



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA
CENTRO DE TECNOLOGIA E RECURSOS NATURAIS
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA AGRÍCOLA**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**DIFUSÃO DE MASSA EM CORPOS CILÍNDRICOS:
MODELAGEM E DESENVOLVIMENTO DE SOFTWARE
COM APLICAÇÃO À SECAGEM DE BANANAS**

AUTORA: Cleide Maria Diniz Pereira da Silva e Silva

ORIENTADORES: Prof.^a Dr.^a Josivanda Palmeira Gomes
Prof. Dr. Wilton Pereira da Silva

Campina Grande, março de 2010

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE TECNOLOGIA E RECURSOS NATURAIS
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AGRÍCOLA -**

**DIFUSÃO DE MASSA EM CORPOS CILÍNDRICOS:
MODELAGEM E DESENVOLVIMENTO DE SOFTWARE COM
APLICAÇÃO À SECAGEM DE BANANAS**

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Engenharia Agrícola da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Agrícola.

AUTORA: Cleide Maria Diniz Pereira da Silva e Silva

ORIENTADORES: Prof.^a. Dr.^a. Josivanda Palmeira Gomes

Prof. Dr. Wilton Pereira da Silva

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: Processamento e Armazenamento de
Produtos Agrícolas

Campina Grande – Paraíba

Março, 2010



FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCC

S586d

2010 *Silva, Cleide Maria Diniz Pereira da Silva e*

Difusão de massa em corpos cilíndricos: modelagem e desenvolvimento de software com aplicação à secagem de bananas / Cleide Maria Diniz Pereira da Silva e Silva. - Campina Grande, 2010.

129f. : il. Col.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Agrícola) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Tecnologia e Recursos Naturais.

Referências.

Orientadores : Prof.^a Dr.^a Josivanda Palmeira Gomes, Prof.^o Dr.^o Wilton Pereira da Silva.

1. Simulação de Secagem. 2. Teoria da Difusão. 3. Plataforma Windows – Linguagem Fortran. 4. Corpos Cilíndricos. 5. Engenharia Agrícola. 1. Título.

CDU 631.563.2(043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE TECNOLOGIA E RECURSOS NATURAIS
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AGRÍCOLA



PARECER FINAL DO JULGAMENTO DA DISSERTAÇÃO DA MESTRANDA

CLEIDE MARIA DINIZ PEREIRA DA SILVA E SILVA

DIFUSÃO DE MASSA EM CORPOS CILÍNDRICOS: MODELAGEM E DESENVOLVIMENTO
DE SOFTWARE COM APLICAÇÃO À SECAGEM DE BANANA

BANCA EXAMINADORA

PARECER


Dra. Josivanda Palmeira Gomes – Orientadora

Aprovado com Distinção


Dr. Wilton Pereira da Silva – Orientador

APROVADO COM DISTINÇÃO


Dr. Antônio Gilson Barbosa de Lima – Examinador

Aprovado com Distinção


Dr. João Evangelista Franco do Carmo – Examinador

Aprovado por distinção


Dr. Francisco de Assis Cardoso Almeida – Examinador

APROVADO COM DISTINÇÃO

MARÇO - 2010

DEDICATÓRIA

Dedico a meus pais José Florêncio da Silva e Maria José Diniz Silva, por sempre terem me incentivado na busca do conhecimento.

Ao meu esposo Wilton Pereira da Silva pelo grande incentivo, apoio, compreensão e dedicação em todas as horas.

Aos meus queridos filhos Cleiton, Diogo e Uilma, e também à minha nora Aline, pelo incentivo.

À minha querida neta Júlia.

À minha irmã Eliane, pelo valioso apoio.

À minha companheirinha Marladdy, que sempre permaneceu ao meu lado, em meu escritório, durante todo tempo em que lá estive, dedicando-me a este trabalho.

"É melhor lançar-se à luta em busca do triunfo mesmo expondo-se ao insucesso, que formar fila com os pobres de espírito, que nem gozam muito nem sofrem muito; e vivem nessa penumbra cinzenta sem conhecer nem vitória nem derrota."

Theodore Roosevelt

AGRADECIMENTOS

A Deus, por me ter concedido forças, paciência, persistência e muita coragem nos momentos mais difíceis.

Aos membros da banca examinadora, os professores doutores João Evangelista, Antônio Gilson e Francisco de Assis, por disponibilizarem tempo para a avaliação deste trabalho.

À Coordenadora do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Agrícola, professora Josivanda Palmeira Gomes, pela atenção e apoio.

Aos meus colegas de mestrado, pelo companheirismo. Em especial, às minhas colegas Vera Solange, Josalice, Fernanda, Denise e Vanessa com as quais convivi cursando várias disciplinas.

Aos meus orientadores, professora Josivanda Palmeira Gomes e professor Wilton Pereira da Silva, pela orientação e ajuda na realização deste trabalho.

Aos meus professores João Evangelista (Fenômenos de Transportes), José Barbosa (Fisiologia de Culturas Irrigadas), Mário Eduardo (Secagem de Produtos Agrícolas), Francisco de Assis e Josivanda (Armazenagem de Produtos Agrícolas), Maria Elita (Propriedades Físicas de Produtos Agrícolas; Redação Técnico Científica), Wilton Pereira (Introdução ao Visual Fortran, Volumes Finitos I), Alexandre José (Seminários de Engenharia Agrícola).

Às secretárias da Pós-Graduação em Engenharia Agrícola: Rivanilda, Elaine e Aparecida.

Aos funcionários do Laboratório de Processamento e Armazenamento de produtos Agrícolas (LAPPA), em especial, ao Renato, pela sua valiosa ajuda.

Aos meus colegas do Departamento de Física. Em especial, aos colegas da disciplina Física experimental I, Wilton, Vera Solange e Jossyl, pelo apoio em todos os momentos.

Aos autores referenciados que, com seus trabalhos, possibilitaram a realização desta pesquisa. Eu agradeço a todos na pessoa da professora Marlene Rita de Queiroz (UNICAMP/FEAGRI/DPPPAG), pela sua tese de doutorado, que deu base a esta dissertação de mestrado.

À Universidade Federal de Campina Grande, pela oportunidade da realização deste trabalho.

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

SUMÁRIO

LISTA DE TABELAS.....	xii
LISTA DE FIGURAS.....	xiv
NOMENCLATURA.....	xvii
RESUMO.....	xxi
ABSTRACT.....	xxii
CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO.....	1
1.1 – Objetivos gerais.....	3
1.2 – Objetivos específicos.....	3
1.3 – Principais contribuições deste trabalho.....	4
CAPÍTULO 2 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	6
2.1 – Conceitos preliminares.....	6
2.1.1 – Definições para o teor de umidade.....	7
2.1.2 – Teor de umidade de equilíbrio.....	7
2.1.3 – Umidade relativa do ar.....	10
2.2 – Considerações sobre a secagem de sólidos porosos.....	10
2.2.1 – Tipos de secagem.....	10
2.2.2 – Etapas da secagem.....	11
2.3 – Cinéticas do transporte de água: modelos empíricos.....	13
2.4 – A equação de difusão para geometrias simples.....	14
2.5 – Formulações para a solução da equação de difusão.....	16
2.5.1 – Formulações analíticas.....	16
2.5.2 – Formulações numéricas.....	18
2.6 – Algumas soluções numéricas para a equação de difusão.....	20
2.7 – Ferramentas computacionais para o estudo da difusão de calor e massa.....	22
2.8 – Otimizadores para a determinação de parâmetros.....	24

2.9 – Outros modelos de secagem.....	25
2.9.1 – Teoria da condensação–evaporação.....	25
2.9.2 – Teoria capilar.....	26
2.9.3 – Teoria de Luikov.....	26
2.9.4 – Teoria de Krischer.....	26
2.9.5 – Teoria de Philip e De Vries.....	26
2.10 – Secagem de bananas.....	27
CAPÍTULO 3 – MATERIAL E MÉTODOS.....	31
3.1 – Modelo matemático para o transporte de água em camada fina.....	31
3.2 – A equação de difusão.....	31
3.3 – Hipóteses para a obtenção de soluções analíticas.....	32
3.4 – Solução analítica para a condição de contorno de equilíbrio.....	33
3.5 – Solução analítica para a condição de contorno convectiva.....	35
3.6 – Razão de umidade.....	38
3.7 – Concepção de otimizadores para as soluções analíticas.....	38
3.7.1 – Otimizador para a solução analítica com condição de contorno de equilíbrio.....	38
3.7.2 – Otimizador para a solução analítica com condição de contorno convectiva.....	42
3.8 – Soluções numéricas para a equação de difusão em sólidos cilíndricos....	43
3.9 – Solução numérica para a condição de contorno de equilíbrio.....	43
3.9.1 – Volumes internos.....	44
3.9.2 – Volume de controle 1.....	45
3.9.3 – Volume de controle N.....	45
3.10 – Parâmetro Γ^Φ	47
3.11 – Solução numérica para a condição de contorno de convectiva.....	47
3.11.1 – Volume de controle N.....	47
3.11.2 – Volumes internos e volume 1.....	49
3.12 – Concepção para o otimizador desenvolvido para as soluções numéricas.....	49
3.13 – Resolução de sistemas de equações lineares.....	53
3.13.1 – Algoritmo de Gauss-Seidel.....	54

3.13.2 – Algoritmo TDMA.....	55
3.14 – Fluxograma referente à solução numérica da equação de difusão.....	57
3.15 – Definições para o desenvolvimento do software.....	58
3.16 – O software “Infinite Cylinder”.....	58
3.16.1 – O menu “File”.....	59
3.16.2 – O menu “Simulation”.....	62
3.16.3 – O menu “Results”.....	65
3.16.4 – O menu “Preferences”.....	67
3.16.5 – O menu “Information”.....	68
3.17 – Avaliação de expressões em Fortran.....	68
3.17.1 – Avaliação de expressões: noção geral.....	69
3.17.2 – Elementos de uma expressão: precedência.....	69
3.17.3 – Análise de uma expressão.....	70
3.18 – Dados experimentais da cinética de secagem de bananas.....	72
3.19 – Modelos para a descrição da cinética de secagem de bananas.....	73
3.20 – Softwares utilizados neste trabalho.....	73
CAPÍTULO 4 – RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	75
4.1 – Dados experimentais.....	75
4.2 – Simulações analítica e numérica: modelo 1.....	79
4.3 – Simulações analítica e numérica: modelo 2.....	81
4.4 – Simulação numérica: modelo 3.....	82
4.5 – Simulação numérica: modelo 4.....	84
4.6 – Análise dos modelos utilizados.....	91
4.7 – Expressão para a difusividade variável.....	94
4.8 – Difusividades nas interfaces dos volumes de controle.....	98
4.9 – Resultados simulados e dados experimentais.....	101
4.10 – Taxas de secagem.....	103
4.11 – Comentários sobre as metodologias desenvolvidas.....	107
4.12 – Comentários sobre as simulações realizadas.....	109
4.13 Comparação com os resultados obtidos por Queiroz e Nebra (2001).....	110

CAPÍTULO 5 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	114
5.1 – Conclusões.....	114
5.2 – Sugestões para trabalhos futuros.....	116
CAPÍTULO 6 – REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	118

LISTA DE TABELAS

TABELA 2.1 –	Equações empíricas para o cálculo do teor de umidade de equilíbrio, em que T ($^{\circ}\text{C}$) e UR (%) são a temperatura e a umidade relativa do ar de secagem.....	9
TABELA 2.2 –	Equações empíricas para a cinética de secagem de produtos	14
TABELA 2.3 –	Modelos para a difusividade D_{ef} da água no interior de um sólido poroso em função do teor de umidade X e da temperatura T	20
TABELA 3.1 –	Primeiras 30 raízes da função de Bessel de primeiro tipo e de ordem zero.....	34
TABELA 3.2 –	Algumas raízes da equação característica para números de Biot pequenos.....	37
TABELA 3.3 –	Algumas raízes da equação característica para números de Biot grandes.....	38
TABELA 3.4 –	Funções para a dependência entre Γ^{Φ} e Φ	64
TABELA 3.5 –	Precedência dos operadores.....	70
TABELA 4.1 –	Informação sobre o ar de secagem (temperatura, umidade relativa e velocidade), teor de umidade das bananas (inicial, final e de equilíbrio) e tempo de secagem de bananas.....	75
TABELA 4.2 –	Dados experimentais da razão de umidade com ar de secagem de bananas em $T = 29,9$ $^{\circ}\text{C}$	76
TABELA 4.3 –	Dados experimentais da razão de umidade com ar de secagem de bananas em $T = 49,9$ $^{\circ}\text{C}$	77
TABELA 4.4 –	Dados experimentais da razão de umidade com ar de secagem de bananas em $T = 68,4$ $^{\circ}\text{C}$	78
TABELA 4.5 –	Expressão para o raio do cilindro que representa as bananas em função da razão de umidade.....	79
TABELA 4.6 –	Resultados para as simulações: modelo 1 em $29,9$ $^{\circ}\text{C}$	80
TABELA 4.7 –	Resultados para as simulações: modelo 2 em $29,9$ $^{\circ}\text{C}$	81
TABELA 4.8 –	Resultados para as simulações usando o modelo 3 nas três temperaturas.....	82

TABELA 4.9 –	Resultados para as simulações usando o modelo 4 nas três temperaturas.....	84
TABELA 4.10 –	Indicadores estatísticos referentes aos ajustes dos modelos numéricos aos dados experimentais relativos à secagem de bananas.....	93
TABELA 4.11 –	Expressões para a difusividade em função da razão de umidade local através do uso do modelo 4.....	94
TABELA 4.12 –	Difusividade de água em bananas, obtidas como função da razão de umidade local e da temperatura de secagem (modelo 4): $Defx10^{10} (m^2 s^{-1})$	95
TABELA 4.13 –	Estrutura dos dados da difusividade efetiva para o ajuste da Eq. (4.2).....	96
TABELA 4.14 –	Difusividades nas interfaces para 29,9 °C em t = 12,18 h: $Defx10^7 (m^2 h^{-1})$	98
TABELA 4.15 –	Difusividades nas interfaces para 49,9 °C em t = 4,08 h: $Defx10^7 (m^2 h^{-1})$	99
TABELA 4.16 –	Difusividades nas interfaces para 68,4 °C em t = 5,52 h: $Defx10^7 (m^2 h^{-1})$	100
TABELA 4.17 –	Dados experimentais (exp) e resultados simulados (sim) para T = 29,9 °C.....	101
TABELA 4.18 –	Dados experimentais (exp) e resultados simulados (sim) para T = 49,9 °C.....	102
TABELA 4.19 –	Dados experimentais (exp) e resultados simulados (sim) para T = 68,4 °C.....	103
TABELA 4.20 –	Funções representando a cinética de secagem.....	104
TABELA 4.21 –	Taxas de secagem em função do tempo para T = 29,9 °C....	104
TABELA 4.22 –	Taxas de secagem em função do tempo para T = 49,9 °C....	105
TABELA 4.23 –	Taxas de secagem em função do tempo para T = 68,4 °C....	106
TABELA 4.24 –	Parâmetros ótimos para três condições de secagem: dados disponíveis na literatura.....	110

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2.1 –	(a) Curva típica de secagem destacando o teor de umidade de equilíbrio; (b) Curva típica de re-hidratação destacando o teor de umidade de equilíbrio.....	8
FIGURA 2.2 –	Esquema típico da cinética de secagem de um corpo.....	12
FIGURA 2.3 –	Esquema típico das taxas de perda de água ao longo do tempo num processo de secagem: etapa A taxa crescente, etapa B taxa constante e etapa C taxa decrescente.....	13
FIGURA 3.1 –	Esboço mostrando a solução analítica (linha contínua), os pontos experimentais e a diferença entre eles em um determinado tempo.....	39
FIGURA 3.2 –	Primeira varredura de valores de D_{ef} partindo do valor 10^{-20} : definição da região de busca entre os pontos 1 e 3.....	40
FIGURA 3.3 –	(a) Segunda varredura entre os pontos 1 e 3, que contém o mínimo para D_{ef} ; (b) Detalhe da segunda varredura mostrando uma nova região de busca entre os pontos 1' e 3'..	41
FIGURA 3.4 –	(a) Cilindro de raio R e comprimento L; (b) Malha uniforme.	43
FIGURA 3.5 –	Volume de controle P e seus vizinhos a oeste (W) e a leste (E).....	44
FIGURA 3.6 –	Esquema para o cálculo de $\bar{\Phi}^{sim}$ por interpolação linear.....	50
FIGURA 3.7 –	Fluxograma referente ao cálculo numérico do software desenvolvido.....	57
FIGURA 3.8 –	Tela principal do software “Infinite Cylinder”.....	58
FIGURA 3.9 –	Itens do menu “File”.....	59
FIGURA 3.10 –	Primeira caixa de aquisição de dados.....	60
FIGURA 3.11 –	Segunda caixa de aquisição de dados.....	61
FIGURA 3.12 –	Terceira caixa de aquisição de dados.....	62
FIGURA 3.13 –	Menu “Simulation”.....	63
FIGURA 3.14 –	Tipo do problema a ser simulado.....	63
FIGURA 3.15 –	Itens do menu “Results”.....	65

FIGURA 3.16 –	Itens do menu “Preferences”.....	67
FIGURA 3.17 –	Itens do menu “Information”.....	68
FIGURA 4.1 –	Modelo 1: comparação dos processos de otimização das soluções analítica (esquerda) e numérica (direita).....	80
FIGURA 4.2 –	Comparação dos processos de otimização das soluções analítica e numérica para o modelo 2 (condição de contorno convectiva; volume e difusividade constantes).....	81
FIGURA 4.3 –	Cinéticas de secagem para o modelo 3 (condição de contorno convectiva, difusividade constante e volume variável) nas temperaturas de 29,9; 49,9 e 68,4 °C.....	83
FIGURA 4.4 –	Cinética de secagem obtida através do modelo 4 com T = 29,9 °C.....	85
FIGURA 4.5 –	Modelo 4 para 29,9 °C. (a) Razão de umidade no contorno; (b) raio versus tempo.....	85
FIGURA 4.6 –	Modelo 4 para 29,9 °C. Gráfico de contorno representando a distribuição de umidade na seção reta do cilindro e gráfico da razão de umidade em função da posição radial em: (a) t = 12,18 h; (b) t = 24,36 h; (c) t = 48,72 h.....	86
FIGURA 4.7 –	Cinética de secagem obtida através do modelo 4 com T = 49,9 °C.....	87
FIGURA 4.8 –	Modelo 4 para 49,9 °C. (a) Razão de umidade no contorno; (b) raio versus tempo.....	87
FIGURA 4.9 –	Modelo 4 para 49,9 °C. Gráfico de contorno representando a distribuição de umidade na seção reta do cilindro e gráfico da razão de umidade em função da posição radial em: (a) t = 4,08 h; (b) t = 8,15 h; (c) t = 20,38 h.....	88
FIGURA 4.10 –	Cinética de secagem obtida através do modelo 4 com T = 68,4 °C.....	89
FIGURA 4.11 –	Modelo 4 para 68,4 °C. Razão de umidade no contorno; raio versus tempo.....	89
FIGURA 4.12 –	Modelo 4 para 68,4 °C. Gráfico de contorno representando a distribuição de umidade na seção reta do cilindro e gráfico da razão de umidade em função da posição radial em: (a) t =	

	5,52 h; (b) $t = 8,28$ h; (c) $t = 13,80$ h.....	90
FIGURA 4.13 –	Gráfico das difusividades em função da razão de umidade local obtidas com o uso do modelo 4.....	94
FIGURA 4.14 –	Difusividade de bananas: os círculos cheios representam pontos sobre ou acima da superfície enquanto que os círculos vazios representam pontos abaixo.....	97
FIGURA 4.15 –	Taxa de secagem em $29,9$ °C.....	105
FIGURA 4.16 –	Taxa de secagem em $49,9$ °C.....	106
FIGURA 4.17 –	Taxa de secagem em $68,4$ °C.....	107
FIGURA 4.18 –	Simulações usando o “Infinite Cylinder” com os parâmetros obtidos por Queiroz e Nebra (2001).....	111
FIGURA 4.19 –	Equação de Arrhenius ajustada aos resultados obtidos com o modelo 3: (a) obtidos neste trabalho; (b) obtidos por Queiroz e Nebra (2001).....	112

NOMENCLATURA

Letras Latinas

A_p, A_w, A_e – Coeficientes da equação de difusão discretizada	[-]
A_0, A_1, A_2, A_3 - Parâmetro da difusividade variável	[-]
a, b, c – Parâmetros de ajuste	[-]
A_n – Coeficiente da solução analítica dependente da posição	[-]
Bi – Número de Biot de transferência de massa.	[-]
B – Termo independente de Φ na equação de difusão discretizada	[-]
B_n – Coeficiente da solução analítica para o teor de umidade médio	[-]
c_p – Calor específico à pressão constante	[J kg ⁻¹ K ⁻¹]
D – Coeficiente de difusão de massa	[m ² s ⁻¹]
D_{ef} – Coeficiente de difusão efetivo de massa	[m ² s ⁻¹]
E, W, P – Pontos nodais	[-]
E_a – Energia de ativação	[J mol ⁻¹]
f – Fator multiplicativo do algoritmo de Levenberg-Marquardt	[-]
\bar{f} – Valor médio da série f	[-]
\bar{g} – Valor médio da série g	[-]
g – Valor simulado	[-]
h – Coeficiente de transferência convectiva de massa	[W m ⁻² K ⁻¹]
J_0, J_1 – Funções de Bessel de primeira espécie de ordens zero e um	[-]
k, k_0, k_1 – Parâmetros de ajuste	[-]
k – Condutividade térmica	[W m ⁻¹ K ⁻¹]
L – Comprimento do cilindro	[m]
\bar{m} – Massa	[kg]
m_{H_2O} – Massa de água	[kg]
m_s – Massa seca	[kg]
n – índice de parâmetro	[-]

N	– Número de elemento de cada série	[-]
N_p	– Número de pontos experimentais	[-]
P	– Número de parâmetros	[s]
P_{vs}	– Pressão de vapor saturado	[Pa]
P_v	– Pressão de vapor de água no ar	[Pa]
P_1, P_2, P_k, P_N	– Parâmetro do algoritmo TDMA	[-]
Q_1, Q_2, Q_k, Q_N	– Parâmetro do algoritmo TDMA	[-]
q	– Define o sistema de coordenadas	[-]
r	– Posição radial	[m]
r_e	– Posição da fronteira “e”	[m]
r_p	– Posição do ponto nodal “p”	[m]
r_w	– Posição da fronteira “w”	[m]
R	– Raio do cilindro (m) ou Constante universal dos gases ideais	[Jmol ⁻¹ K ⁻¹]
R^2	– Coeficiente de determinação	[-]
R_{fg}	– Coeficiente de correlação entre as séries f e g	[-]
Δr	– Espessura do volume de controle	[m]
S	– Termo fonte da equação de difusão	[-]
S^Φ	– Termo fonte da equação de transporte	[-]
t	– Tempo de secagem	[s]
t_i	– Tempo referente ao i-ésimo ponto experimental	[s]
t_i^{sim}	– Tempo referente ao i-ésimo ponto simulado	[s]
T	– Temperatura	[°C]
T_i	– Temperatura inicial	[°C]
T_∞	– Temperatura de fluido	[°C]
UR	– Umidade relativa do ar	[%]
V	– Volume do cilindro por unidade de comprimento	[m ³]
V_i	– Volume do volume de controle por unidade de comprimento	[m ³]
X	– Teor de umidade numa dada posição (base seca)	[kg kg ⁻¹]
\bar{X}	– Teor de umidade médio (base seca)	[kg kg ⁻¹]
\bar{X}_{bs}	– Teor de umidade médio em base seca	[-]

\bar{X}_{bu} – Teor de umidade médio em base úmida	[-]
X_i – Teor de umidade inicial (base seca)	[kg kg ⁻¹]
X_{eq} – Teor de umidade de equilíbrio (base seca)	[kg kg ⁻¹]
\bar{X}^* – Razão de umidade	[-]
\bar{X}_i^{ana} – Teor de umidade obtido analiticamente	[kg kg ⁻¹]
\bar{X}_i^{exp} – Teor de umidade experimental	[kg kg ⁻¹]

Letras Gregas

μ_n – Raízes da equação característica	[-]
$\delta\Phi_i$ – Desvio do i-ésimo valor experimental de Φ	[-]
Φ – Variável dependente de transporte	[-]
Φ_P, Φ_E, Φ_W – Variáveis dependentes em equação discretizada	[-]
Φ_b – Variável de transporte no contorno leste (“boundary”)	[-]
$\bar{\Phi}$ – Valor médio de Φ	[-]
Φ_i – Variável dependente de transporte do i-ésimo volume de controle	[-]
$\delta\Phi_i$ – desvio do i-ésimo valor experimental de Φ	[-]
Φ^{sim} – Valor simulado de Φ	[-]
Φ_i^{sim} – Valor simulado de Φ correspondente ao i-ésimo ponto experimental	[-]
Φ_∞ – Variável de transporte para fluido no contorno	[-]
Γ_e^Φ – Coeficiente de transporte na interface “P” e “e”	[-]
Γ_E^Φ – Coeficiente de transporte do ponto nodal E	[-]
Γ_P^Φ – Coeficiente de transporte no ponto nodal P	[-]
Γ_w^Φ – Coeficiente de transporte na interface “w” e “P”	[-]
λ – Coeficiente de transporte	[-]
ρ – Densidade (massa específica)	[kg m ⁻³]
σ – Desvio padrão	[-]

$1/\sigma_i^2$ – Peso estatístico do i-ésimo ponto experimental	[-]
χ^2 – Qui-quadrado	[-]
∇ – Gradiente	[-]
$\nabla \cdot$ – Divergente	[-]
Δ – Variação	[-]

Sobrescritos

0 – Tempo anterior
e – Face leste do volume de controle
P – Nó do volume de controle em estudo
q – Expoente da posição radial r

Subscritos

eq – Equilíbrio
e, w – Fronteiras leste e oeste de um volume de controle
H₂O – Água
i – Inicial
s – Seco
v – Vapor
vs – Vapor saturado
bs – Base seca
bu – Base úmida

RESUMO

Em muitas situações físicas de interesse, a teoria da difusão é utilizada para descrever o transporte de matéria e/ou de calor em um meio. Dentre tais situações, a teoria da difusão muitas vezes é utilizada para descrever processos de aquecimento e resfriamento de corpos; e também de absorção e dessorção de líquidos em sólidos porosos. Objetivou-se com este trabalho estudar o fenômeno da difusão transiente em sólidos com a forma cilíndrica e, para tal, apresentou-se soluções analíticas e numéricas da equação de difusão para esta geometria, para as condições de contorno de equilíbrio e convectiva. 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 termo-físicos, via técnica de otimização. O pacote computacional desenvolvido, incluindo programas envolvendo otimizadores, soluções analíticas e numéricas, foi aplicado no estudo da secagem de bananas em camada fina, usando dados experimentais disponíveis na literatura.

