6	0,6	76,809
55,6	0,8	102,409
55,6	1,0	128,009
69,7	0,0	0,010
69,7	0,2	27,010
69,7	0,4	54,010
69,7	0,6	81,010
69,7	0,8	108,010
69,7	1,0	135,010
82,7	0,0	0,028
82,7	0,2	30,028
82,7	0,4	60,028
82,7	0,6	90,028
82,7	0,8	120,028
82,7	1,0	150,028
98,6	0,0	0,200
98,6	0,2	52,200
98,6	0,4	104,200
98,6	0,6	156,200
98,6	0,8	208,200
98,6	1,0	260,200

O seguinte modelo matemático para a difusividade efetiva em função da razão de umidade local e da temperatura será usado para descrever os resultados obtidos no presente trabalho (Silva, et al., 2009f):

$$D_{ef} = (A_0 + A_1 MR) \exp \left[-\frac{E_a}{R(T + 273,15)} \right]. \quad (4.8)$$

em que “ A_0 ”, “ A_1 ” e “ E_a/R ” são parâmetros a serem determinados por ajuste de curvas, sendo R a constante universal dos gases ideais.

Realizando-se o ajuste da Equação (4.8) aos dados da Tabela 4.42, o gráfico obtido para representar a difusividade em função da temperatura e da razão de umidade está mostrado na Figura 4.140.

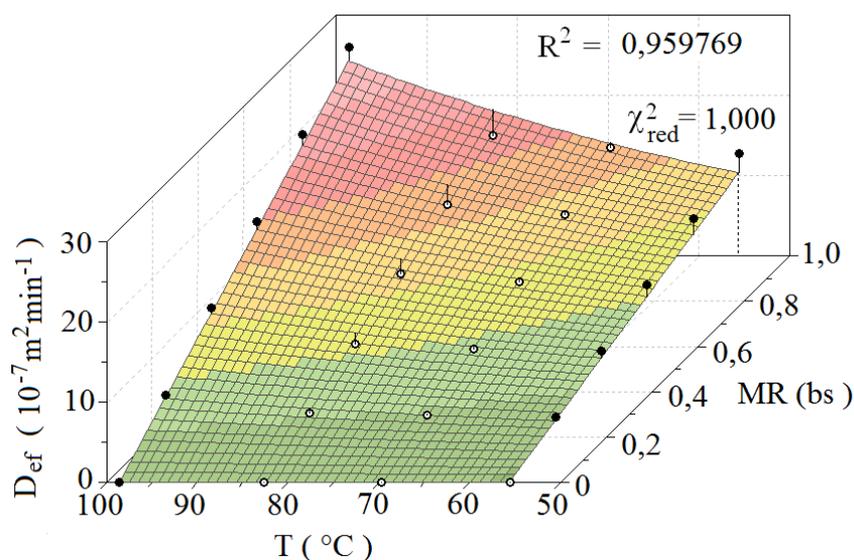


Figura 4.140– Difusividade efetiva em função da temperatura T e da razão de umidade MR :

No gráfico da Figura 4.140, os círculos cheios representam pontos sobre ou acima da superfície ajustada, enquanto os círculos vazios representam pontos abaixo de tal superfície.

A equação ajustada resultou em, com D_{ef} dado em $m^2 \text{ min}^{-1}$:

$$D_{ef} = (7,408 \times 10^{-7} + 1,622 \times 10^{-3} MR) \exp \left[-\frac{2417}{(T + 273,15)} \right]. \quad (4.9)$$

Uma comparação da Equação (4.9) com a equação de Arrhenius, dada pela Equação (3.141) torna possível determinar a energia de ativação: $E_a = 20,09 \text{ kJ mol}^{-1}$.

Naturalmente, que esta comparação ainda requer que o fator exponencial da temperatura na Equação (4.9) seja equivalente ao fator exponencial da equação de Arrhenius e que o fator pré-exponencial D_0 seja identificado como:

$$D_0 = (7,408 \times 10^{-7} + 1,622 \times 10^{-3} \text{MR}) \quad (4.10)$$

Uma correlação entre o coeficiente de transferência convectiva de massa e a temperatura pode ser obtida pelo ajuste da Equação (3.142) aos dados obtidos por otimização para h , o que resulta no gráfico da Figura 4.141. Neste gráfico aparecem também os valores para os indicadores estatísticos, os quais podem ser considerados razoáveis.

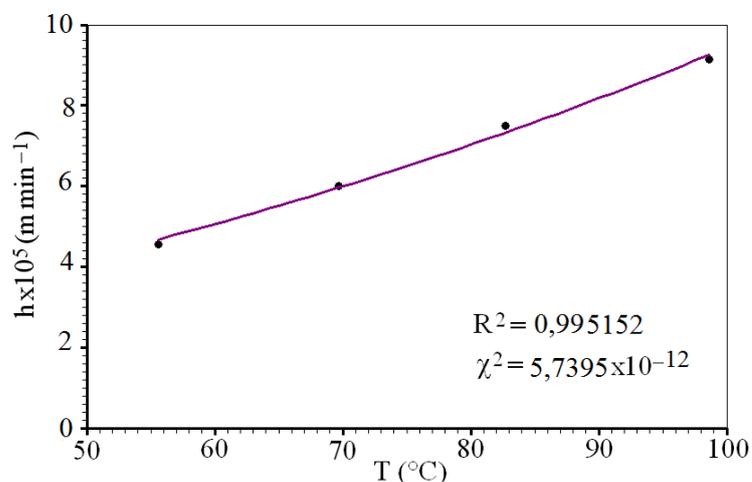


Figura 4.141- Coeficiente de transferência convectivo de massa em função da temperatura considerando variações na difusividade e nas dimensões.

Por outro lado, a equação ajustada resulta na Equação (4.11), com h dado em m min^{-1} .

$$h = 1,702 \times 10^{-2} \exp \left[-\frac{1939}{(T + 273,15)} \right] \quad (4.11)$$

Através dos resultados obtidos na Equação (4.11) é possível identificar o parâmetro $h_0 = 1,702 \times 10^{-2} \text{ m min}^{-1}$.

As taxas de secagem foram calculadas no próprio código desenvolvido, a partir dos resultados obtidos em cada simulação. O cálculo consistiu em pegar dois valores consecutivos do teor de umidade médio e dividir pelo intervalo de tempo. Para a temperatura de 55,6 °C, os resultados estão apresentados na Tabela 4.43, enquanto o gráfico pode ser visto na Figura 4.142. Através desses resultados, verifica-se que a cinética de secagem ocorre em taxa exclusivamente decrescente.