Palavras-chave: regime transiente, geometria cilíndrica, banana, volumes finitos, sólido poroso, difusão

ABSTRACT

In several physical situations of interest, the diffusion theory is used to describe the transport of mass and/or heat in a medium. Among such situations, it is used to describe processes of heating and cooling of bodies, and also the absorption and desorption of fluids in porous solids. This work aims to study the transient diffusion in solids with cylindrical shape and, for such, analytical and numerical solutions of the diffusion equation for this geometry are presented, for the boundary conditions of the first and third kind. Regarding the numerical solution, the one-dimensional diffusion equation was discretized using the finite volume method, with a fully implicit formulation. As part of the study, a software on the Windows platform, using the programming language FORTRAN, including the User Interface was developed. It can be used both to simulate diffusive processes and to determine thermo-physical parameters, via optimization techniques. The developed computer package, including programs involving optimizers, analytical and numerical solutions, was applied to study the thin-layer drying of bananas, using experimental data available in literature.

Keywords: unsteady state, cylindrical geometry, banana, finite volume, porous solid, diffusion

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO

Um dos importantes estágios em vários processos produtivos, nas mais diferentes áreas de atividade humana, é aquele referente à secagem de corpos ou produtos constituídos de materiais porosos. Como exemplo, a secagem é usada no processamento de produtos alimentícios, nas indústrias cerâmicas, farmacêuticas e de papel. A secagem de um corpo úmido pode acontecer de maneira artificial ou natural. No caso de secagem artificial, o método mais comum para produtos agrícolas é aquecer o ar, diminuindo a sua umidade relativa, e então transferi-lo em uma dada velocidade, para o ambiente em que ele é colocado em contato com tais produtos. Então, ocorre um contínuo processo de transferência de calor do ar para dentro do produto submetido à secagem. Simultaneamente, ocorre a transferência de umidade do interior do produto para a sua superfície; e da superfície para o ar, na forma de vapor (BROOKER et al., 1992; LIMA, 1999; SILVA, 2007).

No setor agrícola, por exemplo, a secagem logo após a colheita tem por objetivo a conservação dos produtos por um período de tempo muito maior do que aquele em que tais produtos seriam conservados sem este recurso. Obviamente, apenas este fato já agrega valor aos produtos, posto que a conservação por um longo período de tempo dá ao produtor uma maior margem de manobra quanto à melhor época para a negociação de seus produtos. Em adição, a secagem reduz substancialmente o peso e o volume de um dado produto minimizando, assim, custos com empacotamento, transporte e armazenamento (OKOS et al., 1992; MUJUMDAR, 1995).

Para alguns produtos agrícolas, a secagem agrega ainda mais valor que o da simples conservação, como é o caso da banana. Como resultado do processo de secagem pode-se produzir banana-passa e chips, e tais produtos têm um grande valor comercial em várias partes do mundo. (NOGUEIRA e PARK, 1992; PEARCE, 2003; KATEKAWA, 2006).

Em diversos setores da indústria de alimentos, uma das etapas essenciais no processo produtivo, tanto do ponto de vista econômico quanto da qualidade do produto final, consiste em sua secagem. Assim, 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. Com esta pesquisa pretende-se colocar à disposição de interessados, subsídios teóricos no tocante à transferência de massa nos processos de secagem de sólidos cuja forma possa ser aproximada a um cilindro infinito, incluindo suas variações dimensionais, bem como propriedades termo-físicas variáveis, o que ainda é pouco discutido pela comunidade científica: normalmente, lança-se mão de soluções analíticas na descrição de processos de secagem, o que implica, quase sempre, no descarte de variações de parâmetros. Além disso, em muitos trabalhos disponíveis na literatura (DOYMAZ e PALA, 2003; IGUAZ et al., 2003; LIMA et al., 2004; BELLO et al., 2004; HACIHAFIZOGLU et al., 2008; SILVA et al., 2008b), usa-se a condição de contorno de equilíbrio que, embora resulte em soluções simples, nem sempre são as mais apropriadas para a descrição do processo de transporte de água. Assim, diante da escassez de pesquisas em fenômenos de difusão de água em corpos cilíndricos enfocando parâmetros termo-físicos variáveis, e em particular na sua determinação através de conceitos de otimização, esta pesquisa explora aspectos inovadores, fornecendo novos subsídios à comunidade científica com relação à descrição da secagem de produtos em camada fina. Em adição, deve ser mencionado que o estudo do transporte de água em camada fina oferece subsídios para o estudo da secagem em camada espessa, o que desperta um maior interesse em alguns setores industriais.

1.1 – Objetivos gerais

Os objetivos desta pesquisa são enumerados a seguir, e é pressuposto que o domínio a ser estudado seja um sólido que possa ser considerado um cilindro infinito.

- Apresentar soluções analíticas e numéricas para o problema de difusão transiente de massa, usando a teoria da difusão líquida;
- Modelar e estudar o efeito do fenômeno de difusão de massa em sólidos com forma cilíndrica;
- Desenvolver um software computacional, na plataforma Windows, incluindo a interface com o usuário, para simular o processo de difusão de água e determinar parâmetros termo-físicos, via técnicas de otimização;
- Simular a distribuição do teor de umidade no interior de sólidos e suas respectivas cinéticas de difusão, utilizando-se de modelos matemáticos a serem desenvolvidos;
- Estudar o efeito da retração ocorrida em um sólido devido à secagem;

1.2 – Objetivos específicos

- Aplicar os modelos analíticos e numéricos desenvolvidos no estudo da secagem de bananas;

- Determinar os coeficientes de transferência de massa: difusivo no interior e convectivo na superfície do produto, para várias condições de secagem de bananas;
- Estudar os efeitos das considerações adotadas nos diversos modelos, sobre os coeficientes de transporte durante a secagem de bananas;
- Obter correlações matemáticas para os coeficientes de difusão e de transferência convectiva de massa, como função dos parâmetros de secagem e das dimensões de bananas.

1.3 – Principais contribuições deste trabalho

Com esta pesquisa pretende-se oferecer as seguintes contribuições à comunidade científica:

- Um otimizador por varredura, a ser acoplado em soluções analíticas da equação de difusão para várias geometrias, em geral, e em particular para o cilindro infinito. Com isto, pode-se determinar a difusividade efetiva e o coeficiente de transferência convectivo de massa a partir de dados experimentais para a cinética do transporte de água em um produto;
- Uma solução numérica para a equação de difusão para sólidos na forma de um cilindro infinito, pressupondo parâmetros termo-físicos variáveis, para as condições de contorno de primeiro e de terceiro tipos;
- O software “Infinite Cylinder”, que possibilita simular numericamente a cinética do transporte de água em sólidos cilíndricos, e também determinar a

difusividade efetiva e o coeficiente de transferência convectiva de massa para esta geometria. Este software é considerado como a principal contribuição deste trabalho;

- Um modelo para a descrição da cinética de secagem de bananas, o mais próximo possível da situação física a ser investigada, considerando: condição de contorno convectiva, difusividade efetiva variável (em função da razão de umidade local) e volume variável (em função da razão de umidade média).

CAPÍTULO 2 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo são apresentados alguns estudos disponíveis na literatura visando a familiarizar os interessados em temas ligados à simulação do transporte de água em um produto. A revisão bibliográfica pretende dar uma idéia sobre o estado de arte com respeito às ferramentas disponíveis para a simulação da cinética do transporte de água, enfocando tanto formulações analíticas quanto numéricas. No presente trabalho, a expressão “transporte de água” tem o significado tanto de secagem quanto de re-hidratação de um sólido poroso. Particularmente, será dada ênfase à apresentação de estudos sobre o transporte de água em camada fina. Isto porque o objetivo principal deste trabalho tem como base a proposição de metodologias para a otimização e a descrição deste tipo de transporte em alguns sólidos de forma cilíndrica. Tais metodologias envolvem tanto simulações através de formulações analíticas quanto de formulações numéricas. Ainda, como tais ferramentas serão aplicadas no estudo da cinética de secagem de bananas, uma revisão bibliográfica contendo informações relevantes acerca desta fruta também será apresentada.

2.1 – Conceitos preliminares

Inicialmente, algumas definições preliminares são revistas nesta seção, com o objetivo de viabilizar a revisão bibliográfica do tema principal deste trabalho, que é o desenvolvimento de metodologias analíticas e numéricas para a simulação do transporte de água no interior de um produto de forma cilíndrica.

2.1.1 – Definições para o teor de umidade

O teor de umidade médio \bar{X} é definido como a massa de água contida em um corpo em relação à sua massa total. A esta definição dá-se o nome de teor de umidade em base úmida \bar{X}_{bu} , que pode ser expressa da seguinte forma (BROOKER et al., 1992):

$$\bar{X}_{bu} = \frac{m_{H_2O}}{m_{H_2O} + m_s}, \quad (2.1)$$

onde m_{H_2O} é a massa de água, $(m_{H_2O} + m_s)$ é a massa total e m_s é a massa do corpo seco.

O teor de umidade médio de um corpo também pode ser definido através da massa de água em relação à massa seca deste corpo. Neste caso, tal teor é expresso do seguinte modo:

$$\bar{X}_{bs} = \frac{m_{H_2O}}{m_s}, \quad (2.2)$$

onde \bar{X}_{bs} é o teor de umidade médio em base seca. O termo “médio” é usado neste trabalho para diferenciar esta definição do teor de umidade local, numa determinada posição do corpo. Por outro lado, na forma como foram expressas as definições anteriores, dadas pelas Eq. (2.1) e (2.2), os respectivos valores para os teores de umidade são freqüentemente referidos como teores na forma decimal. Em geral, os valores obtidos através da Eq. (2.1) podem ser escritos na forma percentual pela multiplicação de tais valores por 100.

2.1.2 – Teor de umidade de equilíbrio

Conforme vários pesquisadores e, particularmente, Silva (2007), o teor de umidade de equilíbrio, X_{eq} , é interpretado como o valor do teor de umidade médio de um corpo, exposto a determinadas condições do meio que o envolve, após um tempo

suficientemente longo, de tal forma que não haja mais mudança na sua massa em tempos posteriores. A Fig. 2.1 apresenta curvas típicas da cinética de secagem e de re-hidratação de um sólido poroso, em que pode ser observado tanto o teor de umidade inicial X_i quanto o teor de umidade de equilíbrio X_{eq} . Deve ser observado que, para os casos de interesse neste trabalho, tanto X_i quanto X_{eq} possui uma distribuição espacial uniforme no interior do sólido e, por isto, não há a necessidade do uso de uma barra para distinguir estes parâmetros dos correspondentes valores locais, isto é, $\bar{X}_i \equiv X_i$ e $\bar{X}_{eq} \equiv X_{eq}$.

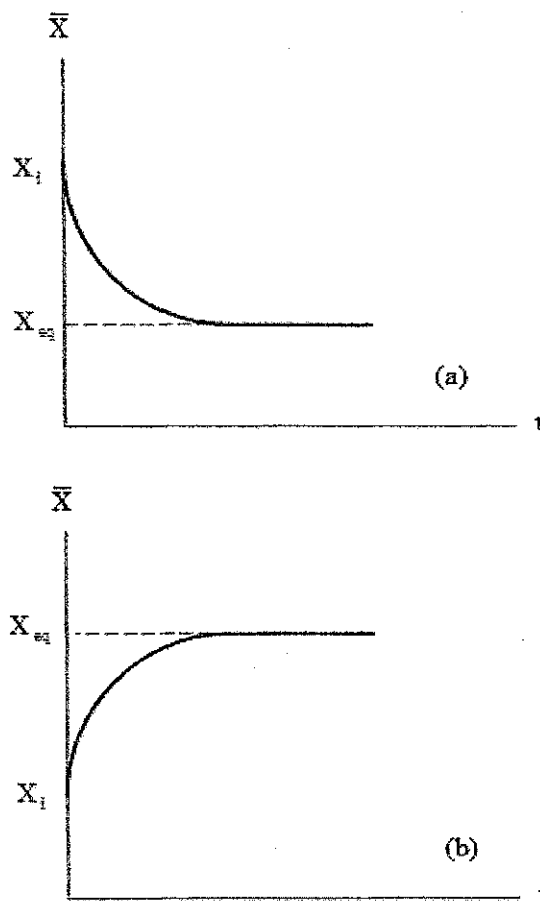


Figura 2.1 – (a) Curva típica de secagem destacando o teor de umidade de equilíbrio;

(b) Curva típica de re-hidratação destacando o teor de umidade de equilíbrio.

Existem várias equações empíricas disponíveis na literatura para a determinação do teor de umidade de equilíbrio de vários produtos. O interesse neste parâmetro é devido ao fato de que a descrição do transporte de água em um sólido ao longo do

tempo depende de seu valor. A quantidade de energia requerida no processo, por exemplo, depende, dentre outros fatores, das condições iniciais do produto e do seu teor de umidade de equilíbrio, também denotado por teor de água de equilíbrio. Assim, a determinação do teor de umidade de equilíbrio desempenha um papel fundamental em processos de secagem. Para a determinação deste parâmetro, vários modelos teóricos têm sido propostos e, dentre eles, podem ser citados Kelvin (condensação por capilaridade), Langmuir, BET, GAB (cinética de adsorção) e Harkins-Jura (teoria de potencial). Detalhes sobre tais modelos podem ser obtidos, por exemplo, em Brooker et al. (1992). Segundo os mesmos autores, destes modelos teóricos, apenas a equação GAB é capaz de prever teores de água de equilíbrio para produtos agrícolas, de forma acurada, para as mais diversas situações práticas de condições de secagem. Como as constantes desta equação não são conhecidas para muitos produtos, cientistas e engenheiros utilizam equações empíricas mais simples como as de Chung, Copace, Henderson, Halsey, Chung-Pfost, Oswin, Sabbah, Sigma-Copace e Cavalcanti Mata. Todas essas equações envolvem apenas três parâmetros, e são comumente encontradas em trabalhos relativos à secagem de produtos em camada fina. Cada uma delas pode, ou não, apresentar bons resultados na determinação do teor de água de equilíbrio para um tipo específico de produto. Algumas das equações empíricas disponíveis na literatura, e que foram mencionadas anteriormente, são apresentadas através da Tab. 2.1, dada a seguir.

Tabela 2.1 – Equações empíricas para o cálculo do teor de umidade de equilíbrio, em que T (°C) e UR (%) são a temperatura e a umidade relativa do ar de secagem.

N ^o	Nome	Equação empírica
1	Chung	$X_{eq} = a - b \ln[-(T + c) \ln(UR/100)]$
2	Copace	$X_{eq} = \exp(a - bT + c UR/100)$
3	Henderson modificada	$X_{eq} = \{-\ln(1 - UR/100)/[a(T + b)]\}^c$
4	Chung-Pfost modificada	$X_{eq} = -\ln[-(T + b) \ln(UR/100)/a]/c$
5	Halsey modificada	$X_{eq} = [-e^{(a+bT)} / \ln(UR/100)]^{(1/c)}$
6	Oswin modificada	$X_{eq} = \{(a + bT)[(UR/100)/(1 - UR/100)]\}^c$
7	Sabbah	$X_{eq} = a[(UR/100)^b]/T^c$
8	Sigma-Copace	$X_{eq} = \exp[a - bT + c \exp(UR/100)]$
9	Cavalcanti Mata	$X_{eq} = [-\ln(1 - UR/100)/(aT^b)]^c$
10	Silva et al. (2005c)	$X_{eq} = e^{aT} / \ln(b + cUR + 1/UR)$

Fonte: Silva et al. (2005c)

2.1.3 Umidade relativa do ar

O teor de umidade de equilíbrio para um determinado produto depende, basicamente, da temperatura T do ar de secagem e também da atividade de água a_w que, em condições de equilíbrio, é igual à umidade relativa do ar de secagem, UR , que é definida por (BROOKER et al., 1992)

$$UR = \frac{P_v}{P_{vs}}, \quad (2.3)$$

onde P_v é a pressão parcial de vapor de água no ar de secagem e P_{vs} é a pressão de vapor saturado.

2.2 – Considerações sobre a secagem de sólidos porosos

Nesta seção serão abordadas algumas informações gerais sobre a secagem de sólidos porosos envolvendo os tipos e as etapas referentes ao processo.

2.2.1 – Tipos de secagem

A forma pela qual a água é retirada de um corpo poroso depende das características deste corpo e do tipo de secagem empregada. Conforme Silva (2007) e suas referências, existem vários tipos de secagem e, dentre estes, podem ser citados: secagem com ar quente, secagem a vácuo, secagem a frio (liofilização ou “freeze drying”) e secagem por microondas.

A secagem com ar quente é aquela na qual o ar ambiente é aquecido e passa pelo corpo, cedendo calor a ele, ao mesmo tempo em que retira água na forma de vapor. De acordo com a teoria da difusão líquida, uma parte do calor aquece o corpo e a outra parte vaporiza a água em sua superfície, sendo que o vapor produzido é retirado das vizinhanças pelo fluxo de ar.

A secagem a vácuo é utilizada nos casos em que, por algum motivo, a temperatura do corpo não pode ser elevada. Neste caso, pode-se reduzir a pressão do ar no ambiente em que se encontra o produto, o que torna possível a vaporização da água em seu interior mesmo em baixas temperaturas.

Na secagem a frio, a água no interior do corpo é congelada e, posteriormente, a pressão do ambiente em que se encontra tal corpo é reduzida. Dessa forma, ocorre a sublimação da água no interior do corpo, e então a água é transportada para o meio externo na forma de vapor.

O tipo mais comum de secagem é o que usa ar quente na remoção de água, utilizado largamente na indústria como, por exemplo, na secagem de macarrão (INAZU e IWASAKI, 2000), carnes e pescado (TRUJILLO et al., 2004; TELLO-PANDURO et al., 2004), meios porosos em geral (COUSSOT, 2000; LI et al., 2004; SCHWARTZ et al., 2005), dentre muitos outros.

Detalhes sobre a secagem a vácuo podem ser obtidos, por exemplo, em Ferreira e Silveira Júnior (1999). Eles descreveram uma montagem experimental para a secagem a vácuo de manjerição em diferentes pressões (0,28, 0,41 e 0,54 atm), fazendo uma avaliação sobre o produto final, inclusive verificando a sua aceitabilidade.

Mascarenhas et al. (1997) fizeram uma completa descrição da secagem a frio, a liofilização, e propuseram um modelo computacional baseado em análise por elementos finitos para este processo de secagem. O processo também é descrito e utilizado por McAtee et al. (1982) e por Cochrane et al. (2006).

Já a secagem por microondas tem sido descrita e usada em vários trabalhos de pesquisa sobre secagem de materiais porosos como, por exemplo, em Feng et al. (2004), em Araszkievicz et al. (2004) e em Itaya et al. (2004).

2.2.2 – Etapas da secagem

Embora cada tipo de produto apresente características próprias referentes à sua cinética de secagem, de uma maneira geral o comportamento do teor de umidade ao

longo do tempo pode ser observado através da Fig. 2.2 (MOINÁR, 1995; GHOSAL e EMAMI-NAEINI, 1999).

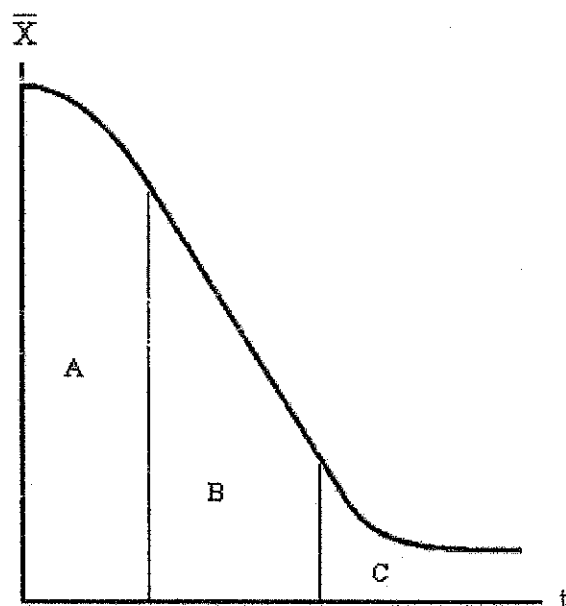


Figura 2.2 – Esquema típico da cinética de secagem de um corpo.

Na etapa A, o calor que é transferido pelo ar de secagem tanto aquece o corpo como vaporiza a água que recobre a sua superfície. À medida que o tempo passa, a temperatura do corpo atinge a temperatura de bulbo úmido do ar de secagem. Então, inicia-se a fase B, na qual a temperatura do corpo permanece constante. Todo o calor transferido pelo ar de secagem é usado para vaporizar a água que ainda recobre a superfície do corpo. Quando a quantidade de água transferida do interior não é mais suficiente para recobrir toda a superfície do corpo, inicia-se a fase C, que é acompanhada de um novo aumento da temperatura do corpo até atingir a temperatura de bulbo seco do ar. Esta fase termina quando o corpo atinge o teor de umidade de equilíbrio.

A etapa A é chamada de fase ou período de taxa crescente, enquanto que a etapa B é denominada de fase de taxa constante. A fase C é chamada de fase de taxa decrescente. Na Fig. 2.3 é mostrado o gráfico da taxa de perda de água em função do

tempo t , $-\frac{d\bar{X}}{dt}$, o que possibilita compreender melhor a razão dos nomes de cada uma das etapas da cinética de secagem de um produto.

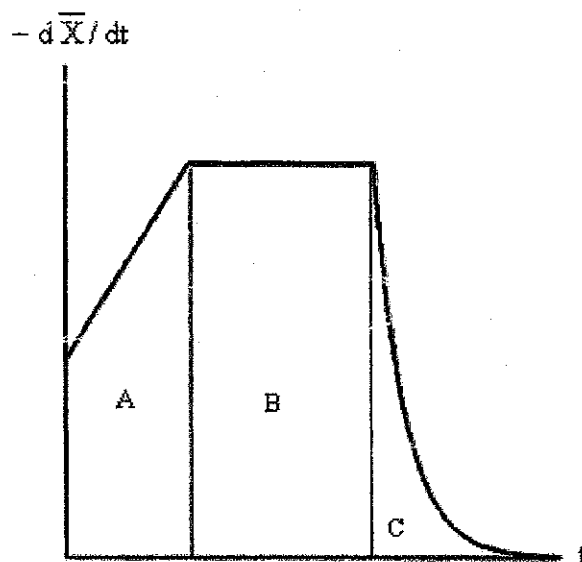


Figura 2.3 – Esquema típico das taxas de perda de água ao longo do tempo num processo de secagem: etapa A taxa crescente, etapa B taxa constante e etapa C taxa decrescente.

Naturalmente, num processo de secagem pode não acontecer todas as fases mencionadas, ou mesmo a secagem pode ocorrer em apenas uma única fase. Secagem em uma única fase acontece, por exemplo, com a maioria dos produtos agrícolas, em que as taxas são exclusivamente decrescentes.

2.3 – Cinéticas do transporte de água: modelos empíricos

A absorção e a dessorção são mecanismos usados em vários tipos de indústrias com o objetivo de transportar água no interior de produtos e, particularmente, estes mecanismos são usados na indústria de produtos agrícolas e de produtos alimentares. No caso do transporte de água em camada fina, vários modelos empíricos estão disponíveis na literatura para descrever a cinética do transporte de água em um produto (OZDEMIR e DEVRES, 1999; DOYMAZ, 2005; SIMAL et al., 2005; AKPINAR e BICER, 2006; POONNOY et al., 2007; SINGH et al., 2007; BELLO et al., 2008). Embora modelos empíricos sejam úteis para descrever a cinética do transporte de água

de um modo satisfatório, não possibilitam a visualização da distribuição de umidade dentro de um produto em um tempo específico. A vantagem do conhecimento desta distribuição de água é poder prever as regiões de maior tensão hídrica no interior do produto e, assim, poder exercer um maior controle sobre as condições de absorção ou dessecção, evitando danos ao produto durante o processo.

Alguns dos modelos empíricos mais comumente encontrados na literatura são apresentados por meio da Tab. 2.2, dada a seguir.

Tabela 2.2 – Equações empíricas para a cinética de secagem de produtos.

N ^o	Nome do modelo	Modelo empírico
1	Newton	$\bar{X} = X_{eq} + (X_i - X_e) \exp(-kt)$
2	Page	$\bar{X} = X_{eq} + (X_i - X_e) \exp(-kt^n)$
3	Henderson e Pabis	$\bar{X}^* = a \exp(-kt)$
4	Dois termos	$\bar{X}^* = a \exp(-k_0 t) + b \exp(-k_1 t)$
5	Wang e Sing	$\bar{X}^* = 1 + at + bt^2$
6	Midilli	$\bar{X}^* = a \exp(-kt^n) + bt$
7	Aproximação da difusão	$\bar{X}^* = a \exp(-k_0 t) + (1 - a) \exp(-k_1 t)$
9	Thompson	$t = a \ln(\bar{X}^*) + b [\ln(\bar{X}^*)]^2$

Fonte: Corrêa et al. (2007)

Na Tab. 2.2 foi definido o termo $\bar{X}^* = (\bar{X} - X_{eq}) / (X_i - X_{eq})$, e tal termo é chamado de razão de umidade.

2.4 – A equação de difusão para geometrias simples

Em vários trabalhos disponíveis na literatura sobre transferência de calor e de massa, a equação de difusão é utilizada na descrição dos processos (SANDER et al., 2003; ROBERTS e TONG, 2003; WU et al., 2004; CARMO e LIMA, 2005;

CAVALCANTI et al., 2005; PIROZZI e AMÊNDOLA, 2005). Em alguns destes trabalhos, a forma do corpo objeto de estudo é aproximada para uma esfera, um cilindro infinito, ou uma parede infinita, em que a difusividade de massa é suposta constante. Na maioria destes trabalhos é suposto, ainda, que a água ou o calor sejam transportados, no interior do corpo, por difusão. Para o caso da água, é suposto ainda que a difusão ocorra na fase líquida, com vaporização na superfície. Isto é uma simplificação que, segundo Keey (1992), recebe severas críticas, particularmente quando se impõe ao corpo a condição de contorno de equilíbrio. Na verdade, o transporte de água no interior de um corpo pode ocorrer através de vários processos simultâneos, e não apenas por difusão líquida. Por outro lado, mesmo com a aproximação da forma do corpo para uma forma geométrica simples, reduzindo o problema ao caso de difusão unidimensional, é reportada na literatura a dependência da difusividade de massa com o teor de umidade do corpo e, também, com a sua temperatura (MARINOS-KOURIS e MAROULIS, 1995). Assim, a suposição de um valor constante para a difusividade de massa freqüentemente empobrece os resultados obtidos. Apesar disso, em algumas situações pode-se conceber o conceito de uma difusividade efetiva com valor constante, D_{ef} , que não seja uma característica inerente ao corpo, mas sim resultante de todas as simplificações efetuadas (SILVA, 2007). Levando em consideração tais simplificações, a equação de difusão possui solução analítica para muitos casos de interesse. É interessante observar que a equação de difusão unidimensional sem o termo fonte pode ser escrita, para propriedades termo-físicas constantes, do seguinte modo (FIOREZE, 2004):

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{1}{r^q} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^q \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right). \quad (2.4)$$

Na Eq. (2.4) o parâmetro Γ^Φ representa a difusividade da variável dependente Φ (que tanto pode significar teor de umidade quanto temperatura) e o valor do expoente q define o sistema de coordenadas para a solução da equação de difusão unidimensional:

- $q = 0$ implica em parede infinita (coordenadas cartesianas);

- $q = 1$ implica em cilindro infinito (coordenadas cilíndricas);
- $q = 2$ implica em esfera (coordenadas esféricas).

A Eq. (2.4) pode ser resolvida tanto analítica (LUIKOV, 1968; CRANK, 1992; FIOREZE, 2004;) quanto numericamente (GASTÓN et al., 2003; WU et al., 2004; SILVA et al., 2007). Mas, para simular a cinética de secagem a partir de dados experimentais, é necessário que algum tipo de otimizador seja acoplado à solução. Uma revisão acerca de otimizadores disponíveis na literatura será feita na seção 2.8.

2.5 – Formulações para a solução da equação de difusão

As soluções da equação de difusão para a simulação do transporte de água podem ser enquadradas em duas categorias, de acordo com a sua formulação:

- formulação analítica;
- formulação numérica.

Algumas considerações sobre cada formulação serão feitas a seguir.

2.5.1 – Formulações analíticas

Em geral, modelos difusivos descrevem a cinética do transporte de umidade no interior de um corpo de forma satisfatória. Para geometrias complexas, ou geometrias simples com volume e difusividade variáveis, em geral soluções numéricas são requeridas para a equação de difusão (GASTÓN et al., 2002; GASTÓN et al., 2003; WU et al., 2004; AMENDOLA e QUEIROZ, 2007; SILVA et al., 2008a). A vantagem de soluções numéricas, em relação às soluções analíticas, é que as primeiras possibilitam incluir volume e difusividade variáveis no modelo a ser resolvido. Mas para geometrias simples, com volume e difusividade constantes, supondo a distribuição inicial de umidade uniforme, a equação de difusão tem soluções analíticas (LUIKOV, 1968; CRANK, 1992), e tais soluções são usadas por muitos pesquisadores para

descrever o teor de umidade de um corpo ao longo do tempo (LIMA et al., 2004; BELLO et al., 2004; AMENDOLA e QUEIROZ, 2007; CUNNINGHAM et al., 2007; HACIHAFIZOGLU et al., 2008). Em adição, uma vez conhecida a difusividade, a distribuição de umidade no interior do corpo pode ser determinada, e esta é uma informação útil para a análise de tensões internas, o que não é possível quando a cinética é descrita através de modelos empíricos.

Particularmente para grãos, em muitos processos de absorção e dessorção de umidade, hipóteses simplificadoras feitas por vários pesquisadores possibilitam assumir a condição de contorno do primeiro tipo para a obtenção da solução da equação de difusão (AZZOUZ et al., 2002; DOYMAZ e PALA, 2003; IGUAZ et al., 2003; LIMA et al., 2004; BELLO et al., 2004; HACIHAFIZOGLU et al., 2008; SILVA et al., 2008b). Com isto, as soluções para várias geometrias simples são dadas por uma série infinita que depende apenas do teor de umidade inicial (assumido como uniforme), do teor de umidade de equilíbrio e da difusividade efetiva.

Em vários trabalhos disponíveis na literatura, a difusividade efetiva é determinada por regressão não-linear, usando-se uns poucos termos da solução analítica para a realização do ajuste (PARK et al., 2002; TELLO-PANDURO et al., 2004; SILVA et al., 2008b). Embora este recurso seja útil para descrever a maior parte da cinética do transporte de umidade no produto, tal procedimento não produz bons resultados para descrição dos instantes iniciais da cinética.

Em uma quantidade substancial de trabalhos disponíveis na literatura, usa-se apenas o primeiro termo da série que representa a solução analítica para realizar o ajuste (IGUAZ et al., 2003; DOYMAZ, 2004; SHARMA et al., 2005; CUNNINGHAM et al., 2007). Tal procedimento é razoável quando se usa uns poucos pontos experimentais relativos à parte final do processo de transporte de umidade. Entretanto, embora o valor determinado para a difusividade efetiva seja aceitável, não é possível descrever toda a cinética do transporte de umidade posto que um único termo descreve de forma satisfatória apenas o período final do processo.

Na tentativa de melhorar os resultados obtidos para a descrição da cinética, em alguns trabalhos é utilizado um segundo parâmetro de ajuste multiplicado pelo termo

exponencial (AZZOUZ et al., 2002; MOHAPATRA e RAO, 2005; THAKUR e GUPTA, 2006). Mas em geral, tal procedimento não resolve o problema relativo aos primeiros pontos experimentais, e a expressão obtida por ajuste já não pode mais ser considerada como a solução da equação de difusão, e sim, deve ser considerada como uma equação empírica.

2.5.2 – Formulações numéricas

Com o objetivo de obter uma solução analítica para descrever a cinética de secagem, normalmente é assumido que a difusividade de água e o volume do produto sejam constantes durante todo o processo, o que é uma simplificação feita por vários pesquisadores (LIMA et al., 2004; DOYMAZ, 2005; AMENDOLA e QUEIROZ, 2007; HACIHAFIZOGLU et al., 2008). Como a solução analítica é dada por uma série infinita, tal série é truncada e, em geral, poucos termos são usados na determinação da difusividade de água por ajuste de curvas (TELLO-PANDURO et al., 2004; DOYMAZ, 2005; SILVA et al., 2008b), o que é outra simplificação. Naturalmente, as simplificações apontadas anteriormente têm um custo com relação à precisão dos resultados obtidos na determinação da difusividade e, conseqüentemente, na descrição da cinética de secagem.

Para geometrias complexas, em geral soluções numéricas são requeridas para a equação de difusão (GASTÓN et al., 2002; GASTÓN et al., 2003; WU et al., 2004; SILVA et al., 2007).

Mesmo para geometrias simples, algumas soluções numéricas são encontradas na literatura. Amendola e Queiroz (2007) descreveram a cinética de secagem de bananas discretizando a equação de difusão aplicada a um cilindro infinito, considerando volume e difusividade constantes. Neste trabalho, os autores usaram coordenadas cilíndricas e o método das diferenças finitas.

Silva et al. (2008a) usaram coordenadas cilíndricas para propor uma solução numérica para a difusão em um cilindro infinito com domínio de difusividade variável,

e também aplicaram a solução no estudo da cinética de secagem de bananas. O método utilizado pelos autores foi o método dos volumes finitos, com uma formulação totalmente implícita.

Uma solução numérica para a equação de difusão aplicada a qualquer sólido que possa ser obtido por revolução de uma área plana em torno de um eixo foi proposta por Silva et al. (2007), usando coordenadas generalizadas e malhas estruturadas. Tal solução foi posteriormente utilizada por Silva (2007) para simular a cinética de secagem de membranas cerâmicas. O pacote computacional, incluindo a interface com o usuário, recebeu o nome “Diffusion RE” e uma primeira versão demo encontra-se disponível em <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/diffusion.htm>.

Em muitos trabalhos (SILVA et al., 2007; SILVA et al., 2008a), para que o modelo possa ser aproximado da situação física a ser simulada, é assumido que a difusividade de água possa variar com o teor de umidade do produto estudado em um dado processo de secagem. A partir disto, uma metodologia numérica pode ser desenvolvida e utilizada para simular a cinética de secagem em camada fina de um produto. Em especial, uma vez escolhida uma expressão $D_{ef} = f(X, a, b)$, na qual a difusividade efetiva D_{ef} pode depender do teor de umidade X , o método inverso pode ser usado no desenvolvimento de um otimizador que determina os valores ótimos dos parâmetros “a” e “b”, minimizando uma função objetivo.

Uma vez que a dependência da difusividade efetiva com o teor de umidade é estabelecida para cada temperatura do ar de secagem, pode-se determinar uma única expressão que relaciona a difusividade simultaneamente com temperatura do ar de secagem e com teor de umidade. Algumas dessas expressões disponíveis literatura são relacionadas na Tab. 2.3. Em tais expressões, para um dado estudo da cinética de secagem de um produto, os parâmetros A_i normalmente são determinados por ajuste de curvas.

Tabela 2.3 – Modelos para a difusividade D_{ef} da água no interior de um sólido poroso em função do teor de umidade X e da temperatura T .

Número	Modelo
1	$D(X, T) = A_0 \exp(A_1 X) \exp(-A_2 / T)$
2	$D(X, T) = A_0 \exp(-A_1 / X) \exp(-A_2 / T)$
3	$D(X, T) = A_0 [1 - \exp(-A_1 X)] \exp(-A_2 / T)$
4	$D(X, T) = (A_0 + A_1 T) [X_i / (1 + X_i) - X / (1 + X)]^{A_2}$
5	$D(X) = A_0 + A_1 X$
6	$D(T) = A_0 \exp[-A_1 / (T + 273,15)]$
7	$D(X, T) = (A_0 + A_1 X^{A_2}) \exp(-A_3 / T)$
8	$D(X, T) = A_0 T^{A_1} X^{A_2}$

Fonte: Lima (1999)

Na Tab. 2.3, a equação com número de ordem igual a 6 é chamada de equação de Arrhenius. Nesta equação o parâmetro A_1 é freqüentemente dado por E_a/R , em que R (J/mol K) é a constante universal dos gases ideais, E_a é a energia de ativação (J/mol) e T é a temperatura do ar de secagem, em °C.

2.6 – Algumas soluções numéricas para a equação de difusão

Segundo Silva (2007), embora existam algumas vantagens da solução analítica de um problema difusivo em comparação com a sua solução numérica como, por exemplo, a obtenção da solução exata, normalmente as soluções analíticas para problemas difusivos são obtidas para situações especiais, muitas vezes pouco realistas o que, não raro, distorcem a situação física envolvida. Uma vantagem evidente da solução numérica sobre a analítica reside na possibilidade de aproximar o modelo objeto de estudo para as condições físicas reais. Assim, pode-se, por exemplo, considerar as propriedades termo-físicas do modelo como parâmetros variáveis. Em adição a isto, pode-se ressaltar a observação feita por Pirozzi e Amêndola (2005) sobre a utilização de soluções analíticas para problemas difusivos: “essas aparecem na forma de uma série

infinita, que para serem calculadas devem ser truncadas, com um número determinado de termos. Uma vez que essas séries infinitas são truncadas, elas passam a fornecer soluções aproximadas, assim como aquelas obtidas por métodos numéricos”. Com isso, mesmo com o reconhecimento da importância das soluções analíticas para o estudo de problemas difusivos, é forte a argumentação em favor de soluções via métodos numéricos, no estudo de problemas difusivos.

Lima (1999) utilizou modelos matemáticos bidimensionais analíticos e numéricos para simular o fenômeno da difusão transiente em sólidos esferoidais prolatos. Na solução numérica foi usado o método dos volumes finitos, com uma formulação totalmente implícita. A equação de difusão foi discretizada e resolvida considerando o fenômeno com e sem retração. Como aplicação, os modelos formulados foram usados para descrever a secagem de banana, e os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais.

Jia et al. (2001) desenvolveram um código computacional em ambiente MATLAB para a simulação de secagem de arroz, incluindo o estudo de temperatura e análise de tensões internas. Os resultados das simulações realizadas com o software foram validados com dados experimentais.

Nascimento (2002) aplicou o método dos volumes finitos, com uma formulação totalmente implícita, em coordenadas cartesianas, para estudar a difusão de calor e massa em corpos tridimensionais na forma de paralelepípedo. A solução numérica foi aplicada na descrição da secagem de tijolos cerâmicos moldados com argila vermelha. Os resultados numéricos foram comparados com dados experimentais e, segundo o autor, houve um excelente acordo entre ambos. Cavalcanti et al. (2005), utilizando o pacote computacional desenvolvido por Nascimento (2002), simularam a absorção de água em compósitos reforçados por tecido híbrido (juta, vidro e resina poliéster insaturado). Segundo os autores, foi obtido um razoável acordo entre a simulação numérica e os dados experimentais.

Carmo (2004) desenvolveu vários modelos matemáticos numéricos para simular o fenômeno de difusão em sólidos esferoidais oblatos. Na solução numérica foi usado o método dos volumes finitos, com uma formulação totalmente implícita. A equação de

difusão foi discretizada e resolvida considerando o fenômeno com e sem retração, e com a secagem realizada de forma contínua e em multipasses (têmpera). Como aplicação, os modelos formulados foram usados para descrever a secagem de lentilhas, e os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais.

Uma solução numérica para a equação de difusão aplicada a qualquer sólido que possa ser obtido por revolução de uma área plana em torno de um eixo foi proposta por Silva et al. (2007), usando coordenadas generalizadas e malhas estruturadas. Tal solução, acoplada a um otimizador, foi utilizada para determinar a difusividade efetiva e o coeficiente de transferência convectiva de massa no estudo da cinética de secagem de membranas cerâmicas.

2.7 – Ferramentas computacionais para o estudo da difusão de calor e massa

Um problema encontrado na maioria dos trabalhos que visam à descrição da secagem de um corpo individual, ou de um produto em camada fina, através de análise distribuída, é a dificuldade de resolução das equações inerentes ao modelo estabelecido, quando o corpo tem uma forma arbitrária. Frequentemente, na solução das equações, a forma do corpo objeto de estudo é aproximada para um plano infinito, uma esfera, um cilindro ou uma forma para a qual as coordenadas do contorno do corpo possam ser dadas por expressões analíticas. São escassos os trabalhos encontrados na literatura abordando a solução da equação de difusão em geometrias arbitrárias.

Maliska (1998) desenvolveu um software denominado Transcal, com o objetivo de colocar à disposição de pesquisadores uma ferramenta para o estudo de problemas difusivos em geometria bidimensional arbitrária. Entretanto, o Transcal é uma ferramenta para a solução transiente da equação de difusão, de uma forma geral, e não um programa computacional específico para a secagem de corpos individuais. Dessa forma, o uso do software para a simulação de secagem não tem sido observado em trabalhos disponíveis na literatura.

Pieritz et al. (2003) publicaram um artigo comunicando o desenvolvimento do projeto CFD SinFlow para o estudo bidimensional de meios sujeitos tanto à difusão quanto à advecção de calor. Neste projeto os autores resolveram, numericamente, as

equações de conservação da massa, de quantidade de movimento e de energia. Para tal, cada equação foi escrita em um sistema de coordenadas curvilíneas para, posteriormente, ser discretizada e resolvida. Embora o software seja bem mais geral que o Transcal, por envolver a advecção do meio, não têm sido encontrados trabalhos sobre secagem de corpos individuais com a utilização do CFD SinFlow. Uma explicação poderia ser, talvez, devido à dificuldade de adequação de problemas de secagem aos recursos disponibilizados pelo software, já que o mesmo não foi desenvolvido para o estudo específico deste tipo de problema.

Wu et al. (2004) simularam o processo de secagem de arroz através de um modelo tridimensional transiente envolvendo transferência de calor e de massa. Para tal, o próprio contorno tridimensional do corpo foi utilizado para caracterizar um sistema de coordenadas ajustadas à sua forma. Neste estudo, os autores concluíram que o modelo tridimensional (envolvendo as equações de difusão de calor e de massa, em coordenadas generalizadas) pode ser usado para descrever o processo de secagem de um corpo poroso.

Salinas et al. (2004) simularam a secagem convencional de madeira utilizando o método dos volumes finitos utilizando coordenadas generalizadas em duas dimensões. Os autores concluíram que o método numérico proposto possibilita simular satisfatoriamente a cinética de secagem de madeira, obtendo informações transitórias detalhadas das distribuições de umidade no interior do corpo.

Uma revisão da literatura possibilita constatar que são raros os trabalhos que apresentam solução numérica para a equação de difusão, através do uso de coordenadas generalizadas, visando à secagem de corpos, em geral. Obviamente, tais soluções poderiam ser obtidas com a utilização de grandes pacotes destinados ao estudo computacional de dinâmica dos fluidos, os chamados CFD's (Computational Fluid Dynamics) como, por exemplo, o ALGOR¹ e o CFX². Entretanto, também neste caso, apesar de alguns trabalhos disponíveis, esta não parece ser a ferramenta comumente empregada por pesquisadores da área de secagem.

¹ <www.algor.com> acesso em novembro de 2008

² <<http://en.wikipedia.org/wiki/CFX>> acesso em novembro de 2008

2.8 – Otimizadores para a determinação de parâmetros

Nas seções anteriores foi feita uma revisão da literatura com relação às várias possibilidades para a solução da equação de difusão. Mas para que tal solução possa ser usada na determinação da difusividade efetiva, é necessário que um otimizador a ela seja acoplado. A função do otimizador é possibilitar a determinação da difusividade efetiva e do coeficiente de transferência convectiva de massa, 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 (CARBONERA et al., 2003; MARIANI et al., 2008), 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 dados experimentais relativos a tal 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.

Para descrever o transporte de água em um produto usando dados experimentais, alguns pesquisadores usam os três primeiros (ou um poucos mais) termos de uma solução analítica da equação de difusão (PARK et al., 2002; TELLO-PANDURO et al., 2004; SILVA et al., 2008b), e eles determinam a difusividade efetiva D_{ef} por ajuste de curvas. Mas se o número de termos da solução for muito grande, ajuste de curvas não é prático porque é necessário escrever a expressão inteira para a realização do ajuste. Neste caso, uma função com uma grande quantidade de termos pode ter um número de caracteres maior que o limite imposto pelo software de ajuste de curvas. Assim, alguns pesquisadores criam os seus próprios programas para descrever a cinética do transporte de água, usando algum algoritmo de otimização.

Amendola e Queiroz (2007) criaram um algoritmo usando os cinco primeiros termos da solução da equação de difusão, e o algoritmo criado encontra um mínimo para a função objetivo dentro de um intervalo estipulado para a difusividade efetiva D_{ef} . Naturalmente, o menor e o maior valor do intervalo D_{ef} são estipulados com base em valores conhecidos na literatura para produtos similares àquele que está sendo estudado.

Hacihafizoglu et al. (2008) desenvolveram um otimizador usando os trinta primeiros termos da série que representa a solução analítica. Mas o otimizador destes pesquisadores também necessita de um intervalo que contenha a difusividade correspondente ao valor mínimo para a função objetivo.

Silva (2007) usou o método inverso para desenvolver um otimizador que determina valores ótimos para a difusividade efetiva D_{ef} e para o coeficiente de transferência convectiva de massa h , partindo de valores iniciais estabelecidos. O otimizador minimiza uma função objetivo, que é expressa através de dados experimentais e de resultados obtidos através de simulações numéricas.

Como a determinação de D_{ef} e h a partir de dados experimentais para a cinética do transporte de água pode ser uma operação demorada, levando de alguns segundos até várias horas, o desenvolvimento de otimizadores merecerá uma atenção especial no próximo capítulo deste trabalho, destinado à apresentação de modelos e metodologias a serem desenvolvidas.

2.9 – Outros modelos de secagem

Embora as metodologias a serem desenvolvidas neste trabalho para a simulação do transporte de água em um produto sejam baseadas na teoria da difusão líquida, é oportuno mencionar que várias outras teorias procuram explicar o processo. Algumas destas teorias serão brevemente mencionadas a seguir. Para maiores detalhes sobre tais teorias, os leitores interessados podem ver, por exemplo, as informações contidas no trabalho de Carmo (2004) e em suas referências.

2.9.1 – Teoria da condensação–evaporação

Segundo esta teoria, o vapor de água no interior do produto é condensado perto da superfície; com a taxa de condensação igual à taxa de evaporação. Não há, portanto, acúmulo de água nos poros próximos da superfície.

2.9.2 – Teoria capilar

A teoria capilar é referente ao fluxo de um líquido através dos interstícios e sobre a superfície de um dado sólido, devido a atrações moleculares entre o líquido e o sólido. Esta teoria é baseada no conceito do potencial capilar, que pode ser entendido como a diferença de pressão entre a água e o ar, na interface água-ar, presente em capilares. Para condições isotérmicas, o potencial capilar é considerado proporcional ao gradiente de concentração de umidade.