Tabela 4.43 – Taxas de secagem em função do tempo para T = 55,6 °C.

t (min)	$-\frac{dMR}{dt} (\text{min}^{-1})$	t (min)	$-\frac{dMR}{dt} (\text{min}^{-1})$
0,545	$1,6397 \times 10^{-2}$	10,355	$1,4231 \times 10^{-2}$
1,090	$1,6204 \times 10^{-2}$	14,170	$1,3414 \times 10^{-2}$
1,635	$1,6058 \times 10^{-2}$	25,070	$1,1175 \times 10^{-2}$
2,180	$1,5931 \times 10^{-2}$	33,245	$9,6808 \times 10^{-3}$
2,725	$1,5814 \times 10^{-2}$	55,045	$6,5437 \times 10^{-3}$
3,270	$1,5702 \times 10^{-2}$	87,745	$3,6299 \times 10^{-3}$
3,815	$1,5591 \times 10^{-2}$	98,645	$2,9886 \times 10^{-3}$
4,360	$1,5481 \times 10^{-2}$	120,445	$2,0365 \times 10^{-3}$
4,905	$1,5371 \times 10^{-2}$	174,945	$8,1834 \times 10^{-4}$
5,450	$1,5260 \times 10^{-2}$	230,535	$3,5864 \times 10^{-4}$
5,995	$1,5148 \times 10^{-2}$	270,320	$2,1562 \times 10^{-4}$
6,540	$1,5036 \times 10^{-2}$	310,650	$1,3800 \times 10^{-4}$
7,085	$1,4923 \times 10^{-2}$	400,030	$6,3020 \times 10^{-5}$
8,175	$1,4695 \times 10^{-2}$	545,000	$2,6034 \times 10^{-5}$

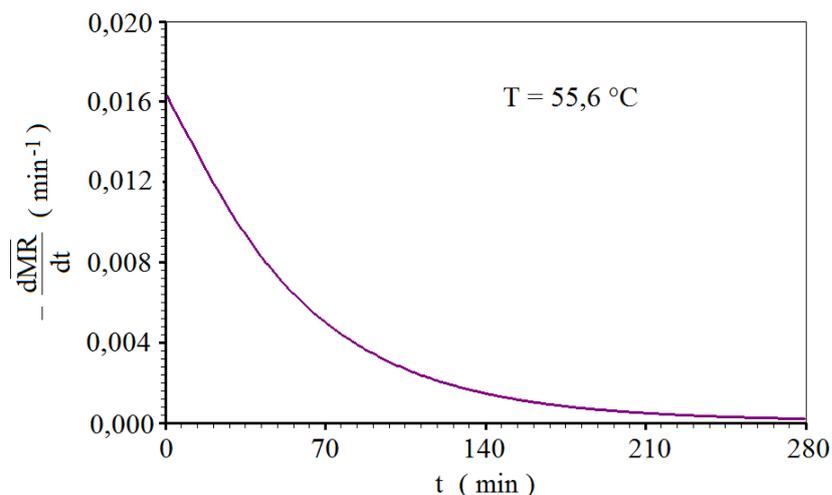


Figura 4.142 – Taxa de secagem para a temperatura de $55,6 \text{ } ^\circ\text{C}$.

As taxas de secagem para a temperatura de $69,7 \text{ } ^\circ\text{C}$ aparecem na Tabela 4.44.

Tabela 4.44 – Taxas de secagem em função do tempo para $T = 69,7 \text{ } ^\circ\text{C}$.

t (min)	$-\frac{dMR}{dt}$ (min^{-1})	t (min)	$-\frac{dMR}{dt}$ (min^{-1})
0,632	$2,1185 \times 10^{-2}$	8,216	$1,8746 \times 10^{-2}$
1,264	$2,1097 \times 10^{-2}$	10,744	$1,7688 \times 10^{-2}$
1,896	$2,1003 \times 10^{-2}$	12,008	$1,7173 \times 10^{-2}$
2,212	$2,0943 \times 10^{-2}$	14,536	$1,6182 \times 10^{-2}$
2,528	$2,0875 \times 10^{-2}$	17,696	$1,5018 \times 10^{-2}$
2,844	$2,0797 \times 10^{-2}$	19,592	$1,4358 \times 10^{-2}$
3,160	$2,0710 \times 10^{-2}$	21,488	$1,3726 \times 10^{-2}$
3,476	$2,0615 \times 10^{-2}$	24,016	$1,2926 \times 10^{-2}$
3,792	$2,0514 \times 10^{-2}$	27,176	$1,1991 \times 10^{-2}$
4,108	$2,0406 \times 10^{-2}$	30,336	$1,1124 \times 10^{-2}$
4,424	$2,0293 \times 10^{-2}$	50,244	$6,9399 \times 10^{-3}$
4,740	$2,0176 \times 10^{-2}$	80,264	$3,4529 \times 10^{-3}$
5,056	$2,0055 \times 10^{-2}$	140,304	$9,5108 \times 10^{-4}$
5,688	$1,9804 \times 10^{-2}$	200,028	$3,3327 \times 10^{-4}$
6,320	$1,9545 \times 10^{-2}$	466,100	$2,9784 \times 10^{-5}$
6,952	$1,9280 \times 10^{-2}$	632,000	$1,3941 \times 10^{-5}$

O gráfico da taxa de secagem em função do tempo é apresentado na Figura 4.143.

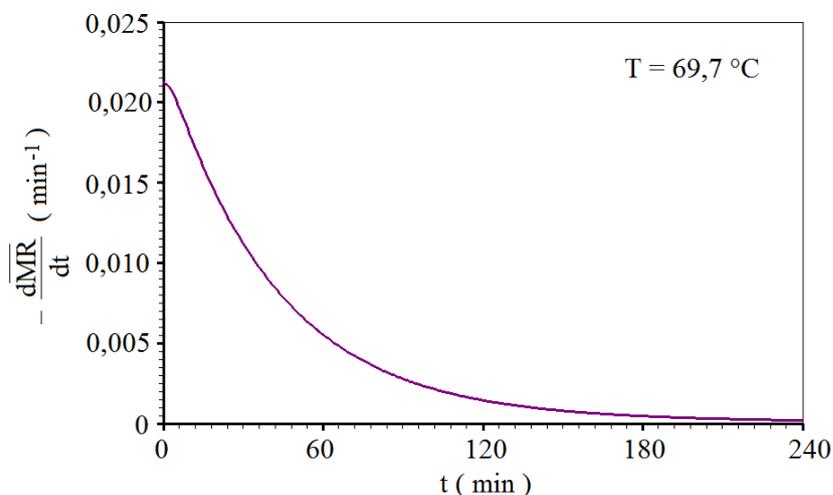


Figura 4.143 – Taxa de secagem para a temperatura de 69,7 °C.

As taxas de secagem para a temperatura de 82,7 °C estão apresentados na Tabela 4.45.

Tabela 4.45 – Taxas de secagem em função do tempo para T = 82,7 °C.

t (min)	$-\frac{d\overline{MR}}{dt}$ (min ⁻¹)	t (min)	$-\frac{d\overline{MR}}{dt}$ (min ⁻¹)
0,470	$2,5678 \times 10^{-2}$	5,170	$2,3018 \times 10^{-2}$
0,940	$2,5247 \times 10^{-2}$	6,110	$2,2561 \times 10^{-2}$
1,175	$2,5076 \times 10^{-2}$	9,165	$2,1061 \times 10^{-2}$
1,410	$2,4922 \times 10^{-2}$	15,040	$1,8203 \times 10^{-2}$
1,645	$2,4780 \times 10^{-2}$	30,080	$1,1987 \times 10^{-2}$
1,880	$2,4646 \times 10^{-2}$	50,055	$6,6700 \times 10^{-3}$
2,115	$2,4519 \times 10^{-2}$	70,030	$3,7303 \times 10^{-3}$
2,350	$2,4395 \times 10^{-2}$	90,005	$2,1368 \times 10^{-3}$
2,585	$2,4275 \times 10^{-2}$	110,215	$1,2612 \times 10^{-3}$
2,820	$2,4158 \times 10^{-2}$	130,190	$7,8354 \times 10^{-4}$
3,055	$2,4041 \times 10^{-2}$	150,165	$5,1136 \times 10^{-4}$
3,525	$2,3812 \times 10^{-2}$	200,220	$2,1508 \times 10^{-4}$
3,995	$2,3585 \times 10^{-2}$	270,015	$9,1470 \times 10^{-5}$
4,465	$2,3358 \times 10^{-2}$	470,000	$2,1969 \times 10^{-5}$

O gráfico da taxa de secagem em função do tempo é apresentado na Figura 4.144.