2.9.3 – Teoria de Luikov

A teoria de Luikov baseia-se nos princípios da Termodinâmica de Processos Irreversíveis, e assume que os fluxos de água devido à difusão tanto de vapor quanto de líquido são devido a gradientes de temperatura, de concentração de umidade e de pressão no interior do sólido. As equações que descrevem o modelo sugerem que o transporte molecular de vapor de água, ar e líquido acontecem simultaneamente.

2.9.4 – Teoria de Krischer

Krischer propôs que, durante a secagem, o fluxo de umidade pode acontecer no estado líquido, por capilaridade, ou no estado de vapor devido ao gradiente de concentração de vapor. Tal teoria considera a transferência de calor e massa simultaneamente, e, pode ser aplicada em uma variedade de meios porosos.

2.9.5 – Teoria de Philip e De Vries

Esta teoria considera que, em meios porosos, a água é movida através da difusão de vapor e por capilaridade. Nesta teoria é considerado que o fluxo de vapor é dependente de sua concentração e do gradiente de temperatura no sólido. O fluxo de umidade na fase líquida é devido a efeitos de capilaridade e pode se dar em condições isotérmicas ou não. A teoria de Philip e De Vries também considera o fluxo de umidade devido a potenciais gravitacionais.

2.10 – Secagem de bananas

Embora as metodologias analíticas e numéricas a serem desenvolvidas para a otimização e simulação de transporte de água em um produto sejam destinadas a qualquer tipo de sólido na forma de um cilindro que possa ser considerado infinito, a aplicação de tais metodologias neste trabalho será feita para a secagem de bananas. Assim, uma revisão bibliográfica a respeito desta fruta torna-se oportuna neste ponto do trabalho.

A banana é uma fruta tropical, normalmente consumida logo após a colheita. Segundo Pearce (2003), a banana é a maior fonte de calorias de diversos países da África Sub-Sahariana e, conforme as próprias palavras de Pearce, “é a fruta predileta do mundo”. De acordo com Nogueira e Park (1992), o Brasil é um dos líderes mundiais na produção e consumo de banana; e este fato reforça a escolha do estudo da secagem deste produto para a aplicação das metodologias analíticas e numéricas desenvolvidas neste trabalho.

De acordo com Katekawa (2006) e suas referências, os cultivares de banana são classificados conforme a sua procedência genética, a partir das duas espécies selvagens: *Musa acuminata* (A) e *Musa balbisiana* (B). As espécies selvagens produzem frutos que não são comestíveis por possuírem muitas sementes. No entanto, um acidente genético criou plantas com três cromossomos, ao invés de dois, e estes frutos possuem apenas traços das sementes. A planta que produz a fruta comestível, por consequência, só se reproduz assexuadamente, de modo que todas as bananeiras de uma mesma variedade são geneticamente idênticas.

Como vários produtos agrícolas, bananas são frutas perecíveis. Um dos mecanismos de conservação do produto é a sua secagem. Entretanto, a secagem de bananas é utilizada não só para fins de conservação, mas também devido ao valor agregado ao produto seco, que é usado tanto na produção de “chips” (DEMIREL e TURHAN, 2003) quanto na produção de banana-passa (NOGUEIRA e PARK, 1992).

Baini e Langrish (2007) utilizaram modelos empíricos e o modelo de difusão para descrever a secagem contínua e intermitente de bananas. As frutas foram secadas

de forma contínua em temperaturas de bulbo seco de 60 e 80 °C e com intermitência na temperatura de 60 °C. Os teores de umidade obtidos pelo modelo empírico de Newton e também os teores de umidade obtidos através do modelo de difusão foram comparados com os dados dos experimentos realizados. Segundo os autores, o modelo difusivo descreveu melhor os resultados experimentais que o modelo empírico.

Thuwapanichayanan et al. (2008) estudaram a secagem de pedaços de bananas em altas temperaturas (110 a 140 °C). Neste estudo, a secagem e também várias características da qualidade final do produto seco tais como cor, encolhimento e textura de fatias de banana foram observados. O teor de umidade inicial das fatias de banana foi de 250–300% (base seca) enquanto que o teor de umidade final exigido foi de 4% (base seca). Segundo os autores, a análise da evolução da taxa de secagem revelou três regimes distintos: um durante o aquecimento e dois períodos de taxa de decrescente. Ainda de acordo com os autores, o coeficiente de difusão efetivo de banana inicialmente aumenta com uma diminuição do teor de umidade, até um certo valor do teor de umidade, depois a difusividade começa a diminuir ao longo do restante do processo. A temperatura de secagem afeta de forma significativa a cor, o encolhimento e a textura dos pedaços de bananas.

Os dados experimentais do presente trabalho foram extraídos das pesquisas realizadas por Queiroz e Nebra (2001). Estes autores apresentaram um estudo teórico e experimental da cinética de secagem de bananas inteiras, usando ar quente, sob diferentes condições de temperatura e de umidade relativa do ar. Para simular a cinética de secagem usando modelos de difusão, os autores propuseram quatro modelos distintos, supondo condição de contorno de equilíbrio e convectiva, e ainda supondo o volume constante e variável, para considerar o encolhimento.

Queiroz e Nebra (2001) fizeram 6 experimentos distintos, chamados por eles de testes, e estes testes são descritos a seguir:

- Teste 1) Temperatura de bulbo seco de 29,9 °C e umidade relativa do ar de secagem igual a 35,7%;

- Teste 2) Temperatura de bulbo seco de 39,9 °C e umidade relativa do ar de secagem igual a 19,3%;
- Teste 3) Temperatura de bulbo seco de 49,9 °C e umidade relativa do ar de secagem igual a 19,3%;
- Teste 4) Temperatura de bulbo seco de 60,2 °C e umidade relativa do ar de secagem igual a 19,9%;
- Teste 5) Temperatura de bulbo seco de 60,5 °C e umidade relativa do ar de secagem igual a 10,7%;
- Teste 6) Temperatura de bulbo seco de 68,4 °C e umidade relativa do ar de secagem igual a 7,3%.

Todos os modelos de difusão investigados por Queiroz e Nebra (2001) pressupõem a seguintes hipóteses:

- A banana é considerada um cilindro infinito;
- A banana é considerada como um corpo homogêneo;
- A distribuição de umidade inicial é uniforme;
- O coeficiente de difusão é constante durante toda a secagem.

A partir das hipóteses definidas anteriormente, os autores definiram quatro modelos a serem investigados, que são:

- Modelo 1) Difusão líquida com condição de contorno de equilíbrio, sem considerar o encolhimento;

- Modelo 2) Difusão líquida com condição de contorno convectiva, sem considerar o encolhimento;
- Modelo 3) Difusão líquida com condição de contorno de equilíbrio, considerando o encolhimento;
- Modelo 4) Difusão líquida com condição de contorno convectiva, considerando o encolhimento.

Após as simulações, os melhores indicadores estatísticos obtidos por Queiroz e Nebra (2001) foram aqueles referentes ao modelo 2, embora tal modelo seja inconsistente com a situação física observada, devido ao forte encolhimento das frutas durante a secagem, com redução dos diâmetros para 43-47% dos correspondentes valores iniciais.

Maiores detalhes sobre todos os experimentos e as simulações mencionados anteriormente podem ser obtidos em Queiroz (1994).

CAPÍTULO 3 – MATERIAL E MÉTODOS

Neste capítulo são delineados os modelos matemáticos necessários para o desenvolvimento das metodologias a serem disponibilizadas para a simulação de cinéticas de transporte de água no interior de sólidos que podem ser aproximados para geometria cilíndrica. Em adição, são apresentadas as principais características do software a ser desenvolvido, bem como o resultado das metodologias pesquisadas. Ainda, são estabelecidos testes a serem realizados com o software desenvolvido, utilizando-se dados experimentais disponíveis na literatura sobre a secagem de bananas com o uso de ar quente.

3.1 – Modelo matemático para o transporte de água em camada fina

No presente trabalho é assumido que o modelo da difusão líquida para o transporte de água em camada fina seja adequado para descrever o fenômeno. Este é um modelo amplamente aceito na literatura (DOYMAZ e PALA, 2003; BELLO et al., 2004; MOHAPATRA e RAO, 2005; THAKUR e GUPTA, 2006), tanto para descrever o transporte de água em alguns produtos com condição de contorno do primeiro tipo quanto em outros produtos com condição de contorno do terceiro tipo.

3.2 – A equação de difusão

De uma forma geral, a equação de difusão de uma propriedade pode ser escrita do seguinte modo (LUIKOV, 1968; CRANK, 1992; BIRD et al., 2001):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\lambda\Phi) = \nabla \cdot (\Gamma^\Phi \nabla \Phi) + S, \quad (3.1)$$

em que Φ é a variável de interesse no processo difusivo, λ e Γ^Φ são os parâmetros de processo e S é um termo fonte. Para uma geometria cilíndrica, em que o comprimento é muito maior que o raio, a equação de difusão unidimensional aplicada ao transporte de uma propriedade é escrita a partir da Eq. (3.1):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\lambda\Phi) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + S \quad (3.2a)$$

em que r define a posição de um ponto em relação ao eixo central do cilindro.

Fazendo $\lambda = 1$, $\Gamma^\Phi = D_{ef}$ (difusividade efetiva), $\Phi = X$ (teor de umidade em base seca) e $S = 0$, a Eq. (3.2a) pode ser reescrita para descrever o transporte de umidade em um sólido considerado como um cilindro infinito, do seguinte modo:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_{ef} \frac{\partial X}{\partial r} \right). \quad (3.2b)$$

3.3 – Hipóteses para a obtenção de soluções analíticas

A obtenção de soluções analíticas para a equação de difusão usada na descrição de transporte de água parte do pressuposto de que tal processo ocorre em camada fina. Neste sentido, a metodologia para a solução analítica da equação de difusão pressupõe as seguintes hipóteses:

- o sólido deve ser considerado homogêneo e isotrópico;
- a distribuição do teor de umidade dentro do sólido deve ser inicialmente uniforme;
- o único mecanismo de transporte de água dentro do sólido é difusão líquida;
- as dimensões do sólido não variam durante a difusão;

- a difusividade efetiva não varia durante o processo;

Neste trabalho, são apresentadas as soluções da equação de difusão disponíveis na literatura para um cilindro infinito, tanto para a condição de contorno de equilíbrio quanto a condição de contorno convectiva.

3.4 – Solução analítica para a condição de contorno de equilíbrio

A primeira solução analítica apresentada para a Eq. (3.2b) é referente à condição de contorno de equilíbrio, também chamada de condição do contorno do primeiro tipo ou ainda de condição de contorno de Dirichlet.

Para um cilindro homogêneo, de raio R , com umidade inicial uniformemente distribuída X_i , com teor de umidade de equilíbrio X_{eq} , a solução $X(r,t)$ da Eq. (3.2b) é obtida por separação de variáveis conforme Luikov (1968) e Crank (1992):

$$X(r, t) = X_{eq} - (X_{eq} - X_i) \sum_{n=1}^{\infty} A_n J_0(\mu_n r/R) \exp(-\mu_n^2 \frac{D_{ef}}{R^2} t), \quad (3.3)$$

onde

$$A_n = \frac{2}{\mu_n J_1(\mu_n)} \quad (3.4a)$$

em que μ_n é obtido através da seguinte equação característica:

$$J_0(\mu_n) = 0, \quad (3.4b)$$

sendo J_0 e J_1 as funções de Bessel de primeiro tipo de ordens 0 e 1, respectivamente. Vale salientar que μ_n são as raízes da função de Bessel de primeiro tipo com ordem 0; e algumas destas raízes são apresentadas na Tab. 3.1.

Tabela 3.1 – Primeiras 30 raízes da função de Bessel de primeiro tipo e de ordem zero.

n	μ_n
1	2,4048256
2	5,5200781
3	8,6537279
4	11,7915344
5	14,9309177
6	18,0710640
7	21,2116366
8	24,3524715
9	27,4934791
10	30,6346065
11	33,7758202
12	36,9170984
13	40,0584258
14	43,1997917
15	46,3411884
16	49,4826099
17	52,6240518
18	55,7655108
19	58,9069839
20	62,0484692
21	65,1899648
22	68,3314693
23	71,4729816
24	74,6145006
25	77,7560256
26	80,8975559
27	84,0390908
28	87,1806298
29	90,3221726
30	93,4637188

Uma observação da Tab. 3.1 possibilita perceber que, para valores suficientemente grandes de n , a diferença entre duas raízes consecutivas é igual a π , isto é: $\mu_n - \mu_{n-1} = \pi$. Naturalmente, esta constatação possibilita prosseguir no preenchimento da Tab. 3.1 já que, com a informação anterior, pode-se pressupor que a trigésima primeira raiz vale 96,6053; a trigésima segunda é igual a 99,7469; e assim por diante.

Retornando à Eq. (3.3), deve ser observado que $X(r,t)$ é o teor de umidade em base seca numa posição r com relação ao eixo central do cilindro, num instante t , X_{eq} é o teor de umidade para $t \rightarrow \infty$; X_i é o teor de umidade para $t = 0$; R é o raio do cilindro e D_{ef} é a difusividade efetiva.

A expressão para o valor médio do teor de umidade, num instante t , é dada da seguinte forma:

$$\bar{X}(t) = \frac{1}{V} \int X(r,t) dV. \quad (3.5)$$

A solução da equação de difusão para o valor médio $\bar{X}(t)$ num sólido cilíndrico em um instante t é obtida pela substituição da Eq. (3.3) na Eq. (3.5), e é dada por:

$$\bar{X}(t) = X_{eq} - (X_{eq} - X_i) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4}{\mu_n^2} \exp(-\mu_n^2 \frac{D_{ef}}{R^2} t). \quad (3.6)$$

Para fins de aplicação neste trabalho, os duzentos primeiros termos da série infinita são utilizados.

3.5 – Solução analítica para a condição de contorno convectiva

A segunda solução analítica a ser apresentada neste trabalho para a Eq. (3.2b) é referente à condição de contorno convectiva, também chamada de condição do contorno do terceiro tipo ou ainda de condição de contorno de Cauchy. Esta condição é expressa através da imposição de igualdade entre o fluxo interno (difusivo) no contorno do cilindro infinito e o fluxo externo (convectivo) nas vizinhanças deste contorno:

$$-D_{ef} \frac{\partial X(r,t)}{\partial r} \Big|_{r=R} = h \left[X(r,t) \Big|_{r=R} - X_{eq} \right], \quad (3.7)$$

em que cada variável da equação será definida mais à frente.

Para um cilindro homogêneo, de raio R , com umidade inicial uniformemente distribuída X_i , com teor de umidade de equilíbrio X_{eq} , a solução $X(r,t)$ da Eq. (3.2b), para a condição de contorno definida pela Eq. (3.7), é obtida por separação de variáveis (LUIKOV, 1968; CRANK, 1992) e resulta em:

$$X(r,t) = X_{eq} - (X_{eq} - X_i) \sum_{n=1}^{\infty} A_n J_0(\mu_n r/R) \exp(-\mu_n^2 \frac{D_{ef}}{R^2} t) \quad (3.8)$$

em que

$$A_n = \frac{2Bi}{J_0(\mu_n) [\mu_n^2 + Bi^2]}, \quad (3.9)$$

A Eq. (3.8), ao ser substituída na Eq. (3.5), resulta em:

$$\bar{X}(t) = X_{eq} - (X_{eq} - X_i) \sum_{n=1}^{\infty} B_n \exp(-\mu_n^2 \frac{D_{ef}}{R^2} t), \quad (3.10)$$

onde $\bar{X}(t)$ é o teor de umidade médio no instante t ; X_{eq} é o teor de umidade de equilíbrio ($t \rightarrow \infty$); X_i é o teor de umidade inicial ($t = 0$); R é o raio do cilindro; D_{ef} é a difusividade efetiva e t é o tempo de secagem. O coeficiente B_n é dado por

$$B_n = \frac{4Bi^2}{\mu_n^2 (Bi^2 + \mu_n^2)}, \quad (3.11)$$

em que Bi é o número de Biot para a transferência de massa, e é definido da seguinte forma:

$$Bi = \frac{hR}{D_{ef}}, \quad (3.12)$$

onde h é o coeficiente de transferência convectiva de massa. As raízes μ_n são calculadas a partir da equação característica para o cilindro infinito, que é dada por

$$\frac{J_0(\mu_n)}{J_1(\mu_n)} = \frac{\mu_n}{Bi}. \quad (3.13)$$

A Eq. (3.13) é uma equação transcendental e pode ser expressa na forma

$$J_0(\mu_n)Bi - \mu_n J_1(\mu_n) = 0. \quad (3.14)$$

Então, tal equação pode ser resolvida numericamente para qualquer número de Biot de interesse. No presente trabalho, as primeiras 16 raízes da Eq. (3.14) foram determinadas para 452 números de Biot distintos, cobrindo a região de 0 (correspondendo a uma resistência infinita ao fluxo interno de água na superfície) até 200 (que em termos práticos corresponde à uma condição de contorno de equilíbrio na superfície). Obviamente, os cálculos efetuados resultam em um grande banco de dados, com 7232 valores de raízes, e a sua apresentação se torna inviável no presente texto. Mas apenas como exemplo, algumas das primeiras raízes para pequenos valores do número de Biot serão apresentadas na Tab. 3.2, dada a seguir.

Tabela 3.2 – Algumas raízes da equação característica para números de Biot pequenos.

Bi	μ_1	μ_2	μ_3	μ_4	μ_5
0,005	0,099938	3,833010	7,016299	10,17396	13,32407
0,010	0,141245	3,834315	7,017012	10,17445	13,32444
0,015	0,172881	3,835619	7,017724	10,17494	13,32482
0,020	0,199501	3,836922	7,018437	10,17543	13,32519
0,025	0,222910	3,838225	7,019149	10,17592	13,32557

Conforme foi mencionado, para fins de aplicação neste trabalho, os dezesseis primeiros termos da série infinita foram utilizados. Ainda como exemplo, para números de Biot próximos da condição de contorno de equilíbrio, algumas raízes também são apresentadas na Tab. 3.3.

Tabela 3.3 – Algumas raízes da equação característica para números de Biot grandes.

Bi	μ_1	μ_2	μ_3	μ_4	μ_5
42,0	2,348303	5,390906	8,452804	11,52076	14,59280
50,0	2,357242	5,411197	8,483989	11,56208	14,64330
70,0	2,370728	5,441938	8,531584	11,62579	14,72218
100,0	2,380902	5,465207	8,567832	11,67473	14,78342
200,0	2,392832	5,492553	8,610594	11,73279	14,85659

Conforme foi mencionado, ao todo foram determinados 7232 valores de raízes, e a sua apresentação completa se torna inviável no presente texto, embora todos os valores estejam presentes no software desenvolvido para a otimização de dados experimentais referentes a sólidos que podem ser representados por cilindros infinitos.

3.6 – Razão de umidade

As Eqs. (3.6) e (3.10) podem ser rearranjadas para expressar a razão de umidade, que é definida do seguinte modo:

$$\bar{X}^* = \frac{\bar{X}(t) - X_{eq}}{X_i - X_{eq}} \quad (3.15)$$

3.7 – Concepção de otimizadores para as soluções analíticas

A concepção geral para o otimizador é baseada nas hipóteses anteriormente estabelecidas para o transporte de água no interior de um cilindro, pressupondo inicialmente a condição de contorno de equilíbrio, conforme o estudo feito a seguir.

3.7.1 – Otimizador para a solução analítica com condição de contorno de equilíbrio

Para definir a função objetivo a ser minimizada, foi usado o esboço da Fig. 3.1, que mostra uma solução analítica para o teor de umidade $\bar{X}_i^{ana}(D_{ef})$ (linha contínua) e pontos simbolizando dados experimentais quaisquer \bar{X}_i^{exp} . Deve-se ressaltar que, para a condição de contorno de equilíbrio, o cálculo do teor de umidade médio em um dado

instante t depende unicamente do valor da difusividade efetiva. Assim, para cada valor estipulado para a difusividade efetiva, pode-se calcular o valor da função objetivo. Ao modificar o valor de D_{ef} , um novo valor para função objetivo pode ser calculado e comparado com o valor anterior. Em essência, este é o chamado método inverso e foi utilizado no desenvolvimento do otimizador para a solução analítica com condição de contorno de equilíbrio.

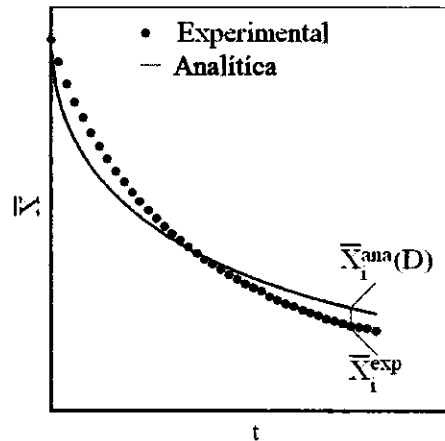


Figura 3.1 – Esboço mostrando a solução analítica (linha contínua), os pontos experimentais e a diferença entre eles em um determinado tempo.

A solução analítica é tão melhor quanto mais próximo a linha contínua da Fig. 3.1 está dos pontos experimentais. Assim, a função objetivo foi dada pelo qui-quadrado referente ao ajuste da curva simulada aos dados experimentais (BEVINGTON e ROBINSON, 1992; TAYLOR, 1997; SILVA e SILVA, 1998):

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N_p} [\bar{X}_i^{\text{exp}} - \bar{X}_i^{\text{ana}}(D_{ef})]^2 \frac{1}{\sigma_i^2}, \quad (3.16)$$

onde \bar{X}_i^{exp} é o teor de umidade médio experimental referente ao ponto i ; $\bar{X}_i^{\text{ana}}(D_{ef})$ é o teor de umidade médio correspondente ao ponto i obtido através da solução analítica da equação de difusão; σ_i é o desvio padrão do teor de umidade médio experimental relativo ao ponto i ; D_{ef} é a difusividade efetiva e N_p é o número de pontos experimentais. Deve ser observado que, para a condição de contorno prescrita, o qui-quadrado depende de um único parâmetro de processo: a difusividade efetiva. Assim,

para cada conjunto de dados experimentais, um “ D_{ef} ” ótimo pode ser determinado através da minimização do qui-quadrado, usado como função objetivo. Se σ_i não for conhecido, ou seja, se não for obtido nos experimentos realizados, este parâmetro deve ser feito igual a 1 para todos os pontos experimentais, isto é, todos os pontos devem ter o mesmo peso estatístico.

A Eq. (3.16) dá o qui-quadrado em função do valor da difusividade, que é o parâmetro que se deseja determinar. Para a determinação de um primeiro intervalo que contenha o valor de D_{ef} referente ao menor qui-quadrado, inicialmente pode-se atribuir um valor próximo de zero para D_{ef} , que é substituído na Eq. (3.6), dada com uma certa quantidade de termos (no presente trabalho, duzentos termos). Então, $\bar{X}_i^{ana}(D_{ef})$ pode ser calculado, o que possibilita determinar χ^2 através da Eq. (3.16). No otimizador desenvolvido, este primeiro valor para D_{ef} é igual a 1×10^{-20} . Então, o valor de D_{ef} é dobrado, e um novo χ^2 é calculado, conforme foi detalhado anteriormente. O novo qui-quadrado é comparado com o valor anterior. Se o novo valor for menor, D_{ef} é dobrado novamente, e outro valor de χ^2 é calculado, seguindo-se a comparação com o valor anterior de χ^2 . Este procedimento é repetido até que o último χ^2 calculado seja maior que o valor anterior. Dessa forma, o último e o antepenúltimo valores de D_{ef} definem um intervalo grosseiro que contém o ponto de mínimo para χ^2 . Um esboço gráfico mostrando a relação entre χ^2 e D_{ef} é dado na Fig. 3.2.

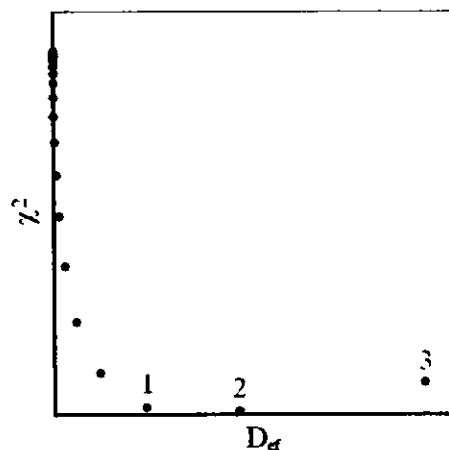


Figura 3.2 – Primeira varredura de valores de D_{ef} partindo do valor 1×10^{-20} :
definição da região de busca entre os pontos 1 e 3.

Uma vez estabelecido um intervalo de busca por um valor mínimo, qualquer método pode ser usado para finalizar a minimização como, por exemplo, o método da bisseção. Entretanto, será proposto, aqui, o método de varredura do domínio, detalhado a seguir.