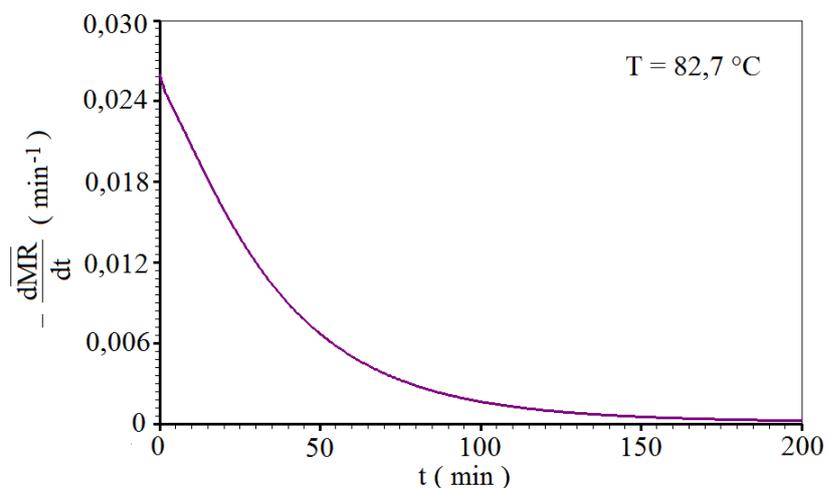


Figura 4.144 – Taxa de secagem para a temperatura de $82,7 \text{ } ^\circ\text{C}$.

Na Tabela 4.46 estão dispostas as taxas de secagem para a temperatura de $98,6 \text{ } ^\circ\text{C}$.

Tabela 4.46 – Taxas de secagem em função do tempo para $T = 98,6 \text{ } ^\circ\text{C}$.

t (min)	$-\frac{dMR}{dt}$ (min^{-1})	t (min)	$-\frac{dMR}{dt}$ (min^{-1})
0,3970	$3,2539 \times 10^{-2}$	5,1610	$2,8857 \times 10^{-2}$
0,7940	$3,2190 \times 10^{-2}$	5,9550	$2,8151 \times 10^{-2}$
1,1910	$3,1917 \times 10^{-2}$	6,9475	$2,7260 \times 10^{-2}$
1,5880	$3,1660 \times 10^{-2}$	7,9400	$2,6370 \times 10^{-2}$
1,9850	$3,1396 \times 10^{-2}$	8,9325	$2,5491 \times 10^{-2}$
2,3820	$3,1120 \times 10^{-2}$	10,1235	$2,4456 \times 10^{-2}$
2,7790	$3,0829 \times 10^{-2}$	12,1085	$2,2798 \times 10^{-2}$
3,1760	$3,0525 \times 10^{-2}$	18,0635	$1,8394 \times 10^{-2}$
3,5730	$3,0209 \times 10^{-2}$	25,0110	$1,4286 \times 10^{-2}$
3,7715	$3,0046 \times 10^{-2}$	40,0970	$8,2667 \times 10^{-3}$
3,9700	$2,9882 \times 10^{-2}$	70,0705	$2,8888 \times 10^{-3}$
4,1685	$2,9715 \times 10^{-2}$	110,1675	$8,2709 \times 10^{-4}$
4,3670	$2,9546 \times 10^{-2}$	200,0880	$1,2698 \times 10^{-4}$
4,5655	$2,9376 \times 10^{-2}$	397,0000	$1,9748 \times 10^{-5}$

O gráfico da taxa de secagem em função do tempo é apresentado na Figura 4.145.

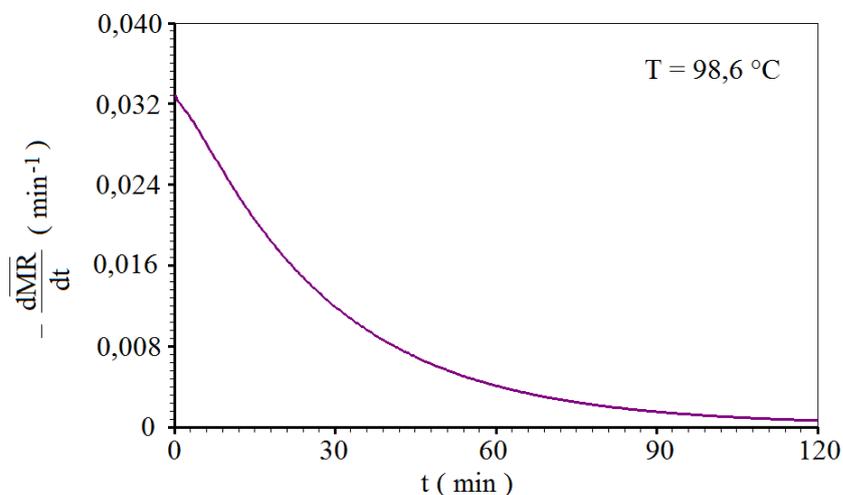


Figura 4.145 – Taxa de secagem para a temperatura de 98,6 °C.

Convém salientar que as taxas de secagem têm comportamentos semelhantes para as quatro temperaturas investigadas. Observa-se, através das Figuras 4.142 a 4.145, que as cinéticas de secagem ocorrem com taxa de secagem exclusivamente decrescente durante toda secagem (Batista et al., 2008). Pode-se afirmar ainda que no início do processo as taxas são elevadas e apresentam uma redução mais suave do que no restante do tempo.

É interessante ressaltar que além da similaridade entre as taxas de secagem, há também uma forte semelhança no comportamento da cinética de secagem para todas as temperaturas estudadas. Verifica-se, no entanto, que os valores para as taxas de secagem aumentam com o aumento da temperatura.

Naturalmente, para algumas temperaturas de secagem estipuladas neste trabalho, não seria completamente correto formular a hipótese da difusão líquida como o único mecanismo de transporte no interior das telhas. Para a temperatura de 98,6 °C, por exemplo, é possível assegurar que depois de algum tempo, deve ocorrer difusão de líquido e vapor.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Neste capítulo serão apresentadas as principais conclusões com respeito a esta pesquisa, bem como serão sugeridos alguns temas para trabalhos futuros, não só em complementação a este trabalho como também em assuntos correlatos.