Subdividindo este primeiro intervalo determinado para D_{ef} , entre 1 e 3 (Fig. 3.2), em n valores para a difusividade, pode-se determinar n novos valores de χ^2 correspondentes aos novos valores de D_{ef} estipulados neste intervalo. Desta forma, pode-se determinar um novo mínimo, mais refinado, conforme é esboçado na Fig. 3.3a. Este novo mínimo localiza-se nas vizinhanças de dois pontos 1' e 3' (Fig. 3.3b), e este intervalo de D_{ef} pode ser novamente subdividido em n novos valores para a difusividade, e o processo pela busca por D_{ef} referente a χ^2 mínimo pode prosseguir até que um critério de convergência seja satisfeito.

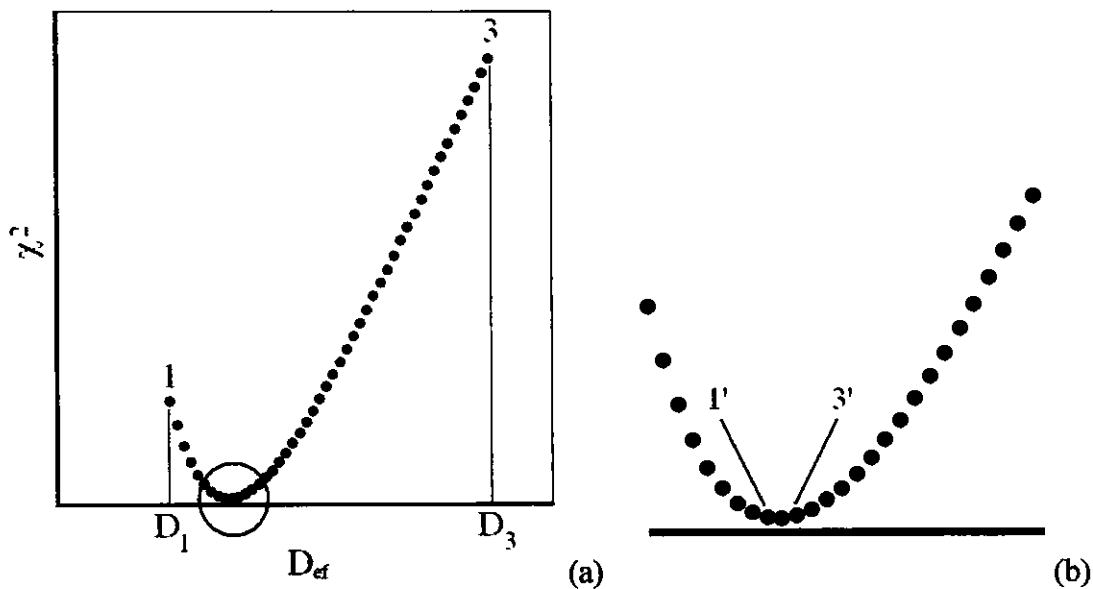


Figura 3.3 – (a) Segunda varredura entre os pontos 1 e 3, que contém o mínimo para D_{ef} ; (b) Detalhe da segunda varredura mostrando uma nova região de busca entre os pontos 1' e 3'.

O desenvolvimento deste otimizador por varredura do domínio constitui-se em uma das contribuições deste trabalho.

3.7.2 – Otimizador para a solução analítica com condição de contorno convectiva

Para fins de aplicação do otimizador desenvolvido quando a condição de contorno for convectiva, deve-se observar que a Eq. (3.10) deve ser resolvida. Dessa forma, a função objetivo a ser minimizada passa a ser expressa do seguinte modo:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N_p} [\bar{X}_i^{\text{exp}} - \bar{X}_i^{\text{ana}}(D_{\text{ef}}, Bi)]^2 \frac{1}{\sigma_i^2}. \quad (3.17)$$

Tal função depende não só da difusividade efetiva, mas também do número de Biot. No presente trabalho, será admitido que Bi e D_{ef} possam ser variados de forma independente. Assim, pode-se especificar um dado número de Biot e, então, a equação (3.17) passa a ser função apenas da difusividade efetiva. Dessa forma, a Eq. (3.17) torna-se idêntica à Eq. (3.16). Então, o otimizador desenvolvido pode ser aplicado, determinando-se um valor mínimo para a difusividade referente ao Biot especificado. Este procedimento pode ser repetido para todos os 452 números de Biot que cobrem todo o domínio de 0 até 200. Após a varredura de todos os números de Biot, é feita a identificação do menor qui-quadrado entre os 452 mínimos determinados.

O código do otimizador para as soluções analíticas foi criado utilizando-se um computador Intel Pentium IV com 1 GB (RAM). A compilação do código fonte foi feita no estúdio Compaq Visual Fortran (CVF) 6.6.0 Professional Edition, usando uma opção de programação denominada QuickWin Application, enquanto que a plataforma foi Windows XP. Por outro lado, as soluções analíticas da equação de difusão são dadas pelos 200 primeiros termos da Eq (3.6) e pelos 16 primeiros termos da Eq. (3.10). O critério de convergência estipulado neste trabalho para o qui-quadrado foi de 1×10^{-15} .

Uma vez que a difusividade efetiva tenha sido determinada, a Eq. (3.3) ou a Eq. (3.8) podem ser usadas para determinar a distribuição do teor de umidade como função do raio r entre 0 e R , para um dado instante de tempo. O gráfico de contorno relativo à distribuição de umidade também está disponível no software desenvolvido.

A adaptação do otimizador desenvolvido na seção 3.7.1 para a determinação analítica de pares h e D_{ef} ótimos também se constitui numa contribuição deste trabalho.

3.8 – Soluções numéricas para a equação de difusão em sólidos cilíndricos

O modelo matemático utilizado para as soluções numéricas da equação de difusão para um cilindro pressupõe as seguintes hipóteses:

- cilindro infinito: $R \ll L$, onde R é o raio e L é o comprimento do cilindro;
- o modelo matemático tem que ser útil para simular o transporte de água ou de calor dentro do sólido cilíndrico;
- o sólido tem de ser homogêneo e isotrópico;
- a distribuição espacial do teor de umidade (ou da temperatura) no interior do sólido tem que ter simetria radial e tem de ser inicialmente uniforme;
- o único mecanismo de transporte de água (ou de calor) dentro do sólido é o mecanismo da difusão;
- o raio do cilindro pode variar durante a difusão;
- os parâmetros de processo podem variar durante a difusão;

3.9 – Solução numérica para a condição de contorno de equilíbrio

A equação de difusão para o modelo foi resolvida através do método numérico dos volumes finitos (PATANKAR, 1980), com uma formulação totalmente implícita. Para isto, a Fig. 3.4 apresenta um cilindro e sua malha uniforme. Os volumes de controle têm espessura Δr e o volume de controle número “i” tem um ponto nodal “P”.

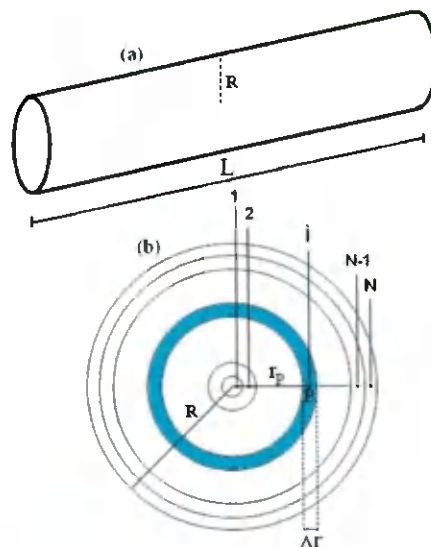


Figura 3.4 – (a) Cilindro de raio R e comprimento L ; (b) Esquema da malha uniforme.

A Fig. 3.5 mostra o volume de controle com ponto nodal “P” e seus vizinhos a oeste (W) e a leste (E). As letras minúsculas “w” e “e” referem-se às interfaces do referido volume de controle. Por outro lado, r_w e r_e são os raios das circunferências que delimitam as faces “w” e “e” do volume de controle.

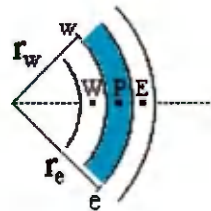


Figura 3.5 – Volume de controle P e seus vizinhos a oeste (W) e a leste (E).

Usando o método dos volumes finitos com uma formulação totalmente implícita para integrar a Eq. (3.2a) no espaço ($2\pi r_p \Delta r L$) e no tempo (Δt), obtém-se o seguinte resultado para o volume de controle P:

$$\frac{\lambda_P \Phi_P - \lambda_P^0 \Phi_P^0}{\Delta t} r_p \Delta r = r_e \Gamma_e \frac{\partial \Phi}{\partial r} \Big|_e - r_w \Gamma_w \frac{\partial \Phi}{\partial r} \Big|_w + S_P^\Phi r_p \Delta r \quad (3.18)$$

onde o sobrescrito 0 significa “tempo anterior” e sua ausência significa “tempo atual”. Uma observação: na Eq. (3.18), o termo fonte não foi linearizado.

3.9.1 – Volumes internos

Para um volume de controle interno a derivada parcial pode ser aproximada do seguinte modo:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial r} \Big|_e \cong \frac{\Phi_E - \Phi_P}{\Delta r} \quad (3.19)$$

e

$$\frac{\partial \Phi}{\partial r} \Big|_w \cong \frac{\Phi_P - \Phi_W}{\Delta r} \quad (3.20)$$

Então, da Eq. (3.18), a equação discretizada para um volume interno pode ser escrita do seguinte modo:

$$A_w \Phi_w + A_p \Phi_p + A_e \Phi_e = B \quad (3.21)$$

onde

$$A_w = -\frac{r_w}{\Delta r} \Gamma_w^\Phi; \quad A_p = \frac{\lambda_p r_p \Delta r}{\Delta t} + \frac{r_e}{\Delta r} \Gamma_e^\Phi + \frac{r_w}{\Delta r} \Gamma_w^\Phi; \quad (3.22a-d)$$

$$A_e = -\frac{r_e}{\Delta r} \Gamma_e^\Phi; \quad B = \frac{\lambda_p^0 r_p \Delta r}{\Delta t} \Phi_p^0 + S_p^\Phi r_p \Delta r$$

3.9.2 – Volume de eoutrole 1

Devido à condição de simetria, o terceiro termo da Eq. (3.18) é zero. Então a equação torna-se:

$$A_p \Phi_p + A_e \Phi_e = B \quad (3.23)$$

com

$$A_p = \frac{\lambda_p r_p \Delta r}{\Delta t} + \frac{r_e}{\Delta r} \Gamma_e^\Phi; \quad A_e = -\frac{r_e}{\Delta r} \Gamma_e^\Phi; \quad (3.24a-c)$$

$$B = \frac{\lambda_p^0 r_p \Delta r}{\Delta t} \Phi_p^0 + S_p^\Phi r_p \Delta r$$

3.9.3 – Volume de eoutrole N

Para o volume de controle N a Eq. (3.19) é dada do seguinte modo:

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right|_e \cong \frac{\Phi_b - \Phi_P}{\Delta r / 2} \quad (3.25)$$

onde Φ_b é o valor de Φ sobre a superfície (boundary). Assim, a Eq. (3.18) torna-se:

$$A_w \Phi_w + A_p \Phi_p = B \quad (3.26)$$

com

$$A_w = -\frac{r_w}{\Delta r} \Gamma_w^\Phi; \quad A_p = \frac{\lambda_p r_p \Delta r}{\Delta t} + \frac{2r_e}{\Delta r} \Gamma_e^\Phi + \frac{r_w}{\Delta r} \Gamma_w^\Phi; \quad (3.27a-c)$$

$$B = \frac{\lambda_p^0 r_p \Delta r}{\Delta t} \Phi_p^0 + \frac{2r_e}{\Delta r} \Gamma_e^\Phi \Phi_b + S_p^\Phi r_p \Delta r$$

Dessa forma, para cada passo de tempo, tem-se um sistema de equações que será resolvido via TDMA ou Gauss-Seidel, com tolerância de 10^{-8} . Caso o raio do cilindro varie, em cada passo de tempo tal raio tem que ser calculado novamente e, também, a espessura Δr . A solução numérica proposta pode ser usada para estudar a condução de calor se for imposto: $\Phi = T$ (temperatura), $\Gamma^\Phi = k$ (condutividade) e $\lambda = \rho c_p$ (ρ é a densidade e c_p é o calor específico). Por outro lado, estabelecendo $\Phi = X$ (teor de umidade em base seca), $\Gamma^\Phi = D_{ef}$ (difusividade de água), $\lambda = 1$, e $S = 0$, a solução numérica proposta pode ser usada para estudar a difusão de água em um sólido cilíndrico.

Uma vez que $\Phi(r,t)$ é determinado numericamente, o valor médio em um tempo t pode ser calculado através da discretização da Eq. (3.5) com $\Phi \equiv X$:

$$\bar{\Phi} = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \Phi_i V_i \quad (3.28)$$

com

$$V = \sum_i^N V_i \quad (3.29)$$

3.10 – Parâmetro Γ^Φ

Para os pontos nodais, o parâmetro de processo Γ^Φ pode ser calculado através de uma relação apropriada entre tal parâmetro e a variável dependente Φ

$$\Gamma^\Phi = f(\Phi, a, b) \quad (3.30)$$

onde “a” e “b” são parâmetros que ajustam a solução numérica aos dados experimentais, sendo determinados por otimização.

Para as interfaces dos volumes de controle, por exemplo “e”, a seguinte expressão tem que ser usada para determinar Γ^Φ (PATANKAR, 1980; SILVA, 2007)

$$\Gamma_e^\Phi = \frac{2\Gamma_E^\Phi \Gamma_P^\Phi}{\Gamma_E^\Phi + \Gamma_P^\Phi} \quad (3.31)$$

Vale salientar que as equações (3.30) e (3.31) são necessárias no presente trabalho porque a discretização da equação de difusão foi realizada de forma a considerar a difusividade tanto constante quanto variável.

3.11 – Solução numérica para a condição de contorno de convectiva

Em essência, a modificação em relação ao estudo realizado para a condição de contorno de equilíbrio foi feita apenas para o volume de controle N.

3.11.1 – Volume de controle N

Para a condição de contorno convectiva, a Eq. (3.7) foi retomada, e nesta equação foi feita a identificação: $D_{ef} \equiv \Gamma^\Phi$, $X \equiv \Phi$, $X|_{r=R} \equiv \Phi_b$ e $X_{eq} \equiv \Phi_\infty$. Então

$$-\Gamma^\Phi \left. \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right|_e = h(\Phi_b - \Phi_\infty), \quad (3.32)$$

e esta equação ainda pode ser escrita na forma discretizada do seguinte modo:

$$\Gamma^\Phi \frac{(\Phi_b - \Phi_P)}{\Delta r/2} = h(\Phi_\infty - \Phi_b). \quad (3.33)$$

A Eq. (3.33) pode ser utilizada para expressar Φ_b , que é o valor da variável no contorno leste (“boundary”), como segue:

$$\Phi_b = \frac{\Gamma_e^\Phi \Phi_P + \frac{h\Delta r \Phi_\infty}{2}}{\Gamma_e^\Phi + \frac{h\Delta r}{2}}. \quad (3.34)$$

Substituindo a Eq. (3.34) na Eq. (3.25) e o resultado na Eq. (3.18), ao final tem-se:

$$A_w \Phi_w + A_p \Phi_P = B, \quad (3.35)$$

onde

$$A_w = -\frac{r_w}{\Delta r} \Gamma_w^\Phi; \quad A_p = \frac{\lambda_p r_p \Delta r}{\Delta t} + \frac{r_e \Gamma_e^\Phi}{\frac{\Gamma_e^\Phi}{h} + \frac{\Delta r}{2}} + \frac{r_w}{\Delta r} \Gamma_w^\Phi; \quad (3.36a-c)$$

$$B = \frac{\lambda_p^0 r_p \Delta r}{\Delta t} \Phi_P^0 + \frac{r_e \Gamma_e^\Phi}{\frac{\Gamma_e^\Phi}{h} + \frac{\Delta r}{2}} \Phi_\infty + S_P^\Phi r_p \Delta r.$$

3.11.2 – Volumes internos e volume 1

As equações governantes de tais volumes de controle são as mesmas apresentadas para o caso de condição de contorno de equilíbrio.

3.12 – Concepção para o otimizador desenvolvido para as soluções numéricas

Um dos métodos de otimização disponíveis na literatura é o método inverso (CARBONERA et al., 2003; MARIANI et al., 2008), em que são atribuídos valores a parâmetros de interesse; seguido da solução da equação que descreve o sistema, sendo que os resultados obtidos são comparados com dados experimentais relativos a tal 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.

Neste trabalho será assumido que a difusividade de água possa variar com o teor de umidade do produto estudado. A partir disto, uma metodologia numérica será utilizada para simular a cinética de secagem em camada fina de um produto na forma cilíndrica, baseando-se nos estudos desenvolvidos por Silva (2007). Em especial, uma vez escolhida uma expressão $D_{ef} = f(X, a, b)$, na qual a difusividade efetiva D_{ef} pode depender do teor de umidade X , o método inverso será usado no desenvolvimento de um otimizador que determina os valores ótimos dos parâmetros “a” e “b” e de h , minimizando uma função objetivo. A metodologia proposta é geral para cilindros infinitos, e será aplicada a dados experimentais disponíveis na literatura, relativos à secagem em camada fina de bananas, que serão consideradas como cilindros infinitos.

Tendo sido realizada uma simulação numérica para a qual existam dados experimentais disponíveis, o desvio padrão 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 (ver, por exemplo, TAYLOR, 1997; SILVA e SILVA, 1998)

$$\delta\Phi_i = \bar{\Phi}_i - \bar{\Phi}^{\text{sim}}, \quad (3.37)$$

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 Fig. 3.6.

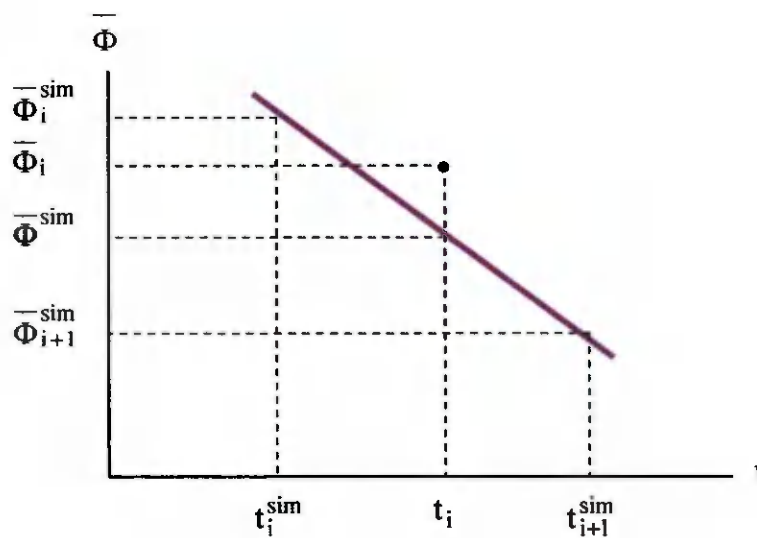


Figura 3.6 – Esquema para o cálculo de $\bar{\Phi}^{\text{sim}}$ por interpolação linear.

Para a situação representada na Fig. 3.6, o valor de $\bar{\Phi}^{\text{sim}}$ pode ser calculado por interpolação linear, através da expressão

$$\bar{\Phi}^{\text{sim}} = \frac{\bar{\Phi}_i^{\text{sim}} - \bar{\Phi}_{i+1}^{\text{sim}}}{t_{i+1}^{\text{sim}} - t_i^{\text{sim}}} (t_{i+1}^{\text{sim}} - t_i) + \bar{\Phi}_{i+1}^{\text{sim}}, \quad (3.38)$$

o que possibilita a utilização da Eq. (3.37) para o cálculo do desvio referente ao i -ésimo ponto experimental. Dessa forma, todos os elementos necessários para o cálculo do desvio padrão relativo ao ajuste tornam-se conhecidos. Assim, supondo que todos os pontos experimentais tenham o mesmo peso estatístico, o desvio padrão pode ser calculado através da expressão (TAYLOR, 1997; SILVA e SILVA, 1998)

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{(N_p - p)} \sum_{i=1}^{N_p} (\delta\Phi_i)^2}, \quad (3.39)$$

onde N_p é o número de pontos experimentais, p é o número de parâmetros que ajustam a curva simulada aos dados experimentais, sendo que $(N_p - p)$ define o número de graus de liberdade referente ao ajuste.

Conforme já foi mencionado, um dos objetivos deste trabalho é possibilitar a determinação de parâmetros de uma expressão proposta para a difusividade efetiva, D_{ef} , e do coeficiente de transferência convectiva de massa, h , a partir de dados experimentais, através do recurso da minimização de uma função objetivo. A razão disto é que para a descrição completa de um problema de transporte de água dado por um modelo difusivo, há a necessidade da determinação de uma expressão para D_{ef} e h no domínio cuja cinética de secagem seja conhecida. Para tal, um algoritmo de otimização foi desenvolvido a partir dos seguintes requisitos:

- minimização do qui-quadrado relativo ao processo de ajustamento de uma curva simulada aos dados experimentais;
- utilização do algoritmo de Levenberg-Marquardt (ver, por exemplo, PRESS et al., 1996), com correções seqüenciais dos parâmetros.

Conforme se sabe, a expressão para o qui-quadrado envolvendo o ajuste de uma função explícita usada como um modelo (regressão) ou de uma curva simulada a dados experimentais é dada por (TAYLOR, 1997; SILVA e SILVA, 1998)

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N_p} (\delta\Phi_i)^2 \frac{1}{\sigma_i^2} \quad (3.40)$$

onde N_p é o número de dados 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 à unidade. Vale salientar que σ_i é o desvio padrão do valor médio de Φ_i . Obviamente, o qui-quadrado depende de $\overline{\Phi}^{sim}$ que, por sua vez, depende da

difusividade efetiva D_{ef} e do coeficiente de transferência convectiva de massa h . Em geral, a difusividade efetiva D_{ef} pode ser expressa por uma função $f(\Phi, a, b)$ em que “a” e “b” são constantes que podem ser determinadas via minimização da função objetivo, e $\Phi \equiv X$. Neste trabalho, a função objetivo é definida pelo qui-quadrado referente ao ajuste, o que é expresso através da Eq. (3.40).

Com relação ao algoritmo de Levenberg-Marquardt, os fatores multiplicativos “f” para as correções dos parâmetros foram feitos iguais a 1/2, no caso da necessidade de diminuir os valores das correções, e a 2, no caso da necessidade de aumento:

$$\Delta a_i = f \Delta a_{i-1} \text{ e } \Delta b_i = f \Delta b_{i-1} \quad (3.41a-b)$$

Os valores de tais fatores “f” foram definidos como 2 e 1/2 visando minimizar possíveis problemas de divergência durante o processo de otimização. Por outro lado, uma vez que existam dados experimentais disponíveis, a seqüência dos cálculos para a determinação de D_{ef} e h obedece aos passos definidos a seguir:

- Passo 1) Atribuir valores iniciais para os parâmetros “a”, “h” e h . Resolver a equação de difusão e determinar o qui-quadrado;
- Passo 2) Atribuir valores para as correções de “a”, “b” e “h”.
- Passo 3) Corrigir o parâmetro “b”, mantendo os valores dos parâmetros “a” e “h” constantes. Resolver a equação de difusão e calcular o qui-quadrado;
- Passo 4) Comparar o valor do último qui-quadrado calculado com o penúltimo valor. Enquanto o último valor for menor, voltar ao passo 3;
- Passo 5) Corrigir o parâmetro “a”, com os parâmetros “b” e “h” mantidos constantes. Resolver a equação de difusão e calcular o qui-quadrado;
- Passo 6) Comparar o valor do último qui-quadrado calculado com o penúltimo valor. Enquanto o último valor for menor, voltar ao passo 5;
- Passo 7) Corrigir o parâmetro “h”, com os parâmetros “a” e “b” mantidos constantes. Resolver a equação de difusão e calcular o qui-quadrado;
- Passo 8) Comparar o valor do último qui-quadrado calculado com o penúltimo valor. Enquanto o último valor for menor, voltar ao passo 7;

- Passo 9) Voltar ao passo 2 até que o critério estabelecido para a convergência seja atingido.

Deve ser observado que as correções dos parâmetros “a”, “b” e “h” mencionadas anteriormente ocorrem em ciclos, com alternância entre “a”, “b” e “h”, até que a tolerância estipulada para os parâmetros seja atingida.

Deve-se salientar que o segundo indicador estatístico a ser utilizado para a análise da qualidade dos ajustes a serem realizados é o coeficiente de determinação R^2 (TAYLOR, 1997; SILVA e SILVA, 1998). Como se sabe, o coeficiente de determinação R^2 é o quadrado do coeficiente de correlação R_{fg} entre duas séries de valores f e g , em que f e g representam duas variáveis quaisquer. Já R_{fg} é definido como a razão entre a covariância entre f e g e o produto dos desvios padrão destas duas séries. Isto resulta, desconsiderando os pesos estatísticos, na seguinte expressão (TAYLOR, 1997; SILVA e SILVA, 1998)

$$R_{fg} = \frac{\sum f_i \cdot g_i - N \bar{f} \bar{g}}{\sqrt{\left(\sum f_i^2 - N \bar{f}^2 \right) \left(\sum g_i^2 - N \bar{g}^2 \right)}}, \quad (3.42)$$

em que \bar{f} e \bar{g} são os valores médios das séries f e g , respectivamente, N é o número de elementos de cada série, sendo que os somatórios são feitos de 1 até N . Para o propósito de utilização da Eq. (3.42) no presente trabalho, deve-se identificar $f \equiv \bar{\Phi}$ (valores experimentais) e ainda $g \equiv \bar{\Phi}^{\text{sim}}$ (valores simulados). Naturalmente, com relação ao otimizador aqui delineado para soluções numéricas, pode-se observar que, para problemas de secagem, a variável genérica Φ deve ser identificada com o teor de umidade X , em base seca.

3.13 – Resolução de sistemas de equações lineares

Neste trabalho foi desenvolvido um software com interface gráfica para simulação numérica da cinética de transporte de água no interior de corpos cilíndricos, e tal simulação requer a solução de sistemas de equações lineares, provenientes da

discretização. Por isto, dois algoritmos para a solução de sistema de equações lineares são disponibilizados em tal software, e a opção por um deles será definida pelo usuário, embora o algoritmo recomendado seja o TDMA, por ser muito mais rápido. Assim, os dois algoritmos, TDMA e Gauss-Seidel, serão rapidamente descritos a seguir.

3.13.1 – Algoritmo de Gauss-Seidel

O algoritmo de Gauss-Seidel (MALISKA, 2004) define um método iterativo que necessita de valores iniciais para as incógnitas a serem determinadas. O sistema de equações proveniente da equação de difusão unidimensional discretizada é da forma:

$$A_{11} \Phi_1 = A_{12} \Phi_2 + B_1, \quad (3.43)$$

$$A_{kk} \Phi_k = A_{k,k-1} \Phi_{k-1} + A_{k,k+1} \Phi_{k+1} + B_k, \text{ k variando de 2 até N-1.} \quad (3.44)$$

Para a última equação, pode-se escrever:

$$A_{NN} \Phi_N = A_{N,N-1} \Phi_{N-1} + B_N. \quad (3.45)$$

Tem-se, então, N equações e N incógnitas: $\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_N$. A implementação computacional do algoritmo apresentado se dá através dos seguintes passos:

- 1) estimar os valores de $\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_N$; calcular $A_{11}, A_{12}, B_1, A_{22}$, etc, se for o caso;
- 2) calcular um novo valor de Φ_1 através da Eq. (3.43) usando os valores disponíveis no passo anterior. Substituir o valor antigo de Φ_1 pelo novo valor obtido;
- 3) calcular um novo valor de Φ_k , partindo de $k = 2$ até $k = N - 1$, usando os últimos valores disponíveis para as incógnitas. Para cada valor calculado, substituir o valor antigo de Φ_k pelo novo valor obtido;

- 4) calcular um novo valor de Φ_N usando os valores disponíveis nos passos anteriores. Substituir o valor antigo de Φ_N pelo novo valor obtido;
- 5) checar o critério de convergência para todas as incógnitas Φ_k (desde $k = 1$ até $k = N$). Repetir os passos a partir de 2 enquanto for necessário.

3.13.2 – Algoritmo TDMA

TDMA é uma sigla em inglês que significa “Tridiagonal matrix algorithm”. Tal algoritmo, usado para a solução de sistemas especiais de equações lineares, que recaem em uma matriz tri-diagonal, é também conhecido como algoritmo de Thomas. Tal algoritmo é um método direto e é usado para resolver sistemas de equações dados na forma matricial mostrada a seguir (PRESS et al., 1996; BORTOLI, 2000):

$$\begin{bmatrix} A_1 & B_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ C_2 & A_2 & B_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_3 & A_3 & B_3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & C_{N-1} & A_{N-1} & B_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & C_N & A_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \dots \\ \Phi_{N-1} \\ \Phi_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ \dots \\ D_{N-1} \\ D_N \end{bmatrix}. \tag{3.46}$$

As equações do sistema podem ser expressas do seguinte modo:

$$A_1\Phi_1 + B_1\Phi_2 = D_1, \tag{3.47a}$$

$$C_k\Phi_{k-1} + A_k\Phi_k + B_k\Phi_{k+1} = D_k, \text{ com } k \text{ variando de } 2 \text{ até } N-1, \tag{3.47b}$$

$$C_N\Phi_{N-1} + A_N\Phi_N = D_N. \tag{3.47c}$$

Da Eq. (3.47a) pode-se expressar Φ_1 na forma

$$\Phi_1 = Q_1 - P_1\Phi_2, \tag{3.48a}$$

em que

$$P_1 = \frac{B_1}{A_1} \text{ e } Q_1 = \frac{D_1}{A_1}. \quad (3.48b-c)$$

Substituindo a Eq. (3.48a) na Eq. (3.47b), com $k = 2$, obtém-se:

$$\Phi_2 = Q_2 - P_2 \Phi_3, \quad (3.49a)$$

onde

$$Q_2 = \frac{D_2 - C_2 Q_1}{A_2 - C_2 P_1}, \quad (3.49b)$$

$$P_2 = \frac{B_2}{A_2 - C_2 P_1}. \quad (3.49c)$$

Com um raciocínio análogo pode-se generalizar:

$$\Phi_k = Q_k - P_k \Phi_{k+1}, \text{ com } k \text{ variando de } 2 \text{ até } N-1, \quad (3.50a)$$

onde

$$Q_k = \frac{D_k - C_k Q_{k-1}}{A_k - C_k P_{k-1}} \text{ e } P_k = \frac{B_k}{A_k - C_k P_{k-1}}. \quad (3.50b-c)$$

Para a última incógnita, tem-se:

$$\Phi_N = Q_N, \quad (3.51)$$

já que $P_N = 0$. Por outro lado, com os termos Q_k e P_k determinados para todo k , Φ_N torna-se conhecido, o que possibilita calcular Φ_{N-1} . Uma vez conhecido Φ_{N-1} , pode-se determinar Φ_{N-2} , e o processo continua até o cálculo de Φ_1 . Tal mecanismo de cálculo é conhecido como “back substitution”.

3.14 – Fluxograma referente à solução numérica da equação de difusão

Embora as informações necessárias para a compreensão e uso do software desenvolvido serão dadas nos itens a seguir, através do detalhamento dos menus, torna-se necessário prover algumas informações sobre as etapas realizadas com relação ao desenvolvimento da parte referente ao cálculo numérico, propriamente dito. Para tal, o fluxograma referente à parte numérica é apresentado na Fig. 3.7, dada a seguir.

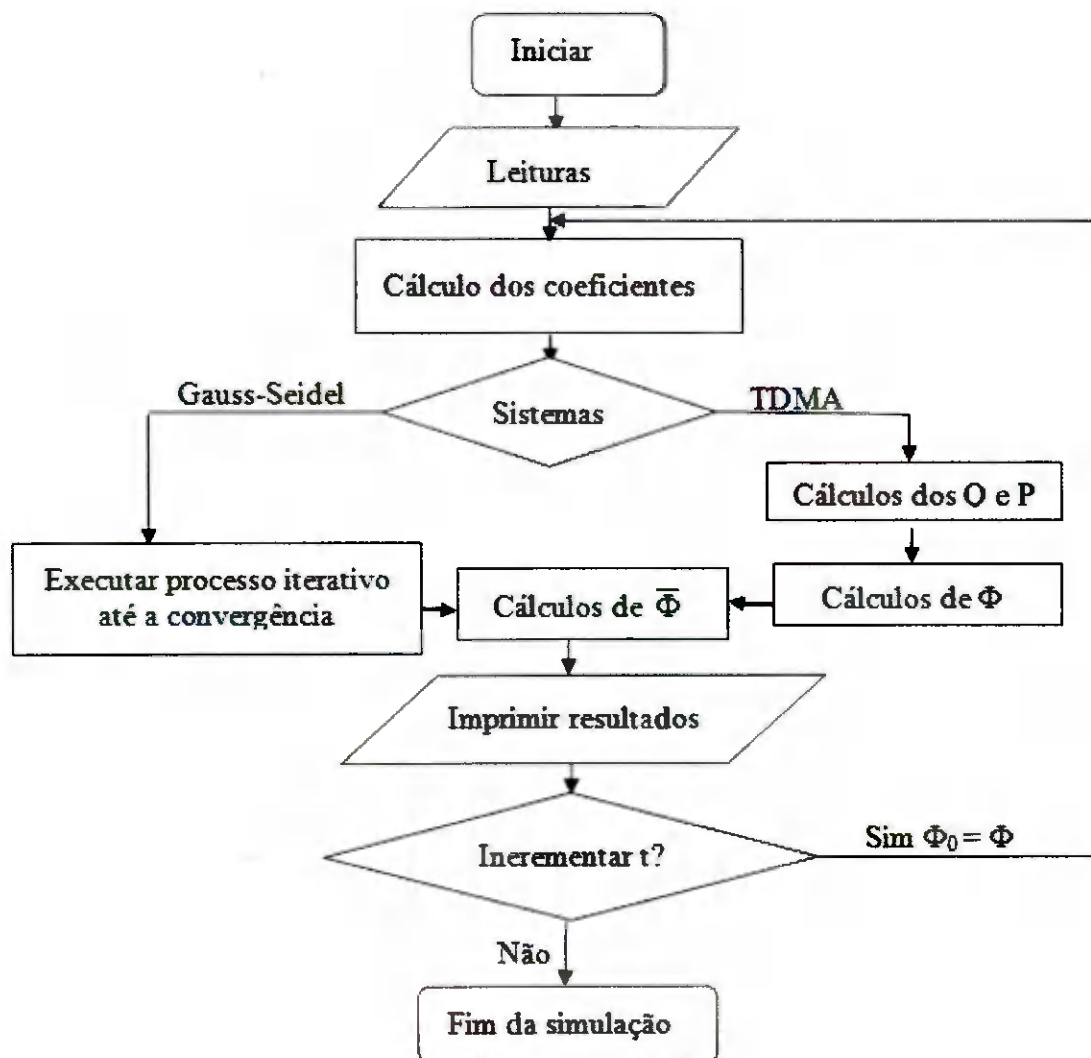


Figura 3.7 – Fluxograma referente ao cálculo numérico do software desenvolvido.

3.15 – Definições para o desenvolvimento do software

O software a ser desenvolvido para a determinação da difusividade e da simulação da cinética do transporte de água, incluindo a interface com o usuário, será denominado “Infinite Cylinder”. O produto será desenvolvido no estúdio Compaq Visual Fortran Professional Edition V. 6.6.0 (Fortran 95) usando uma opção de programação chamada QuickWin Application. A plataforma a ser utilizada será Windows XP, embora o software também possa ser executado na plataforma Linux.

3.16 – O software “Infinite Cylinder”

A tela inicial do software deve ter a aparência mostrada através da Fig. 3.8, dada a seguir.

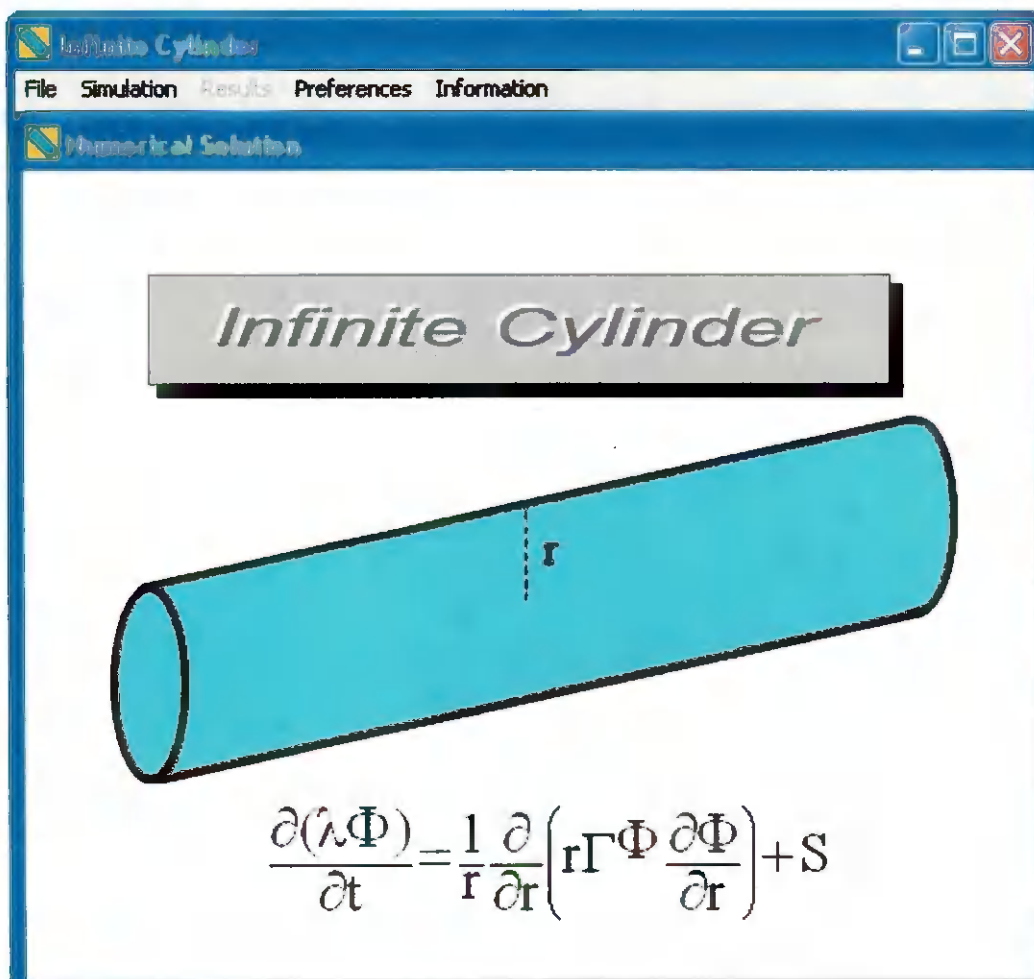


Figura 3.8 – Tela principal do software “Infinite Cylinder”.

Embora o usuário tenha a opção de interface em Inglês e em Português, ao ser instalado, na primeira execução o software deverá apresentar a língua inglesa nos diálogos. Por isto, nas figuras referentes à apresentação dos requisitos estabelecidos para o software, os diálogos também são apresentados neste idioma.

O software foi concebido para ser usado por usuários iniciantes e, para tal, deve ser criada uma interface gráfica intuitiva, através de menus, e tais menus são apresentados a seguir.

3.16.1 – O Menu “File”

O menu “File” é apresentado através da Fig. 3.9.

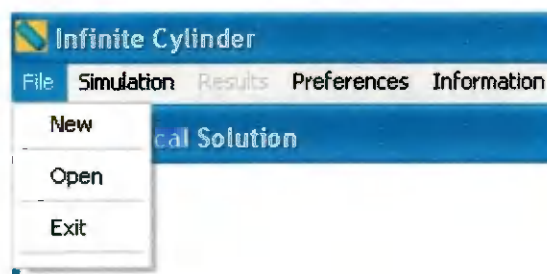


Figura 3.9 – Itens do menu “File”.

Além da opção “Exit”, que encerra a execução do software, as opções “New” ou “Open”, uma vez clicadas, abrem seqüencialmente um conjunto de três caixas de diálogos que requerem todas as informações para que uma simulação seja completamente definida.

A primeira caixa de diálogo, denominada “Informações Gerais – Passo 1”, tem a aparência mostrada na Fig. 3.10.

Infinite Cylinder - General Information

Step 1 - Settings: X is the moisture content, XM is the average value of X, t is the time

Expression for the radius: R = 0.117000E-02 <= Const. or f(XM,t)

Number of control volumes: N = 56 From 3 up to 1000

Diffusivity: D = 2.0589797E-08*exp(4.286800*X) <= Const. or f(X,t)

With no source Source on boundary Source in all

Source term: S = <= Const. or f(X,t)

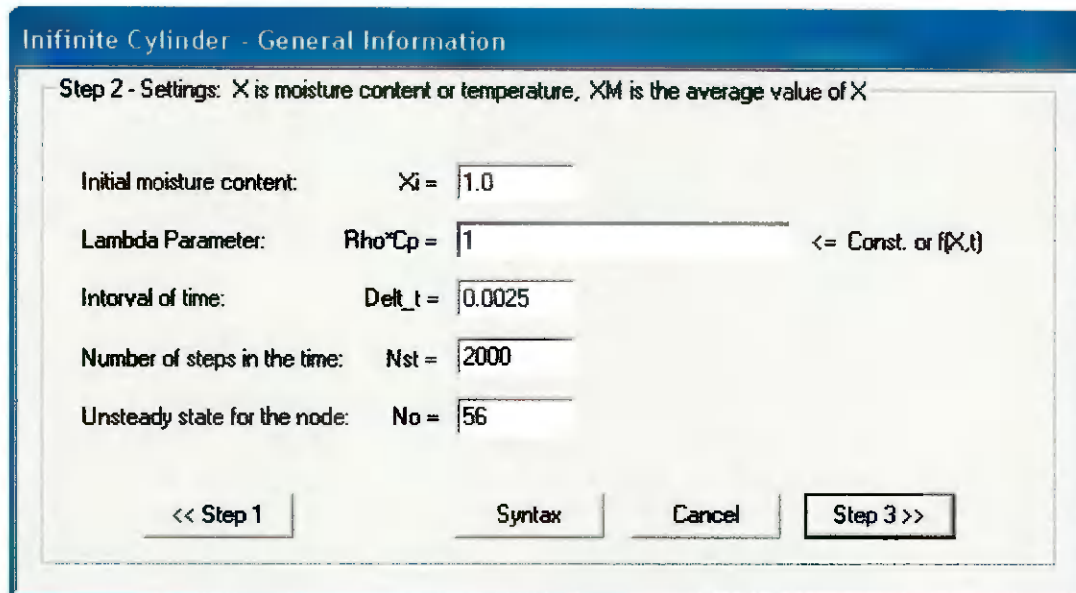
Syntax Cancel Step 2 >>

Figura 3.10 – Primeira caixa de aquisição de dados.

Tal caixa de diálogo deve requerer as informações listadas a seguir.

- Raio: deve-se informar um valor constante ou variável. No caso de valor variável, este valor deve ser uma função do teor de umidade médio ou do tempo de secagem;
- Número de volumes de controle: deve-se informar um número mínimo de 3 até um máximo de 1000 volumes de controle;
- Difusividade: deve-se informar um valor constante ou variável. No caso de valor variável, este valor deve ser uma função do teor de umidade local ou do tempo de secagem;
- Opções do termo fonte: existem três opções. A primeira é sem termo fonte, a segunda é com termo fonte nos volumes de controle do entorno e a terceira é com termo fonte em todos os volumes de controle;
- Informação do termo fonte: deve-se informar um valor constante ou variável. No caso de valor variável, este valor deve ser uma função do teor de umidade local ou do tempo de secagem.

Clicando no botão “Passo 2” da caixa de diálogo descrita anteriormente surge uma nova caixa de diálogo denominada “Informações Gerais – Passo 2”, que pode ser vista na Fig. 3.11.



Infinite Cylinder - General Information

Step 2 - Settings: X is moisture content or temperature, XM is the average value of X

Initial moisture content: $X_i =$ 1.0

Lambda Parameter: $Rho \cdot C_p =$ 1 <= Const. or $f(X,t)$

Interval of time: $\Delta t =$ 0.0025

Number of steps in the time: $N_{st} =$ 2000

Unsteady state for the node: $N_o =$ 56

<< Step 1 Syntax Cancel Step 3 >>

Figura 3.11 – Segunda caixa de aquisição de dados.

Nesta caixa de aquisição de dados devem ser requeridas as informações listadas a seguir.

- Teor de umidade inicial: deve ser uniforme no início do processo;
- Parâmetro lambda: é o produto da densidade pelo calor específico e deve ser igual a 1 em problemas de secagem. Para o estudo de difusão de calor este parâmetro pode ter um valor constante ou variável;
- Intervalo de tempo: estabelece o intervalo de tempo para o qual as equações discretizadas serão resolvidas;
- Número de passos no tempo: número de intervalos em que o tempo total de secagem é dividido;
- Acompanhar transiente do nó: define um volume de controle que terá a cinética de secagem acompanhada, além da cinética referente ao teor de umidade médio.

Clicando no botão “Passo 3” da caixa de diálogo descrita anteriormente surge uma nova caixa de diálogo denominada “Condição de contorno”, vista na Fig. 3.12.



Figura 3.12 – Terceira caixa de aquisição de dados.

Nesta caixa de diálogo são requeridas as informações sobre a condição de contorno para o problema simulado, conforme é descrito a seguir.

- Teor de umidade prescrito: deve-se informar o valor do teor de umidade no contorno do cilindro infinito;
- Fluxo prescrito: deve-se informar o valor do fluxo no contorno do cilindro infinito;
- Convecção: deve-se informar o valor do teor de umidade de equilíbrio do material nas vizinhanças do contorno e também o coeficiente de transferência convectiva de massa.

3.16.2 – O Menu “Simulation”

O menu “Simulation” é apresentado através da Fig. 3.13.



Figura 3.13 – Menu “Simulation”.

Uma vez informados um conjunto de dados, o item “Begin Simulation”, do menu “Simulation”, deve ser clicado. Então, uma caixa de diálogo denominada “Type of the problem” mostra duas opções disponíveis no software: 1) “Simular o problema carregado” e 2) “Buscar por expressão para a difusividade”. Neste segundo caso, referente a um processo de otimização, dados experimentais são requeridos. A caixa de diálogo mencionada pode ser vista através da Fig 3.14.

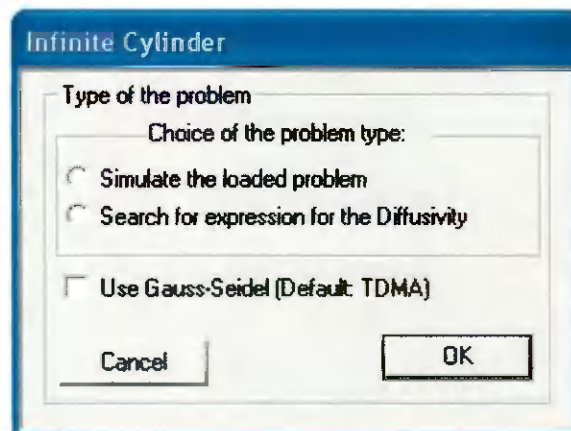


Figura 3.14 – Tipo do problema a ser simulado.

É interessante observar que existem dois métodos para a resolução dos sistemas de equações lineares resultantes da discretização da equação de difusão: TDMA, que é o método “default”, por ser muito mais rápido que os demais métodos para problemas unidimensionais, e o Gauss-Seidel.

No caso de uma simples simulação, ao clicar “OK” na última caixa de diálogo o processo é iniciado. Mas, no caso de busca por uma expressão para a difusividade, mais duas informações são requeridas via caixa de diálogo. Primeiro, deve ser informada a expressão para a difusividade, a ser escolhida entre várias opções disponíveis de

funções crescentes, decrescentes ou a função constante, conforme é mostrado na Tab. 3.4. Segundo, deve ser informado o conjunto de dados experimentais referentes à cinética de secagem do problema estudado. Além disso, estimativas iniciais dos parâmetros da difusividade e do coeficiente de transferência convectivo de massa devem ser informadas para o processo de determinação de valores ótimos, bem como o número de passos de tempo a ser utilizado na simulação.

Tabela 3.4 – Funções disponíveis para a dependência entre Γ^Φ e Φ .