5.1 Conclusões

5.1.1 Implementação do código computacional desenvolvido

De acordo com os resultados obtidos através da implementação do código computacional desenvolvido é possível concluir que:

- Os testes de consistência realizados, explorando condição de simetria para as diferentes formas geométricas apresentadas, incluindo malhas ortogonais e não-ortogonais e empregando condições de contorno prescritas e convectiva produziram resultados satisfatórios. Para as diversas formas de apresentar tais resultados como gráficos e tabelas, os valores da grandeza para volumes de controle simetricamente posicionados coincidiram, dentro de uma certa faixa de tolerância, em todos os casos analisados;

- As teorias propostas para resolver numericamente a equação de difusão aplicada a sólidos com geometrias tridimensionais arbitrárias produziram resultados compatíveis com o esperado. Foi possível obter esta conclusão, porque em todos os testes realizados para validação do código computacional desenvolvido, as soluções obtidas estavam coerentes com outras soluções disponíveis na literatura, tanto analíticas quanto numéricas;
- A comparação dos resultados obtidos através da solução numérica proposta com aqueles obtidos usando soluções analíticas para a parede infinita e o paralelepípedo possibilita concluir que a solução proposta apresenta resultados corretos, visto que, os gráficos plotados a partir das soluções obtidas pelos dois métodos coincidiram em todas as situações analisadas;
- Os resultados obtidos através do programa desenvolvido foram comparados com outras soluções numéricas disponíveis no mercado para as seguintes geometrias: parede infinita, cubo, paralelepípedo, sólidos obtidos pela extrusão de um losango, cilindro finito e cilindro infinito. A comparação mostrou resultados coerentes, visto que, em todos os problemas simulados, os resultados obtidos a partir das duas soluções podem ser considerados coincidentes dentro de uma faixa de tolerância. Assim, pode-se concluir que tal código é adequado para simular qualquer processo de difusão aplicado a sólidos com geometria arbitrária tridimensional;
- A validação do código computacional proposto também foi comprovada ao se considerar variações nas dimensões do sólido e no parâmetro de transporte Γ^Φ ;
- Quanto ao esforço computacional, o tempo gasto para resolver a equação de difusão depende de vários fatores, dentre os quais podem ser destacados o tamanho da malha e a forma geométrica, o número de passos no tempo, o valor dos parâmetros de transporte, dentre outros. Nas simulações realizadas para validar o código computacional desenvolvido, o tempo máximo de execução, foi cerca de 30 minutos para uma malha ortogonal de 33x33x33 volumes de controle e 2000 passos no tempo, utilizando os parâmetros da Tabela 4.1. Este tempo pode ser considerado razoável,

considerando que o programa foi executado num computador portátil convencional, sem requerer memória adicional;

- O código computacional proposto é versátil, já que o mesmo pode solucionar problemas de difusão que, além de considerar a geometria arbitrária tridimensional dos corpos para condições de contorno do primeiro e terceiro tipos, podem-se incluir variações dimensionais e ainda propriedades termofísicas variáveis;
- Diante dos resultados positivos obtidos para a validação da solução proposta, é possível concluir que o código computacional desenvolvido é adequado para descrever qualquer processo de difusão em sólidos com geometria arbitrária num espaço tridimensional, dentre os quais podem ser destacados: secagem, umidificação, aquecimento, resfriamento e, em certos casos, congelamento.

5.1.2 Resultados experimentais

- Os resultados obtidos a partir de dados experimentais possibilitam afirmar que, embora não haja garantias de que mínimos globais tenham sido atingidos, as hipóteses formuladas para investigar a secagem de telhas cerâmicas são adequadas. Portanto, pode-se concluir que o modelo que considera a difusão líquida é satisfatório para descrever a secagem de telhas cerâmicas em toda faixa de temperatura investigada. Esta conclusão torna-se especialmente importante para o caso de temperaturas mais elevadas. Para $T = 98,6 \text{ }^\circ\text{C}$, por exemplo, seguramente depois de algum tempo, deve ocorrer difusão de líquido e vapor;
- Comparando-se os resultados alcançados através dos processos de otimização, verifica-se que os indicadores estatísticos obtidos ao se incluir a retração volumétrica e as variações na difusividade efetiva foram significativamente melhores do que aqueles obtidos ao se considerar o volume e a difusividade constantes. Por exemplo, os quadrados dos ajustes considerando o volume e a difusividade variáveis foram de 2,2 a 3,3 vezes menores em relação à otimização considerando a difusividade e o volume constantes;

- Como esperado, o tempo de secagem diminui com o aumento da temperatura, quando as demais condições envolvidas permanecem constantes;
- O algoritmo e a metodologia desenvolvidos para a determinação dos parâmetros do processo através da minimização da função objetivo qui-quadrado, a partir de dados experimentais, produziram resultados consistentes, já que os valores obtidos nos dois modelos são compatíveis entre si e com valores disponíveis na literatura;
- Os valores para a difusividade efetiva de massa, embora fortemente dependentes da geometria e composição do produto, bem como do processo de fabricação e temperatura de secagem, são compatíveis com valores disponíveis na literatura para materiais cerâmicos. Esta afirmação vale tanto para o modelo que considerou tal parâmetro constante quanto para o modelo que considerou a difusividade como função linear da razão de umidade. Neste caso, o valor utilizado para comparação foi o valor médio da função;
- Para a faixa de temperatura investigada, nas condições descritas, não foi possível detectar defeitos significativos nas peças estudadas, causados pelo processo de secagem. Assim, a escolha de uma temperatura de secagem deve ser condicionada a outros requisitos do processo produtivo tais como custo e duração, dentre outros;
- As cinéticas de secagem das telhas cerâmicas para as quatro temperaturas estudadas apresentam forte similaridade. Assim, nos dois modelos estudados, pôde-se determinar uma expressão para a difusividade de massa em função da temperatura do ar de secagem por meio do ajuste da equação de Arrhenius aos dados obtidos por otimização para os parâmetros de transporte;
- As constantes da expressão de Arrhenius obtidas para D_{ef} e h através da solução numérica proposta, considerando os parâmetros termofísicos e o volume constantes, foram utilizadas com sucesso na simulação da cinética de secagem de telhas a uma temperatura de 72,8 °C. Este resultado sugere que outras simulações para temperaturas entre 55,6 e 98,6 °C podem ser realizadas sem o processo de otimização para a

determinação de D e h . Tais parâmetros podem ser determinados pela simples substituição da temperatura de secagem nas equações de Arrhenius, e isso permite a simulação de secagem para a temperatura estipulada;

- O tempo de execução para simular as cinéticas de secagem usando os valores obtidos para os parâmetros de transporte por otimização pode ser considerado razoável. Para uma malha $20 \times 20 \times 20$, o tempo máximo gasto na resolução numérica da equação de difusão foi cerca de 5 minutos com 1000 passos no tempo e considerando os parâmetros constantes. No caso dos parâmetros variáveis, o tempo médio de execução oscilou em torno de 8 minutos, para uma malha do mesmo tamanho e 2000 passos no tempo. Deve-se levar em conta que o programa foi executado num computador portátil convencional, sem requerer memória adicional. Contudo, o tempo gasto no processo de otimização foi bem maior para os dois modelos, chegando algumas vezes a atingir 72 horas no mesmo PC.

5.2 Sugestões para trabalhos futuros

Este trabalho tem como proposta básica resolver problemas de difusão para sólidos, com forma geométrica arbitrária. Quanto aos tipos de problemas, podem ser resolvidos tanto aqueles para os quais os parâmetros de processo são conhecidos quanto aqueles em que tais parâmetros são determinados a partir de dados experimentais via otimização.

No sentido de dar mais opções à aplicação do código computacional desenvolvido resultante desta pesquisa, é sugerido que:

- Seja implementado, na solução numérica atual, o acoplamento massa-energia visando o estudo de secagem de sólidos com uma maior aproximação do modelo matemático à situação física que descreve o fenômeno;
- Embora o termo fonte não tenha sido incluído nas simulações realizadas, a sua linearização foi implementada no código computacional desenvolvido, o qual pode,

portanto, ser aplicado a qualquer problema difusivo com geração de energia, para geometrias arbitrárias tridimensionais;

- Modificação no algoritmo para incluir os termos relativos à advecção, visando à aplicabilidade do código numérico desenvolvido a problemas difusivos-convectivos;
- Modificação no algoritmo para possibilitar a alteração de valores de parâmetros durante uma simulação. Isto pode influir tanto na redução do tempo de um processo de otimização quanto na possibilidade de estudos com a inclusão de têmpera;
- Sejam calculados, através da solução numérica proposta, os fluxos de matéria ou de energia nos volumes de controle e também nos contornos do sólido;
- O algoritmo de otimização seja aperfeiçoado visando à redução do tempo de execução na determinação dos parâmetros de processo a partir de dados experimentais;
- O algoritmo foi desenvolvido para malhas simplesmente conexas, por isso sugere-se que seja feito um estudo para possibilitar a resolução da equação de difusão usando malhas duplamente conexas ou mesmo multiplamente conexas;
- Embora as metodologias desenvolvidas tenham sido aplicadas em um problema de secagem, elas independem da natureza física do processo e podem, portanto, ser aplicadas a qualquer problema que envolva difusão. Assim, sugerem-se novas aplicações, tais como umidificação, aquecimento, resfriamento, congelamento ou qualquer outro processo de sorção e desorção para sólidos tridimensionais com geometria arbitrária;
- A retração volumétrica foi relacionada com a razão de umidade média, o que gerou bons resultados. Entretanto, parece ser fisicamente mais consistente estabelecer uma relação entre tal retração e a razão de umidade local;

- A difusão em domínio arbitrário seja estudada levando-se em consideração a possível heterogeneidade do meio;
- Sejam estudadas as tensões internas decorrentes de um processo de difusão de calor ou de massa em geometrias tridimensionais arbitrárias;
- Incluir um teste no código computacional desenvolvido para verificar quando as variações nas dimensões do sólido deixam de ser significativas, evitando, assim, cálculos desnecessários para novas coordenadas da malha;
- Com relação à aplicação em telhas cerâmicas, poder-se-ia testar outras expressões para relacionar a difusividade efetiva de massa com o teor de umidade local.

Diante do exposto, a principal e grande contribuição desta pesquisa foi colocar à disposição de interessados, subsídios teóricos no tocante à transferência de massa, com ênfase nos processos de secagem de sólidos com geometrias complexas tridimensionais, o que é pouco estudado e discutido na comunidade científica. Além disso, disponibilizou-se, também, uma ferramenta computacional que pode ser utilizada por pesquisadores de áreas que envolvam difusão de matéria ou de energia em sólidos com geometria arbitrária tridimensional.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abe, N. M.; Rocamora Jr, F. D.; Pássaro, A. **A comparison between finite volume and finite element methods for time dependent conduction problems.** Proceedings of the 10th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering ENCIT 2004 Rio de Janeiro, Brazil.

Absi, J; Smith, D.S.; Naït-Ali, B.; Grandjean, S.; Berjonnaux, J. **Thermal response of two-layer systems: Numerical simulation and experimental validation.** Journal of the European Ceramic Society, v. 25, p. 367-373, 2005.

Almeida, G. S. **Simulação e experimentação da secagem de cerâmica vermelha em sistemas térmicos industriais.** 2009, 191 p., Tese de Doutorado em Engenharia de Processos, Centro de Ciências e Tecnologia, UFCG, Campina Grande, PB, Brasil.

Amendola, M.; Queiroz, M. R. **Mathematical methodologies for calculating the mass diffusion coefficient of bananas during drying.** Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental, v. 11, n. 6, p. 623-627, 2007.

AOAC. 2005. Association of Official Analytical Chemists, **Official Method of Analysis**, 18th ed., Washington DC, USA.

Barati, A.; Kokabi, M.; Famili, M. H. N. **Drying of gelcast ceramic parts via the liquid desiccant method.** Journal of the European Ceramic Society, v. 23, n. 13, p. 2265–2272, 2003.

Barros, J. V. **Produção e estudo da microestrutura e propriedade mecânica da cerâmica $Ba_2HoZrO_{5,5}$ a base de zircônia para fabricação de cadinhos de alta temperatura.** Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica), Centro de Tecnologia e Geociências, curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Pernambuco, 2003.

Batista, V. R.; Nascimento, J. J. S.; Lima, A. G. B. **Secagem e queima de tijolos cerâmicos maciços e vazados incluindo variações dimensionais e danos estruturais.** Revista Eletrônica de Materiais e Processos, v. 3.1, p. 46-61 ISSN 1809-8797, 2008.

Baumer, J. E.; Mariani, V. C. **Investigação da condução de calor unidimensional e bidimensional em regime permanente.** Anais do XXVIII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, poster 119, São Paulo, 2005.

Bevington, P. R., Robinson, D. K. **Data reduction and error analysis for the physical sciences.** Second ed., WCB/McGraw-Hill, Boston, 1992.

Bird, R. B.; Stewart, W. E.; Lightfoot, E. N. **Transport phenomena.** 2nd Ed. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2001, 912 p.

Boas, M. L. **Mathematical methods in the physical sciences.** New York: John Wiley & Sons, Inc., 1983, 783 p.

Bortoli, A. D. L. **Introdução à dinâmica de fluidos computacional.** Editora da Universidade do Rio Grande do Sul, 2000, 134 p.

Boukadida, N.; Nasrallah, S. B. **Effect of the variability of heat and mass transfer coefficients on convective and convective-radiative drying of porous media.** Drying Technology, v. 20, n. 1, p. 67-91, 2002.

Brooker, D. B.; Bakker-Arkema, F. W.; Hall, C. W. **Drying and storage of grains and oilseeds.** New York: The AVI Publishing Company, 450 p, 1992.

Butkov, E. **Física matemática.** Rio de Janeiro: Editora Guanabara Dois S. A., 1978, 725 p.

Cadê, M. A.; Nascimento, J. J. S.; Lima, A. G. B. **Secagem de tijolos cerâmicos vazados: uma aproximação por volumes finitos.** Revista Matéria, v. 10, n. 3, p. 433-453, 2005.

Campos, M. D. **O Método de elementos finitos aplicado na simulação numérica de escoamentos de fluidos.** III Bienal da SBM, IME-UFG, 2006.

Carmo, J. E. F. **Difusão em sólidos esferoidais oblatos: modelagem e simulação.** 2000. 76 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Departamento de Engenharia Mecânica, Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal da Paraíba, Campina Grande.

Carmo, J. E. F., **Fenômenos de difusão transiente em sólidos esferoidais oblatos. Estudo de caso: secagem de lentilhas.** 2004, 139 p. Tese de Doutorado em Engenharia de Processos, Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, PB, Brasil.

Carmo, J. E. F.; Lima, A. G. B. **Drying of lentil including shrinkage: a numerical simulation.** Drying Technology, v. 23, n. 1, p. 1977-1992, 2005.

Carmo, J. E. F.; Lima, A. G. B. **Mass transfer inside oblate spheroidal solids: modelling and simulation.** Brazilian Journal of Chemical Engineering, v. 25, n. 1, p. 19-26, 2008.

Chemkhi, S.; Zagrouba, F. **Water diffusion coefficient in clay material from drying data.** Desalination, v. 185, iss. 1-3, p 491-498, 2005.

Chemkhi, S.; Zagrouba, F. **Development of a Darcy-flow model applied to simulate the drying of shrinking media.** Brazilian Journal of Chemical Engineering, v. 25, n. 3, p. 503-514, 2008.

Chiara, G. D.; Borroni, M.; Chiara, A. D. **A tecnologia do processo de produção na indústria de cerâmica vermelha.** Curso de Formação para Profissionais da Indústria de Cerâmica Vermelha. Florianópolis, setembro de 2000, 206 p.