Número	Função: $\Gamma^\Phi =$
1	a
2	$a\Phi + b$
3	$a\Phi^2 + b$
4	$b\exp(a\Phi)$
5	$b\exp(a/\Phi)$
6	$b\exp(a\Phi^2)$
7	$b\cosh(a\Phi)$
8	$1/(a\Phi + b)$
9	$a\Phi^{1/2} + b$
10	$b\exp(a\Phi^{1/2})$
11	$b\ln(a\Phi^{1/2})$
12	$b\ln(a\Phi)$
13	$b\ln(a\Phi^2)$
14	$b\cosh(a\Phi^{1/2})$
15	$b\cosh(a\Phi^2)$
16	$b/\cosh(a\Phi)$
17	$b/\cosh(a\Phi^{1/2})$
18	$b/\cosh(a\Phi^2)$
19	$a/\Phi^{1/2} + b$
20	$a/\Phi + b$

Ao informar a função para a difusividade e clicar “OK” na caixa de diálogo, um diretório será aberto para que os dados experimentais sejam informados num arquivo denominado “Exp.txt”. A estrutura dos dados é em três colunas, na seguinte seqüência: 1) tempo de secagem, 2) teor de umidade, 3) desvio padrão do teor de umidade. Caso o desvio padrão do teor de umidade não tenha sido determinado no experimento, basta atribuir o valor 1 em toda a terceira coluna.

3.16.3 – O Menu “Results”

O menu “Results”, que é habilitado somente ao final de uma simulação, apresenta todos os resultados gerados pelo software desenvolvido. Os itens deste menu podem ser vistos através da Fig. 3.15.

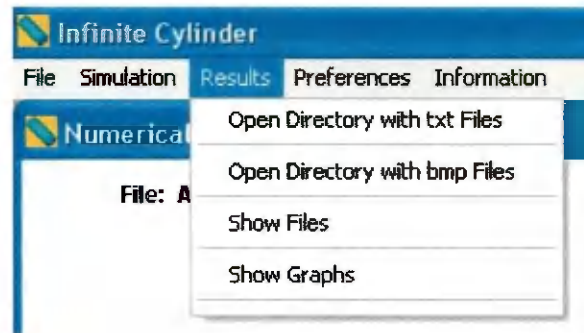


Figura 3.15 – Itens do menu “Results”.

O item “Open Directory with txt Files” abre o diretório onde são armazenados os arquivos de texto com todas as informações geradas em uma simulação.

No caso da simulação de uma cinética de transporte de água, os arquivos gerados são:

- Data.txt: contém todos os dados informados referentes ao problema simulado;
- Flux on the boundary.txt: contém os valores do fluxo no contorno ao longo do tempo;
- Moisture content on the boundary.txt: contém os valores do teor de umidade no contorno ao longo do tempo;
- Node.txt: contém os valores do teor de umidade ao longo do tempo para o volume de controle especificado;
- Radius.txt: contém os valores do raio do cilindro ao longo do tempo de secagem;
- Unsteady.txt: contém os valores do teor de umidade médio ao longo do tempo;
- Diffusivities.txt: contém os valores das difusividades nas faces a oeste e a leste de cada volume de controle para o instante final da simulação;
- Moisture Content.txt: contém os valores do teor de umidade de cada volume de controle para o instante final da simulação;

- Radial Distribution.txt: contém os valores do teor de umidade local em função da posição radial para o instante final da simulação.

Deve ser observado que os arquivos mencionados podem ser abertos logo após a simulação, através do item “Show Files”.

O item “Open Directory with bmp Files” abre o diretório onde são armazenados os arquivos gráficos com todas as informações geradas em uma simulação.

Ainda no caso da simulação de uma cinética de transporte de água, os arquivos gráficos disponíveis são:

- Unsteady for Average.bmp: apresenta o gráfico do teor de umidade médio em função do tempo de secagem;
- Contour Plot.bmp: apresenta o gráfico de contorno que representa a distribuição radial do teor de umidade para o instante final da secagem.

Além destes dois gráficos gerados pelo software, podem-se gerar vários outros gráficos informativos a partir dos arquivos de dados listados anteriormente. Como exemplo, pode-se gerar o gráfico do teor de umidade local em função da posição radial com as informações contidas no arquivo “Radial Distribution.txt”.

No caso da determinação de uma expressão para a difusividade e do coeficiente de transferência convectivo de massa a partir de dados experimentais, os arquivos gerados são os seguintes:

- Optimum.txt: contém a expressão ótima para a difusividade e o valor do coeficiente de transferência convectiva de massa, além dos indicadores estatísticos “coeficiente de determinação” (R^2) e “qui-quadrado” χ^2 que determinam a qualidade do ajuste realizado via otimização;
- Results_a.txt: contém uma lista com todos os valores dos parâmetros “a” da expressão da difusividade determinados ao longo do processo de minimização do qui-quadrado e ainda os correspondentes valores de R^2 e χ^2 ;

- Results_b.txt: apresenta a lista com todos os valores dos parâmetros “b” da expressão da difusividade determinados ao longo do processo de minimização do qui-quadrado, e também os correspondentes valores de R^2 e χ^2 ;
- Results_c.txt: apresenta a lista com todos os valores dos parâmetros “h” da expressão da difusividade determinados ao longo do processo de minimização do qui-quadrado, e também os correspondentes valores de R^2 e χ^2 ;
- Results_a_b_c.txt: disponibiliza a lista com todos os valores dos parâmetros “a” e “b” da expressão da difusividade e os valores de “h” determinados ao longo do processo de minimização do qui-quadrado, e também os correspondentes valores de R^2 e χ^2 ;
- Unsteady Optimum.txt: contém os valores do teor de umidade médio ao longo do tempo para os valores ótimos dos parâmetros da difusividade e do coeficiente de transferência convectivo de massa.

No caso de um processo de otimização, o único gráfico gerado é referente à cinética do transporte de água obtida com os valores ótimos dos parâmetros da difusividade e do coeficiente de transferência convectivo de massa.

3.16.4 – O menu “Preferences”

Este menu possibilita ao usuário algumas escolhas antes da simulação de um problema, e os seus itens podem ser vistos através da Fig. 3.16.

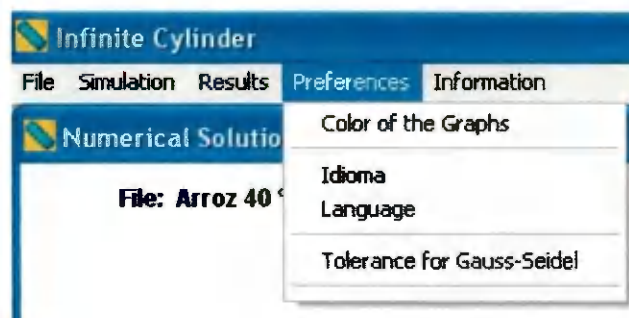


Figura 3.16 – Itens do menu “Preferences”.

O item “Color of the Graphs” possibilita a escolha, ao se desenhar gráficos, das cores preta, vermelha, magenta, verde e azul. Já o item “Idioma – Language” possibilita

escolher o idioma de interface com o usuário: Português ou Inglês. Por último, o item “Tolerance for Gauss-Seidel” possibilita especificar o valor da tolerância na solução de sistemas de equações lineares via Gauss-Seidel. Vale salientar que o valor “default” é dado por 1×10^{-8} , mas pode ser modificado a critério do usuário.

3.16.5 – O menu “Information”

Este menu apresenta informações gerais sobre a autoria do produto, arquivos de ajuda, link para a “home page” e ainda uma opção para o envio de email para a autora, conforme é mostrado na Fig. 3.17.

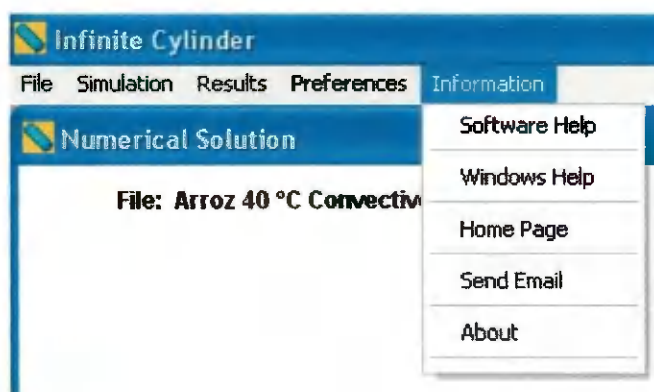


Figura 3.17 – Itens do menu “Information”.

O software “Infinite Cylinder”, que possibilita simular a cinética do transporte de água em sólidos cilíndricos, e também determinar a difusividade e o coeficiente de transferência convectiva de massa para esta geometria, é considerado como a principal contribuição deste trabalho.

3.17 – Avaliação de expressões em Fortrao

Em softwares com interface gráfica, muitas vezes há a necessidade de que uma *string* informada por um usuário em uma caixa de diálogo seja transformada em uma expressão matemática. Isto é feito através de códigos específicos denominados de “parsers” ou “evaluators”. Conforme Silva et al. (2005a), repetidas buscas na Internet indicam que poucos avaliadores estão disponíveis na rede, desenvolvidos, em código aberto, especificamente para a linguagem Fortran. Um destes avaliadores foi

desenvolvido na Austrália por Midgley (2004). Mas o “parser” australiano, embora seja facilmente incorporado a um programa desenvolvido em Fortran, e útil em muitas aplicações, é lento para o propósito requerido: solução transiente da equação de difusão. Como se sabe, a simulação da secagem de um corpo poroso requer um grande esforço computacional. Então, o código para a avaliação de parâmetros variáveis deve ser eficiente e otimizado, devido à rapidez requerida. O outro “parser” em código aberto disponível na Internet foi desenvolvido na Alemanha por Schmehl (2005). Embora tal código seja mais rápido que o primeiro, também não foi, a priori, considerado adequado para o software a ser desenvolvido. Dessa forma, restou a possibilidade de utilização de um “parser” desenvolvido por Silva et al. (2005a), já testado em processos de otimização por Silva (2007). As noções gerais sobre desenvolvimento de um avaliador de expressões serão dadas nos itens a seguir, e se basearão no trabalho de Silva (2007).

3.17.1 – Avaliação de expressões: noção geral

O procedimento através do qual um programa recebe uma “string” contendo uma expressão matemática e retorna a resposta apropriada é chamado, genericamente, de avaliação de expressões. Tal procedimento é a base de todos os compiladores e interpretadores de uma linguagem.

Existem vários algoritmos disponíveis na literatura, através dos quais pode-se criar um “parser”. Um dos mais simples, e que será utilizado neste trabalho, é o algoritmo descendente recursivo. Tal algoritmo é descrito em alguns livros sobre a linguagem C como, por exemplo, em Schildt (1997), e será adaptado para Fortran, já que a bibliografia disponível sobre o tema para esta linguagem é praticamente inexistente. Mesmo assim, alguma familiaridade com o tema, de uma forma geral, pode ser obtida em Dyadkin (1995), em Henriques (2002) e em Henriques (2005).

3.17.2 – Elementos de uma expressão: precedência

Para os propósitos de desenvolvimento de um “parser”, deve-se partir do pressuposto de que expressões matemáticas sejam formadas pelos seguintes itens:

- Números;
- Operadores: + adição, - subtração, / divisão, * multiplicação, ** ou ^ potenciação;
- Parêntesis;
- Funções: sin, cos, tan, asin, acos, atan, sinh, cosh, tanh, sind, cosd, tand, log, log10, nint, anint, aint, exp, sqrt, abs, floor;
- Variáveis.

Todos os itens anteriores podem ser combinados, obedecendo às regras da álgebra, para formar expressões matemáticas.

No desenvolvimento de um “parser”, um conceito importante é o da precedência de operadores e de funções (Aho et al., 1987). Tal conceito estabelece a seqüência na qual as operações devem ser realizadas, com o propósito de se obter uma correta avaliação da expressão interpretada. No avaliador de expressões desenvolvido é assumida a precedência indicada na Tabela 3.1.

Tabela 3.5 – Precedência dos operadores.

Maior Precedência	Parêntesis
	Funções
	** ou ^
	*, /
Menor Precedência	+, -

3.17.3 – Análise de uma expressão

Existem várias possibilidades para se analisar e montar uma expressão matemática a partir de uma “string”. No caso de um analisador descendente recursivo, as expressões são imaginadas como sendo estruturas recursivas, ou seja, tais expressões são definidas em termos delas próprias. Para se ter uma noção básica das regras e da idéia utilizadas no desenvolvimento do avaliador, suponha uma expressão contendo apenas os seguintes elementos: +, -, *, / e parêntesis. Neste caso, a expressão pode ser

definida, a partir da leitura da “string”, com a utilização das seguintes regras básicas (Fischer e LeBlanc Jr., 1991):

Expressão \rightarrow termo [+termo][-termo];

Termo \rightarrow fator [*fator][fator];

Fator \rightarrow variável, número ou expressão.

Na nomenclatura apresentada anteriormente, os colchetes designam um elemento opcional e o símbolo \rightarrow significa produz. Tais regras são normalmente chamadas de regras de produção da expressão. Assim, pode-se interpretar a definição de um termo como: termo produz fator vezes fator ou fator dividido por fator. A precedência dos operadores está implícita na maneira como a expressão é escrita e o interpretador, ao ler a expressão em uma “string”, deve identificar as prioridades na seqüência das operações e ainda executar tais operações na seqüência identificada.

Para ilustrar a utilização das regras apresentadas tomemos a expressão $6+3*D$, na qual é possível identificar dois termos: o primeiro é o número 6 e o segundo é o produto dado por $3*D$. O segundo termo tem dois fatores: 3 e D. Conforme se vê, esses dois fatores são constituídos por um número e por uma variável, respectivamente.

Essas regras apresentadas constituem a essência de um analisador descendente recursivo, que é basicamente um conjunto de funções mutuamente recursivas que operam de forma encadeada. A cada passo, o analisador executa as operações especificadas na seqüência algebricamente correta. Para reforçar o exemplo anterior, analisemos a expressão a seguir:

$$9/3 - (100 + 56)$$

- Inicialmente toma-se o primeiro termo, $9/3$. Então, identifica-se cada fator e executa-se a divisão dos inteiros. O valor do resultado é 3;

- Toma-se o segundo termo, $(100+56)$. Nesse ponto, começa-se a analisar recursivamente a segunda sub-expressão. Toma-se cada um dos dois fatores que, então, são somados. O valor do resultado é 156;
- Retorna-se da chamada recursiva e subtrai-se 156 de 3. A resposta é -153.

Há dois pontos básicos a serem lembrados sobre essa **visão recursiva** das expressões. Primeiro, a precedência dos operadores está implícita na maneira como as regras de produção são definidas. Segundo, esse método de análise e montagem de expressões através de um programa de computador é muito semelhante à forma como os próprios seres humanos avaliam expressões matemáticas.

3.18 – Dados experimentais da cinética de secagem de bananas

Embora o estudo proposto tenha gerado metodologias para a simulação da cinética do transporte de umidade em qualquer sólido que possa ser considerado como um cilindro infinito, tal estudo será utilizado na descrição da cinética de secagem de bananas. Os dados experimentais estão disponíveis em Queiroz (1994) ou em Queiroz e Nebra (2001). Os experimentos foram realizados com bananas inteiras e descascadas do grupo *Musa acuminata*, subgrupo Cavendish, cultivar Nanicão, no estado de maturação tigrado. A secagem conduzida por Queiroz (1994) foi feita utilizando ar quente em várias temperaturas e condições de umidade relativa do ar, e neste trabalho serão utilizados os resultados obtidos em $T = 29,9$; $T = 49,9$ e $T = 68,4$ °C. O detalhamento das condições experimentais será dado no Cap. 4. Vale salientar que Queiroz (1994) usou modelos baseados na teoria da difusão líquida e, para tal, a equação de difusão para o cilindro infinito, em coordenadas cilíndricas, foi resolvida numericamente por aquela pesquisadora através do método das diferenças finitas, pressupondo difusividade constante. Mais informações sobre o cultivar de banana utilizado neste trabalho pode ser obtida em Silva et al. (2004a) e em Silva et al. (2006).

Estes dados experimentais também foram utilizados por Lima (1999) que investigou, além de modelos para a descrição da cinética de secagem, o comportamento da temperatura em função do tempo no ponto central da banana. Em seu trabalho, Lima (1999) usou coordenadas generalizadas para resolver a equação de difusão e representou

a banana através de um sólido obtido pela revolução de uma elipse em torno de seu eixo maior, com o objetivo de simular numericamente a cinética de secagem das bananas.

3.19 – Modelos para a descrição da cinética de secagem de bananas

Visando à simulação da cinética da secagem de bananas a partir de dados experimentais conhecidos, os seguintes modelos foram analisados neste trabalho:

- Modelo 1: volume constante, difusividade constante e condição de contorno de equilíbrio. Simulação da cinética de secagem com: a) solução analítica; b) solução numérica.
- Modelo 2: volume constante, difusividade constante e condição de contorno convectiva. Simulação da cinética de secagem com: a) solução analítica; b) solução numérica.
- Modelo 3: volume variável, difusividade constante e condição de contorno convectiva. Simulação da cinética de secagem com a solução numérica.
- Modelo 4: volume variável, difusividade variável e condição de contorno convectiva. Simulação da cinética de secagem com a solução numérica.

Deve-se observar que o modelo 4, proposto no presente trabalho, é o mais próximo da situação física a ser investigada, dentre os quatro modelos. Vale salientar que tal modelo não foi investigado nem por Queiroz (1994); nem por Lima (1999) e nem tampouco por Queiroz e Nebra (2001). Assim, a aplicação deste modelo na simulação da cinética de secagem, bem como os resultados a serem obtidos e analisados, constitui-se em uma contribuição do presente trabalho.

3.20 – Softwares utilizados neste trabalho

Além do software “Infinite Cylinder” e de alguns outros códigos fontes utilizados neste trabalho, ainda foram utilizados dois softwares “shareware” disponíveis na internet.

O primeiro dos dois softwares utilizados foi o pacote de digitalização “xyExtract Graph Digitizer” (http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/index_xyExtract.htm). O objetivo deste software é recuperar os valores das coordenadas (x,y) dos pontos de um gráfico 2D que esteja disponível em um arquivo de extensão bmp. Um maior detalhamento sobre o produto pode ser obtido em Silva et al. (2005b).

Por último, deve ser mencionado que todas as análises estatísticas e regressões contidas neste trabalho serão feitas através do “LAB Fit Curve Fitting Software” V. 7.2.45. O LAB Fit é um software para Windows desenvolvido para tratamento e análise de dados experimentais. No LAB Fit existe a possibilidade de tratar: dados similares; dados não-similares; determinar erro propagado; traçar gráficos 2D e 3D; executar vários cálculos (sistema de equações, raízes de funções, EDO, etc); ajuste de curvas (regressão não-linear, usando o método dos mínimos quadrados via algoritmo de Levenberg-Marquardt, com quase 500 funções na biblioteca, com uma e duas variáveis independentes, descobridor de funções, opção para escrever a função de ajuste com até 150 caracteres, 6 variáveis independentes e 10 parâmetros). Outros detalhes sobre este software podem ser obtidos em Silva et al. (2004b). Apenas como uma informação adicional, vale salientar que uma versão completa deste produto está disponível em www.labfit.net.

CAPÍTULO 4 – RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, as metodologias desenvolvidas para a simulação da cinética do transporte de água em produtos com a forma cilíndrica são empregadas para determinar valores ótimos para a difusividade e para o coeficiente de transferência convectiva de massa, a partir de dados experimentais. Tais metodologias também são empregadas para simular a cinética de secagem de bananas usando os valores dos parâmetros determinados via otimização.

4.1 – Dados experimentais

As informações sobre as condições da secagem convectiva de bananas em três temperaturas distintas está disponível em Queiroz (1994) e em Queiroz e Nebra (2001), e é resumida na Tab. 4.1.

Tabela 4.1 – Informações sobre o ar de secagem (temperatura, umidade relativa e velocidade), teor de umidade das bananas (inicial, final e de equilíbrio) e tempo de secagem de bananas.

Ar			Banana			t (h)
T (°C)	UR (%)	v (ms ⁻¹)	\bar{X}_i (bs)	\bar{X}_f (bs)	\bar{X}_{eq} (bs)	
29,9	35,7	0,38	3,43	0,32	0,1428	121,8
49,9	19,2	0,37	3,21	0,32	0,0579	40,8
68,4	7,3	0,39	2,95	0,22	0,0121	27,6

Fonte: Queiroz e Nebra (2001)

Uma vez medido o teor de umidade ao longo do tempo, Queiroz e Nebra (2001) determinaram a razão de umidade através da Eq. (3.15). Para $T = 29,9\text{ }^{\circ}\text{C}$, os resultados obtidos são dados através da Tab. 4.2, apresentada a seguir, e no presente trabalho foram obtidos por digitalização com o uso do xyExtract Graph Digitizer.

Tabela 4.2 – Dados experimentais da razão de umidade com ar de secagem de bananas em $T = 29,9\text{ }^{\circ}\text{C}$.

t (h)	\bar{X}^*
0,000	1,0000
1,250	0,9569
2,250	0,9275
3,500	0,8943
5,250	0,8531
7,050	0,8148
9,100	0,7753
12,10	0,7239
14,35	0,6891
17,60	0,6431
20,35	0,6071
25,10	0,5495
28,35	0,5122
32,85	0,4642
36,35	0,4293
41,35	0,3841
46,10	0,3463
51,10	0,3089
56,85	0,2686
62,60	0,2336
69,60	0,1992
76,54	0,1732
83,35	0,1401
90,60	0,1169
98,82	0,0966
107,6	0,0754
121,8	0,0547

Fonte: Queiroz e Nebra (2001)

Já a razão de umidade em função do tempo para a temperatura do ar de secagem em $49,9\text{ }^{\circ}\text{C}$ é dada através da Tab. 4.3.

Tabela 4.3 – Dados experimentais da razão de umidade com ar de secagem de bananas em $T = 49,9\text{ }^{\circ}\text{C}$.

t (h)	\bar{X}^*
0,000	1,0000
0,750	0,9494
1,250	0,9142
1,750	0,8816
2,250	0,8511
3,000	0,8080
3,750	0,7683
5,000	0,7082
6,500	0,6451
8,017	0,5889
9,517	0,5393
11,02	0,4945
13,77	0,4221
15,77	0,3766
18,02	0,3323
20,77	0,2847
23,02	0,2504
25,77	0,2129
29,52	0,1680
32,77	0,1365
34,77	0,1201
37,27	0,1027
40,77	0,0822

Fonte: Queiroz e Nebra (2001)

Para a temperatura do ar de secagem igual a $68,4\text{ }^{\circ}\text{C}$, Queiroz e Nebra (2001) obtiveram os dados sumarizados na Tab. 4.4.

Tabela 4.4 – Dados experimentais da razão de umidade com ar de secagem de bananas em $T = 68,4$ °C.

t (h)	\bar{X} *
0,000	1,0000
0,750	0,9433
1,500	0,8800
2,250	0,8216
2,750	0,7854
3,550	0,7279
4,317	0,6800
5,317	0,6235
6,817	0,5466
7,850	0,4977
9,100	0,4453
10,85	0,3805
12,60	0,3230
14,60	0,2663
16,60	0,2180
19,10	0,1687
21,60	0,1302
24,10	0,1015
27,60	0,0708

Fonte: Queiroz e Nebra (2001)

Nos experimentos conduzidos por Queiroz e Nebra (2001), o raio das bananas utilizadas em cada condição de secagem foi medido ao longo do tempo. Então, tal raio também pode ser expresso em função da razão de umidade. Usando regressão linear, Queiroz e Nebra (2001) obtiveram três expressões para o raio como função da razão de umidade, conforme é mostrado na Tab. 4.5.

Tabela 4.5 – Expressões para o raio do cilindro que representa as bananas em função da razão de umidade.

T (°C)	R (m)
29,9	0,01613 (0,4981 + 0,5979 \bar{X}^*)
49,9	0,01522 (0,4826 + 0,5734 \bar{X}^*)
68,4	0,01545 (0,4743 + 0,5344 \bar{X}^*)

Fonte: Queiroz e Nebra (2001)

Conforme pode ser obtido da Tab. 4.5, as bananas selecionadas para secagem em 29,9 °C têm um raio inicial de 1,768 cm enquanto que o raio ao final do processo é igual a 0,803 cm, o que significa a existência de um forte encolhimento: o valor final do raio é apenas 45,4% do valor inicial. Para a temperatura de secagem igual a 49,9 °C, as bananas utilizadas tinham um raio inicial de 1,607 cm e, ao final do processo, o raio passou para 0,735 cm (45,7% do valor inicial). Ainda, para o ar de secagem em 68,4 °C, o raio inicial foi 1,560 cm e, o final, 0,773 cm (49,6% do valor inicial). Obviamente, para as duas últimas condições de secagem, também é percebido um forte encolhimento do produto ao final da secagem.