Crank, J. **The mathematics of diffusion.** Oxford Science Publications, New York 1992, 414 p.

Elias, R. N.; Barbosa, A. L. S.; Mancini, M. C. **Secagem de grão de bico em leito fixo.** Anais do ENEMP, 1996, vol. 1, p. 273-276, 1996.

Erdoğdu, F. **Mathematical approaches for use of analytical solutions in experimental determination of heat and mass transfer parameters.** Journal of Food Engineering, v. 68, n. 2, p. 233-238, 2005.

Farias, F. P. M. **Estudo teórico da termofluidodinâmica em secadores ciclônicos.** 2006, 131 p. Tese de Doutorado em Engenharia de Processos, Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, PB, Brasil.

Farias, S. N. **Secagem de sólidos esferoidais usando o método de Galerkin.** 2002. 60 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Departamento de Engenharia Mecânica, Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal da Paraíba, Campina Grande.

Farias, V. S. O.; Silva, C. M. D. S.; Souza, J. A. R.; Silva, W. P.; Mata, M. E. R. M. C. **Comportamento da secagem de sementes de grão de bico (*cicer arietinum L.*) em camada fina: equação de page e modelo difusivo.** Anais do XXXVIII Congresso Brasileiro de Engenharia Agrícola, CD ROOM, 2009a.

Farias, V. S. O.; Souza, J. A. R.; Silva, W. P.; Neves, G. A.; Lima, A. G. B. **Estudo da cinética de secagem de telhas cerâmicas através do modelo de difusão usando solução analítica e método inverso.** Anais do XXXIV ENEMP, 2009b.

Farias, V. S. O.; Silva, C. M. D. S.; Silva, W. P.; Lima, A. G. B. **Influência da geometria na simulação do processo de secagem de telhas cerâmicas através do modelo de difusão usando soluções analíticas e método inverso.** Anais do VI Congresso Nacional de Engenharia Mecânica, CD ROOM, 2010a.

Farias, V. S. O.; Silva, C. M. D. S.; Nascimento, P. L.; Silva, W. P.; Lima, A. G. B. **Simulação do processo de secagem de telhas cerâmicas através do modelo de difusão usando soluções analíticas para diferentes geometrias.** Anais do XVIII Congresso Brasileiro de Engenharia Química, CD ROOM, 2010b.

Fernandes, L. P.; Costa, V. J.; Thomas, G. C. **Modelagem matemática da secagem de madeira em estufas - fase de aquecimento.** Proceedings of the 11th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering - ENCIT 2006, Curitiba, Brazil, Dec. 5-8, 2006.

Fioreze, R. **Princípios de secagem de produtos biológicos.** João Pessoa: Editora Universitária/UFPB, 229 p, 2004.

Ghosal, S.; Emami-Naeini, A.; Harn, Y. P.; Draskovich, B. S.; Pollinger, J. P. **A physical model for the drying of gelcast ceramics.** Journal of the American Ceramic Society, v. 82, n. 3, p. 513-520, 1999.

Hacihafizoğlu, O.; Cihan, A.; Kahveci, K.; Lima, A. G. B. **A liquid diffusion model for thin-layer drying of rough rice.** European Food Research and Technology, v. 226, n. 4, doi: 10.1007/s00217-007-0593-0, 2008.

Holanda, P. R. H. **Secador para casulos do bicho-da-seda: desenvolvimento, simulação e experimentação.** 2007, 161 p. Tese de Doutorado em Engenharia de Processos, Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, PB, Brasil.

Incropera, F. P.; Dewitt, D. P. **Fundamentos de transferência de calor e de massa.** Rio de Janeiro: LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 1992, 455 p.

Innocentinni, M. D. M.; Yamamoto, J.; Ribeiro, C.; Pileggi, R. G.; Rizzi Jr., A. C.; Bittencourt, L. R. M.; Rettore, R. P.; Pandolfelli, V. C. **Efeito da distribuição granulométrica na secagem de concretos refratários**. *Cerâmica*, v.47, n. 1, p. 131-136, 2001.

Itaya, Y.; Uchiyama, S.; Hatano, S.; Mori, S. **Drying Enhancement of clay slab by microwave heating**. *Drying Technology*, v. 23, n. 6, p. 1243-1255, 2005.

Jia, C.; Yang, W.; Siebenmorgen T. J.; Cnossen, A. G. **Development of computer simulation software for single grain kernel drying, tempering and stress analysis**. In: 2001 ASAE Annual International Meeting, Sacramento, California, USA. *Proceedings... Sacramento*: ASAE, paper number 01-3010.

Jung, C.-Y.; Kim, J.-R.; Yi, S.-C. **Two-dimensional simulation of silica gel drying using computational fluid dynamics**. *Journal of Ceramic Processing Research*, v. 9, n. 2, p. 184-188, 2008.

Keller, S. C.; Cordazzo, J.; Hinckel, P. H.; Maliska, C.R. **Additive correction multigrid method applied to diffusion problems with unstructured grids**. *Proceedings of the 10th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering- ENCIT 2004*.

Lauriano, A. C. N.; Giacomini, R. P.; Silvério, J. R. R.; Mazza, M. G. G. **Estudo da cinética de secagem de frutos de aroeira em camada delgada**. *Anais do VI Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica*, 2005.

Li, Z.; Kobayashi, N.; Hasatani, M. **Modeling of diffusion in ellipsoidal solids: a comparative study**. *Drying Technology*, v. 22, n. 4, p. 649-675, 2004.

Lima, A. G. B. **Fenômeno de difusão em sólidos esferoidais prolatos. Estudo de caso: secagem de bananas**. 1999. 244 p. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica), UNICAMP, São Paulo.

Lima, A. G. B.; Nebra, S. A., **Theoretical analysis of the diffusion process inside prolate spheroidal solids.** Drying Technology, V. 18, n. 1-2, p. 21-48, 2000.

Lima, A. G. B., Queiroz, M. R., Nebra, S. A., 2000. **Simultaneous moisture transport and shrinkage during drying of solids with ellipsoidal configuration.** In: International Drying Symposium (IDS'2000), Noordwijkerhout. v. 1. CD-ROM.

Lima, D. R.; Farias, S. N.; Lima, A. G. B. **Mass transport in spheroids using the Galerkin method.** Brazilian Journal of Chemical Engineering, v. 21, n. 4, p. 667-680, 2004.

Liu, J. Y.; Simpson, W. T. **Inverse determination of diffusion coefficient for moisture diffusion in wood.** Proceedings of 33RD ASME National Heat Transfer Conference: Heat and Mass Transfer in Porous Media, 1999, Albuquerque, New Mexico.

Liu, J. Y.; Simpson, W. T.; Verrill, S. P. **An inverse moisture diffusion algorithm for the determination of diffusion coefficient.** Proceedings of the 12th International Drying Symposium; (IDS2000) Paper No. 24, 2000, Noordwijkerhout the Netherlands.

Looi, A. Y.; Golonka, K.; Rhodes, M. **Drying kinetics of single porous particles in superheated steam under pressure.** Chemical Engineering Journal, v. 87, n. 3, p. 329-338, 2002.

Lopez, C.M.; Idiart, A.; Carol, I. **Mesomechanical analysis of concrete deterioration including time dependence.** VIII International Conference on Computational Plasticity COMPLAS VIII, p. 1-4, Barcelona, 2005.

Luikov, A. V. **Analytical heat diffusion theory.** Academic Press, New York and London, 1968, 684 p.

Mačiulaitis, R.; Malaiškienė, J.; Kiačaitė, A. **Influence of drying on the final properties of ceramics.** Proceedings of 9th International Conference “Modern Building Materials, Structures and Techniques” held on May 16–18, 2007, Vilnius: Technika, v. 1: p. 113–118. ISBN 978-9955-28-196-6.

Mačiulaitis, R.; Malaiškienė, J.; Kiačaitė, A. **The regulation of physical and mechanical parameters of ceramics bricks depending on the drying regime.** Journal of Civil Engineering and Management, v. 14, n. 4, p. 263–268, 2008.

Mačiulaitis, R.; Malaiškienė, J. **The regulation of structural parameters of ceramics depending on the drying regime.** Journal of Civil Engineering and Management, v. 15, n. 2, p. 197–204, 2009.

Maliska, C. R. **Transcal V 1.1 (1998)**, software livre, disponível no seguinte endereço eletrônico: <http://www.sinmec.ufsc.br/sinmec/software/transcal.html> acesso, data de acesso: junho/2010.

Maliska, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional.** LTC Editora S.A., Rio de Janeiro, 2004, 453 p.

Mariani, V. C.; Lima, A. G. B.; Coelho, L. S. **Apparent thermal diffusivity estimation of the banana during drying using inverse method.** Journal of Food Engineering, v. 85 n. 4, p. 569–579, 2008.

Mariani, V. C.; Amarante, A. C. C.; Coelho, L. S. **Estimation of apparent thermal conductivity of carrot purée during freezing using inverse problem.** International Journal of Food Science & Technology, v. 44, p. 1292–1303, 2009.

Mellado, E. C. E. R. **Modelo de transferência de calor e massa na secagem de madeira serrada de pinus.** 2007, 155 p. Tese de doutorado em Engenharia Florestal do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Florestal do Setor de Ciências Agrárias da Universidade Federal do Paraná, PR, Brasil.

Melo, J. C. S.; Lima, W. C. P. B.; Farias Neto, S.R.; Lima, A. G. B. **Resfriamento de frutas com forma esferoidal prolata via método integral baseado em Galerkin.** V Congresso Nacional de Engenharia Mecânica, Salvador, Bahia, 2008.

Musielak, G. **Possibility of clay damage during drying.** *Drying Technology* 2001, v. 19, n. 8, p. 1645-1659.

Musielak, G.; Mierzwa, D. **Permanent strains in clay-like material during drying.** *Drying Technology* 2009, v. 27 (7-8), p. 894-902.

Nascimento, J. J. S. **Fenômenos de difusão transiente em sólidos paralelepípedos. Estudo de caso: secagem de materiais cerâmicos.** 2002, 181 p. Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica, Centro de Tecnologia, UFPB, João Pessoa, PB, Brasil.

Nascimento, J. J. S; Belo, F. A.; Lima, A. G. B. **Solução numérica da equação de difusão transiente aplicada a sólidos paralelepípedos.** II Congresso Nacional de Engenharia Mecânica, João Pessoa, PB, 2002.

Nascimento, J. J. S.; Mederos, B. J. T.; Belo, F. A.; Lima, A. G. B. **Trasnporte de materia con reducción de volumen en el interior de sólidos paralelepípedos.** *Información Tecnológica*, v. 16, n. 1, p. 35-41, 2005.

Nascimento, J. J. S.; Lima, A. G. B.; Teruel, B. J.; Belo, F. A. **Heat and mass transfer with shrinkage during the drying of ceramic bricks.** *Información Tecnológica*, v. 17, n. 6, p. 145-151, 2006.

Ohara, A. P.; Spogis, N. and Nunhez, J. R. **Development of a 3D software for the drying of food using a computational fluid dynamic (cfd) approach.** *Drying 2004 Proceedings of the 14th International Drying Symposium (IDS 2004) São Paulo, Brazil, 2004*, v. A, p. 374-380.

Oliveira, V. A. B. **Transferência de calor e massa no interior de sólidos com forma esferoidal prolata via termodinâmica dos processos irreversíveis.** 2006, 150 p., Tese (Doutorado em Engenharia de Processos) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos, Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de Campina Grande, PB, Brasil.

Özişik, M. N. **Transferência de calor: um texto básico.** Rio de Janeiro: Editora Guanabara Koogan S.A., 1990, 661 p.

Park, K. J.; Antonio, G. C.; Oliveira R. A.; Park, K. J. B. **Conceitos de processo e equipamentos de secagem.** Campinas, 121 p., Março de 2007.

Patankar, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow.** New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1980, 197 p.

Queiroz, M. R.; Nebra, S. A. **Theoretical and experimental analysis of the drying kinetics of bananas.** Journal of Food Engineering, v. 4, n. 2, p. 127-132, 2001.

Rafiee, S.; Keyhani, A.; Mohammadi, A. **Soybean seeds mass transfer simulation during drying using finite element method.** World Applied Sciences Journal v. 4 n. 2, p. 284-288, 2008.

Ramal Jr.; F. T.; Salomão, R.; Pandolfelli, V. C. **Comportamento da secagem e explosão de concretos refratários com diferentes teores de água.** Cerâmica, v. 50, n. 315, p. 197-201, 2004.

Rambo, C. R. **Materiais avançados inspirados na natureza: estruturas celulares, fibras e compósitos.** Exacta, São Paulo, v. 4, n. 1, p. 95-103, 2006.

Salinas, C.; Ananias, A.; Alvear, M. **Simulación del secado de la madera: wood drying simulation.** Maderas, Ciência e Tecnologia, v. 6, n. 1, p. 3-18, 2004.

Salomão, R.; Bittencourt, L. R. M.; Pandolfelli, V. C. **Aditivos de secagem para concretos refratários: pó de alumínio e fibras poliméricas.** Cerâmica, v. 54, p. 259-267, 2008.

Sander, A.; Skansi, D.; Bolf, N. **Heat and mass transfer models in convection drying of clay slabs**. *Ceramics International*, v. 29, n.3, p. 641-653, 2003.

Santos, E. S.; Corrêa, P. C.; Botelho, F. M.; Baptestini, F.M.; Paixão, A. A. **Determinação do coeficiente de transferência de calor e de massa da desidratação de fatias de maçã “fuji” por infravermelho**. *Anais do XXXVIII Congresso Brasileiro de Engenharia Agrícola*, CD ROOM, 2009.

Saykova, I.; Cwicklinski, G.; Castelle, P. **Analytical approach for predicting effective diffusion coefficients in multidimensional slab geometry**. *Journal of the University of Chemical Technology and Metallurgy*, v. 44, n. 1, p. 44-49, 2009.

Silva, C. M. D. P. S. **Difusão de massa em corpos cilíndricos: modelagem e desenvolvimento de software com aplicação à secagem de bananas**. 2010, 129 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Agrícola), Departamento de Engenharia Agrícola, Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de Campina Grande, PB, Brasil.

Silva, C. M. D. S.; Farias, V. S. O.; Nascimento, P. L.; Silva, W. P.; Lima, Gomes, J. P.; Lins, M. A. A. **Determinação simultânea da difusividade efetiva e do coeficiente de transferência convectivo de massa durante a secagem de bananas inteiras usando soluções analíticas e o método inverso**. *Anais do VI Congresso Nacional de Engenharia Mecânica*, CD ROOM, 2010.

Silva, J. B. **Simulação e experimentação da secagem de tijolos cerâmicos vazados**. 2009. Tese de Doutorado do Programa de Pós-Graduação de Engenharia de Processos, Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de Campina Grande.

Silva, M. M. **Modelagem e simulação da transferência de calor em alimentos com forma paralelepipedal. Estudo de caso: resfriamento e congelamento de batatas**. 2005, 64 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Agrícola), Departamento de Engenharia Agrícola, Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de Campina Grande, PB, Brasil.

Silva, W. P. e Silva, C. M. D. P. S., **Tratamento de Dados Experimentais**. João Pessoa: UFPB/Editora Universitária, 2^a Edição, 1998, 197 p.

Silva, W. P. **Transporte difusivo em sólidos com forma arbitrária usando coordenadas generalizadas**. 2007, 263 p. Tese de Doutorado em Engenharia de Processos. Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de Campina Grande, PB, Brasil.

Silva, W. P.; Silva, D. D. P. S.; Silva, C. D. P. S.; Lima, A. G. B. **Simulação numérica da transferência de massa em sólidos de revolução via volumes finitos e coordenadas generalizadas**. 8^o Congresso Iberoamericano de Engenharia Mecânica, Cusco, Peru, 2007.

Silva, W. P.; Silva, D. D. P. S.; Silva, C. M. D. P. S.; Silva, C. D. P. S. **Numerical simulation of the water diffusion in cylindrical solids**. International Journal of Food Engineering, v. 4, n. 2, iss. 2, article 6, doi: 10.2202/1556-3758.1394, 2008a.

Silva, W. P.; Silva, C. M. D. P. S.; Lima, A. G. B. **Mass transfer study in solids through finite volume method and generalized coordinates for boundary condition of the third kind**. 16th International Drying Symposium (IDS 2008), p. 412-419, 2008b.

Silva, W. P.; Mata, M. E. R. C. M.; Silva, C. D. P. S.; Guedes, M. A.; Lima, A. G. B. **Determinação da difusividade e da energia de ativação para feijão macassar (*vigna unguiculata* (L.) Walp.), variedade sempre-verde, com base na secagem**. Eng. Agríc. Jaboticabal, v. 28, n. 2, p. 325-333, abr/jun, 2008c.

Silva, W. P.; Silva, C. M. D. P. S.; Silva, D. D. P. S.; Lima, A. G. B. **Simulação da cinética de secagem de sólidos de revolução usando o modelo difusivo e o método inverso**. Brazilian Journal of Food Technology, v. 12, n. 1, p 77-84, 2009a.

Silva, W. P.; Precker, J. W.; Silva, D. D. P. S.; Silva, C. D. P. S.; Lima, A. G. B. **Numerical simulation of diffusive processes in solids of revolution via finite volume method and**

generalized coordinates. International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 52, n. 21-22, p 4976-4985, 2009b.

Silva, W. P.; Precker, J. W.; Silva, C. M. D. P. S.; Silva, D. D. P. S. **Determination of the effective diffusivity via minimization of the objective function by scanning: Application to drying of cowpea.** Journal of Food Engineering, v. 95, n. 2, doi: 10.1016/j.jfoodeng.2009.05.008, 2009c.

Silva, W. P.; Silva, C. M. D. P. S.; Nascimento, P. L.; Silva, D. D. P. S; Silva, C. D. P. S **Influence of the Geometry on the Numerical Simulation of Isothermal Drying Kinetics of Bananas.** World Applied Sciences Journal, v. 7, n. 7, p. 846-855, 2009d

Silva, W. P.; Silva, C. M. D. P. S; Farias, V. S. O.; Silva, Neves, G. A.; Lima, A. G. B. **Numerical simulation of water transport in banana using generalized coordinates and Cauchy boundary condition.** 20th International Congress of Mechanical Engineering, 2009e.

Silva, W. P.; Precker, J. W.; Lima, A. G. B. **Drying Kinetics of Lima Bean (*Phaseolus lunatus* L.) Experimental Determination and Prediction by Diffusion Models.** International Journal of Food Engineering, v. 5, n. 3, Article 9, 2009f.

Silva, W. P. **Software “2D Grid Generation”, V 5.1** (2008a) online, disponível no endereço eletrônico <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/gg.htm>, data de acesso: dezembro/2010.

Silva, W. P. **Software 1D Heat Transfer, V.6.1** (2008b) online, disponível no endereço eletrônico <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/ht.htm>, data de acesso: junho/2010.

Silva, W. P. **Software “Diffusion RE”, V 2.2.0** (2008c) online, disponível no endereço eletrônico <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/diffusion.htm>, data de acesso: dezembro/2010.

Silva, W. P. **Discretizações em fenômenos de transporte computacional, Cursos 1 e 2** (2009) Apresentações em Powerpoint, online, disponível no endereço eletrônico: <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/TCMFC.htm>, data de acesso: maio/2010.

Silva, W.P.; Silva, C. M. D. P. S. **Lab fit curve fitting software, V.7.2.46** (2009a); online, disponível em : www.labfit.net, data de acesso: fevereiro/2011).

Silva, W.P.; Silva, C. M. D. P. S. **“Prescribed” software** (2009b), online, disponível no endereço eletrônico <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/Prescribed.htm>, e acessado em maio de 2010.

Silva, W.P.; Silva, C. M. D. P. S. **“Convective” software** (2009c), online, disponível no endereço eletrônico: <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/Convective.htm> data de acesso: maio/2010.

Silva, W. P., **“Contour plots” software** (2010) online, disponível no seguinte endereço eletrônico <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/Contour.zip>, data de acesso: janeiro/2011.

Silva, W. P.; Silva, C. M. D. P. S; Silva, C. D. P. S **Visual fortran tutorial V.5.8** online, disponível em: <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/TCMFC.htm>, data de acesso: maio/2010.

Silva, W. P.; Silva, C. M. D. P. S; Silva, D. D. P. S.; Neves, G. A.; Lima, A. G. B. **Mass and heat transfer study in solids of revolution via numerical simulations using finite volume method and generalized coordinates for the Cauchy boundary condition.** International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 53, n. 5-6, p. 1183-1194, 2010a.

Silva, W. P.; Silva, C. M. D. P. S; Farias, V. S. O.; Silva, D. D. P. S. **Calculation of the convective heat transfer coefficient and cooling kinetics of an individual fig fruit.** Heat Mass Transfer, v.46, n. 3; p. 371–380, 2010b.

Skansi, D.; Tomas, S. **Microwave drying kinetics of a clay-plate.** Ceramics International, v. 21, n. 3, p. 207-211, 1995.

Su, S. L. **Modeling of multi-phase moisture transfer and induced stress in drying clay bricks.** Applied Clay Science, v. 12, n. 3, p. 189-207, 1997.

Taylor, J.R. **An introduction to error analysis.** Sausalito, California: University Science Books, 2nd Edition, 1997, 327 p.

Ukrainczyk, N. **Thermal diffusivity estimation using numerical inverse solution for 1D heat conduction.** International Journal of Heat and Mass Transfer. v. 52, p. 5675-5681, 2009.

Vieira, C. M. F.; Feitosa, H. S.; Monteiro, S. N. **Avaliação da secagem de cerâmica vermelha através da curva de Bigot.** Cerâmica Industrial, v. 8, n.1, p. 42-46, 2003.

Wu, B.; Yang, W.; Jia, C. **A three-dimensional numerical simulation of transient heat and mass transfer inside a single rice kernel during the drying process.** Biosystems Engineering, v. 87, n. 2, p. 191-299, 2004.