4.2 – Simulações analítica e numérica: modelo 1

A seguir, os dados experimentais na temperatura de 29,9 °C serão utilizados na otimização de parâmetros usando a solução analítica da equação de difusão, com tolerância absoluta igual a 1×10^{-18} para a difusividade. Tais dados também serão utilizados na otimização de parâmetros usando a solução numérica da equação de difusão, com tolerância relativa de 1×10^{-4} . Os resultados podem ser observados na Tab. 4.6 e também na Fig. 4.1. Inicialmente, o modelo 1, definido no Cap. 3, será utilizado para descrever a cinética de secagem. Vale salientar que tal modelo pressupõe volume e difusividade constantes e condição de contorno de equilíbrio.

Devido à definição do modelo 1, a simulação pode ser feita tanto a partir da solução analítica quanto da solução numérica. Para testar a coerência das duas soluções, os dados experimentais em 29,9 °C são simulados tanto através da solução analítica quanto numérica. Na solução analítica serão considerados duzentos termos da série; e na

solução numérica o intervalo de tempo será dividido em 1000 passos, enquanto que o domínio será subdividido em 100 volumes de controle, o que garante refinamentos de malha e de tempo próximos aos de Queiroz e Nebra (2001). A propósito, o desenvolvimento de um otimizador por varredura, suficientemente rápido na determinação da difusividade, apropriado para ser acoplado em soluções analíticas da equação de difusão, é considerado como uma das contribuições deste trabalho.

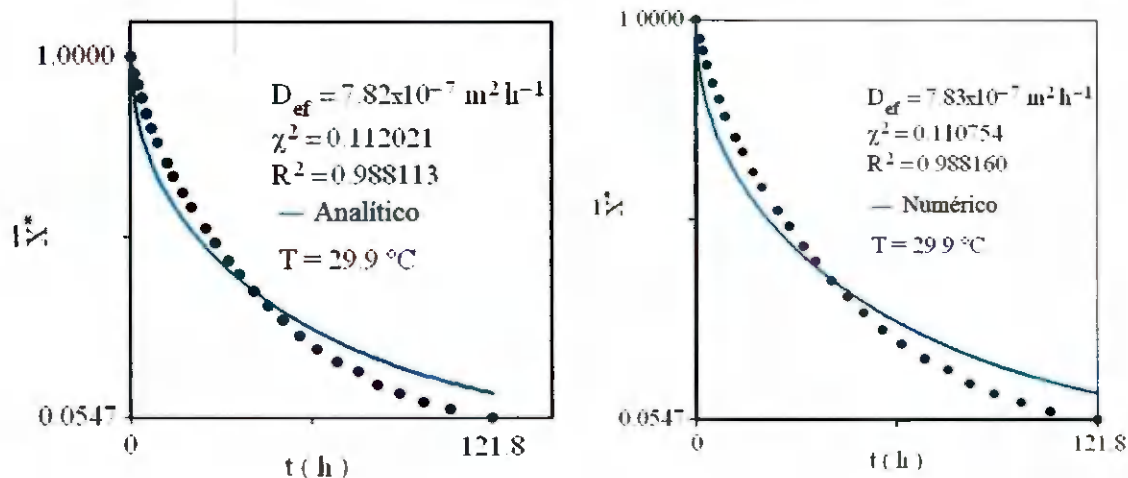


Figura 4.1 – Modelo 1: comparação dos processos de otimização das soluções analítica (esquerda) e numérica (direita).

Tabela 4.6 – Resultados para as simulações: modelo 1 em 29,9 °C.

	Analítico	Numérico
$D_{ef} (m^2 s^{-1})$	$2,171 \times 10^{-10}$	$2,175 \times 10^{-10}$
χ^2	0,112021	0,110754
R^2	0,988113	0,988160

Uma inspeção nos indicadores estatísticos dos ajustes das soluções analítica e numérica, mostradas através da Fig. 4.1 e da Tab. 4.6, indica que os dois resultados são equivalentes. Entretanto, através das duas simulações, é percebido claramente que a condição de contorno do primeiro tipo é inadequada na descrição da cinética de secagem de bananas, pelo menos quando se considera o volume e a difusividade constantes. Desta forma, tal modelo, embora útil na descrição do transporte de água por vários produtos, dentre eles a maioria dos grãos (BELLO et al., 2004;

HACIHAFIZOGLU et al., 2008), será descartado na descrição da cinética de secagem de bananas.

4.3 – Simulações analítica e numérica: modelo 2

Utilizando o modelo 2 na descrição do processo, isto é, aplicando-se ao problema de secagem uma condição de contorno do terceiro tipo; e mantendo-se, ainda, volume e difusividade constantes, um melhoramento dos resultados na descrição da cinética de secagem de bananas a 29,9 °C será tentado. Neste caso, os resultados para as soluções analítica (dezesesseis termos) e numérica (100 volumes de controle e 1000 passos de tempo) são mostrados através da Fig. 4.2. Os principais resultados para o modelo 2 na temperatura de secagem de 29,9 °C também são mostrados na Tab. 4.7 (no SI).

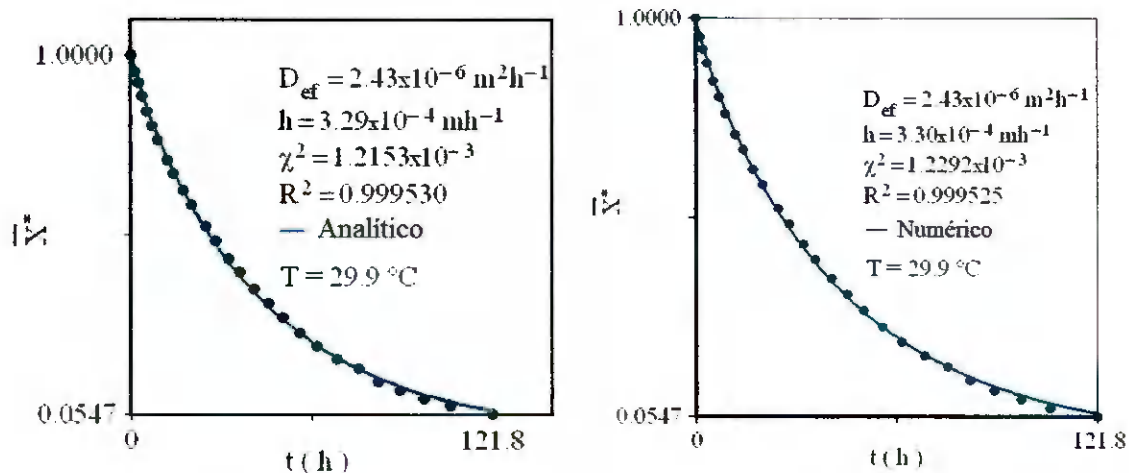


Figura 4.2 – Comparação dos processos de otimização das soluções analítica e numérica para o modelo 2 (condição de contorno convectiva; volume e difusividade constantes).

Tabela 4.7 – Resultados para as simulações: modelo 2 em 29,9 °C.

	Analítico	Numérico
$D_{ef} (m^2s^{-1})$	$6,741 \times 10^{-10}$	$6,737 \times 10^{-10}$
$h (ms^{-1})$	$9,151 \times 10^{-8}$	$9,175 \times 10^{-8}$
χ^2	$1,2153 \times 10^{-3}$	$1,2292 \times 10^{-3}$
R^2	0,999530	0,999525

Uma inspeção na Fig. 4.2 ou na Tab. 4.7 indica que os resultados analítico e numérico são equivalentes, e ambos apresentam bons indicadores estatísticos referentes aos ajustes. Obviamente, numa análise preliminar, o modelo proposto para a descrição da cinética da secagem de bananas pode ser considerado bom. Entretanto, apesar dos bons resultados obtidos, existe uma grande falha na abordagem física referente a este último modelo: a variação do volume não é considerada. Esta observação já havia sido feita por Queiroz e Nebra (2001) ao estudar este modelo, usando o método numérico das diferenças finitas aplicada a um cilindro infinito representativo das bananas.

4.4 – Simulação numérica: modelo 3

Para incluir a variação de volume durante a secagem, as soluções analíticas serão descartadas no restante deste trabalho. Assim, a seguir, serão realizados novos processos de otimização da solução numérica (100 volumes de controle, com 1000 passos no tempo) para as secagens a 29,9; 49,9 e 68,4 °C. Nestas novas otimizações, a condição de contorno será do terceiro tipo (convectiva); a difusividade efetiva será considerada constante, mas as variações dimensionais serão incluídas. As simulações numéricas podem ser observadas através da Fig. 4.3. Os principais resultados obtidos para o modelo 3 também são apresentados na Tab. 4.8.

Tabela 4.8 – Resultados para as simulações usando o modelo 3 nas três temperaturas.

		Numérico
29,9 °C	$D_{ef} (m^2s^{-1})$	$1,641 \times 10^{-10}$
	$h (ms^{-1})$	$2,115 \times 10^{-7}$
	χ^2	$4,8474 \times 10^{-3}$
	R^2	0,998138
49,9 °C	$D_{ef} (m^2s^{-1})$	$3,723 \times 10^{-10}$
	$h (ms^{-1})$	$4,457 \times 10^{-7}$
	χ^2	$8,9360 \times 10^{-3}$
	R^2	0,995900
68,4 °C	$D_{ef} (m^2s^{-1})$	$7,851 \times 10^{-10}$
	$h (ms^{-1})$	$3,492 \times 10^{-7}$
	χ^2	$4,2302 \times 10^{-3}$
	R^2	0,997576

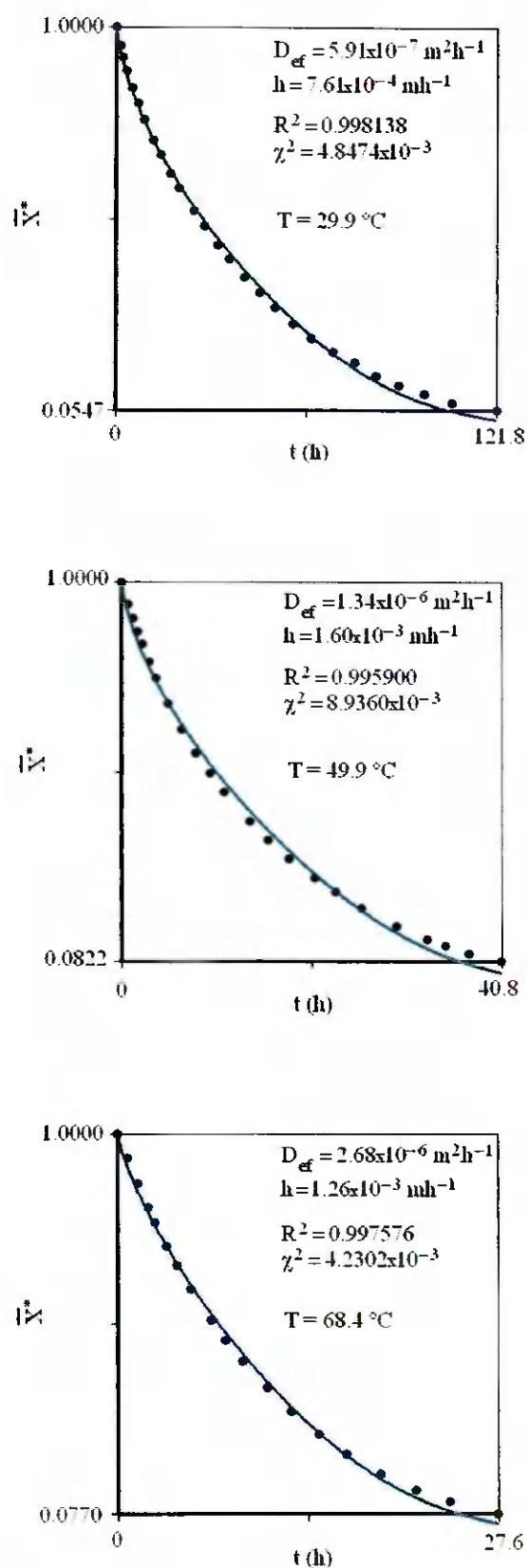


Figura 4.3 – Cinéticas de secagem para o modelo 3 (condição de contorno convectiva, difusividade constante e volume variável) nas temperaturas de 29,9; 49,9 e 68,4 °C.

4.5 – Simulação numérica: modelo 4

Na tentativa de melhorar os resultados para a simulação da cinética de secagem, um novo modelo será proposto neste trabalho. Essencialmente, neste modelo, a condição de contorno é convectiva, enquanto que tanto a difusividade quanto o volume das bananas são considerados variáveis. Visando obter uma função adequada para descrever a difusividade ao longo do processo de secagem, será considerado o raciocínio a seguir. Os gráficos da Fig. 4.3 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. Após algumas tentativas, optou-se por uma expressão disponível na literatura para a difusividade efetiva em função da razão de umidade local dada da seguinte forma (MARINOS-KOURIS e MAROULIS, 1995):

$$D = D_0 \exp(aX^*) \quad (4.1)$$

Desta forma, realizando as simulações para a cinética de secagem nas três temperaturas, usando o modelo 4, obtêm-se os resultados sumarizados na Tab 4.9 (no SI).

Tabela 4.9 – Resultados para as simulações usando o modelo 4 nas três temperaturas.

		Numérico
29,9 °C	$D_{ef} (m^2s^{-1})$	$1,100 \times 10^{-10} \exp(1,690X^*)$
	$h (ms^{-1})$	$1,064 \times 10^{-7}$
	χ^2	$8,643 \times 10^{-5}$
	R^2	0,999966
49,9 °C	$D_{ef} (m^2s^{-1})$	$2,093 \times 10^{-10} \exp(2,420X^*)$
	$h (ms^{-1})$	$2,007 \times 10^{-7}$
	χ^2	$2,3679 \times 10^{-4}$
	R^2	0,999895
68,4 °C	$D_{ef} (m^2s^{-1})$	$4,184 \times 10^{-10} \exp(2,821X^*)$
	$h (ms^{-1})$	$1,974 \times 10^{-7}$
	χ^2	$4,1301 \times 10^{-4}$
	R^2	0,999752

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, 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 foram realizadas com o tempo total de secagem dividido em 2000 passos (ao invés de 1000). Alguns dos resultados para a simulação da cinética de secagem em 29,9 °C podem ser observados através das Fig. 4.4 e 4.5.

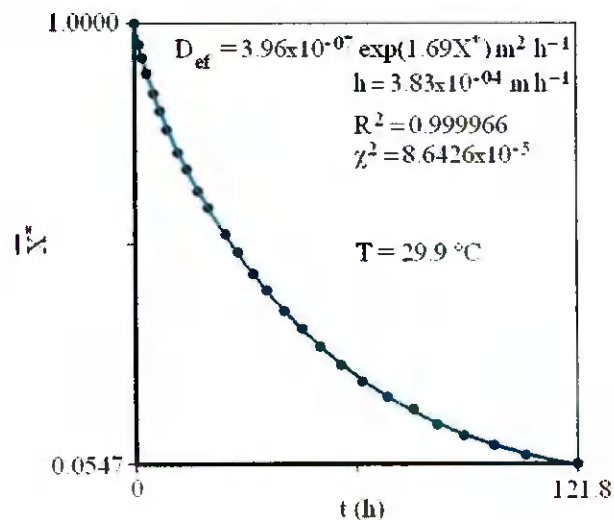


Figura 4.4 – Cinética de secagem obtida através do modelo 4 com $T = 29,9$ °C.

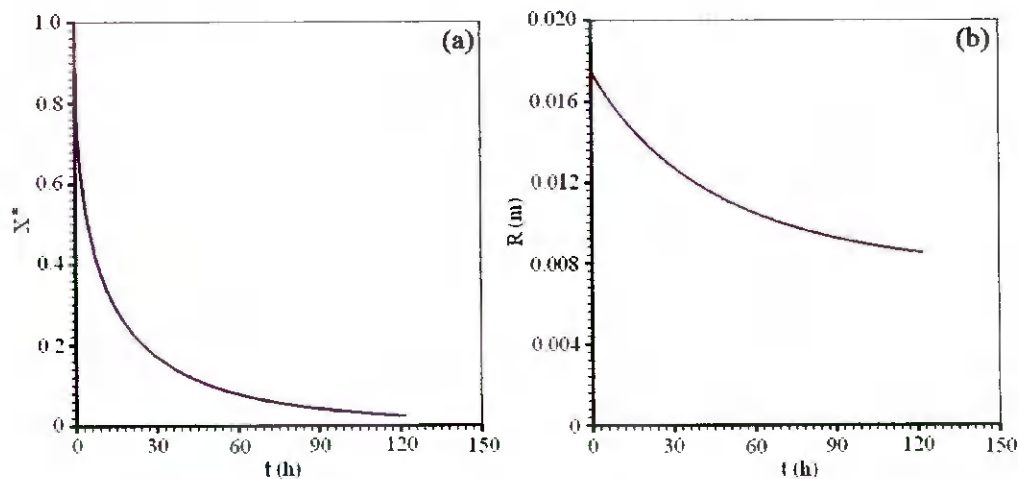


Figura 4.5 – Modelo 4 para 29,9 °C. (a) Razão de umidade no contorno; (b) raio da banana versus o tempo de secagem.

Informações sobre a distribuição de umidade em tempos específicos para a temperatura do ar de secagem em 29,9 °C podem ser obtidas na Fig. 4.6, dada a seguir.

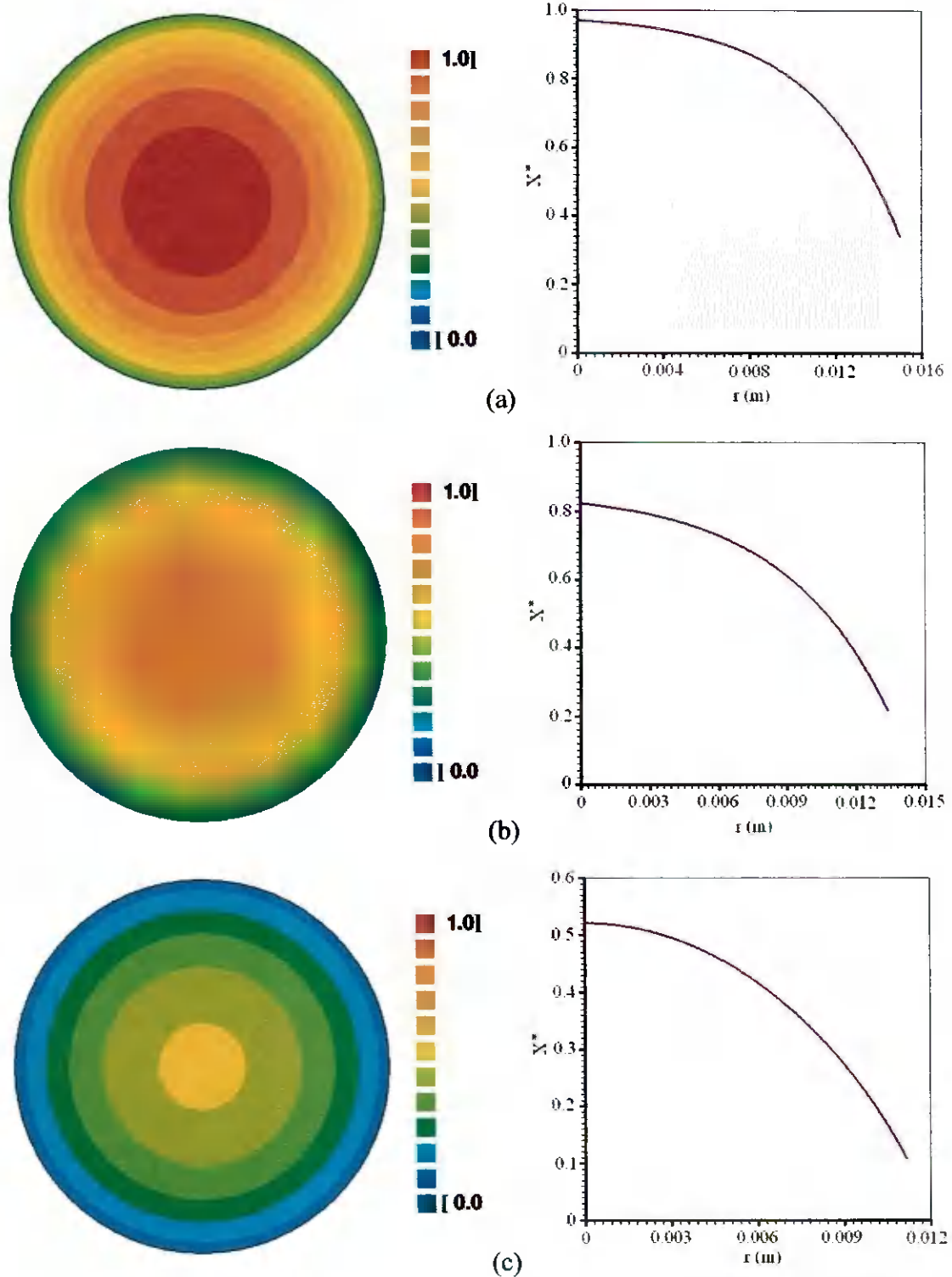


Figura 4.6 – Modelo 4 para 29,9 °C. Gráficos de contorno (fora de escala) representando a distribuição de umidade na seção reta do cilindro e gráfico da razão de umidade em função da posição radial em: (a) $t = 12,18$ h; (b) $t = 24,36$ h; (c) $t = 48,72$ h.

Os resultados para a simulação numérica da cinética de secagem em 49,9 °C, usando o modelo 4, podem ser observados através das Fig. 4.7.

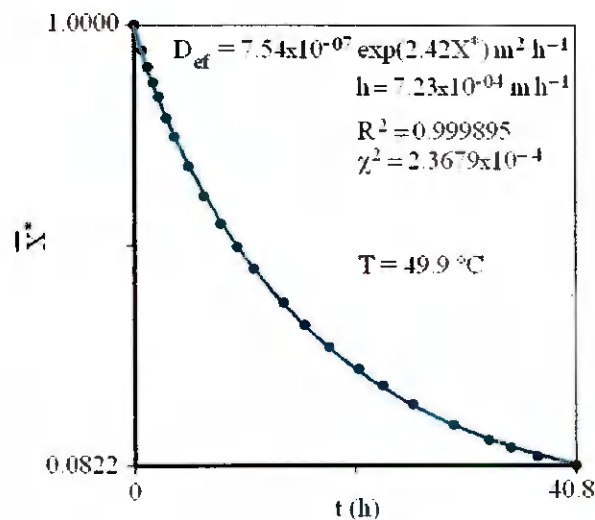


Figura 4.7 – Cinética de secagem obtida através do modelo 4 com T = 49,9 °C.

Para T = 49,9 °C, os valores da razão de umidade no contorno e também do raio, ambos, ao longo do tempo podem ser obtidos através dos gráficos apresentados na Fig. 4.8.

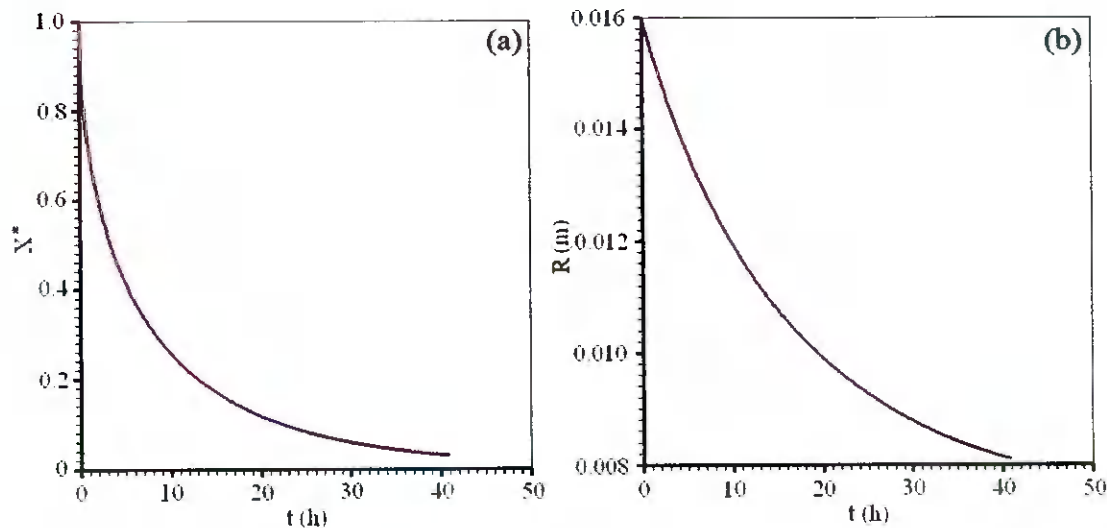


Figura 4.8 – Modelo 4 para 49,9 °C. (a) Razão de umidade no contorno; (b) raio da banana versus o tempo de secagem.

Informações sobre a distribuição de umidade em tempos específicos para a temperatura do ar de secagem em 49,9 °C podem ser obtidas na Fig. 4.9, dada a seguir.

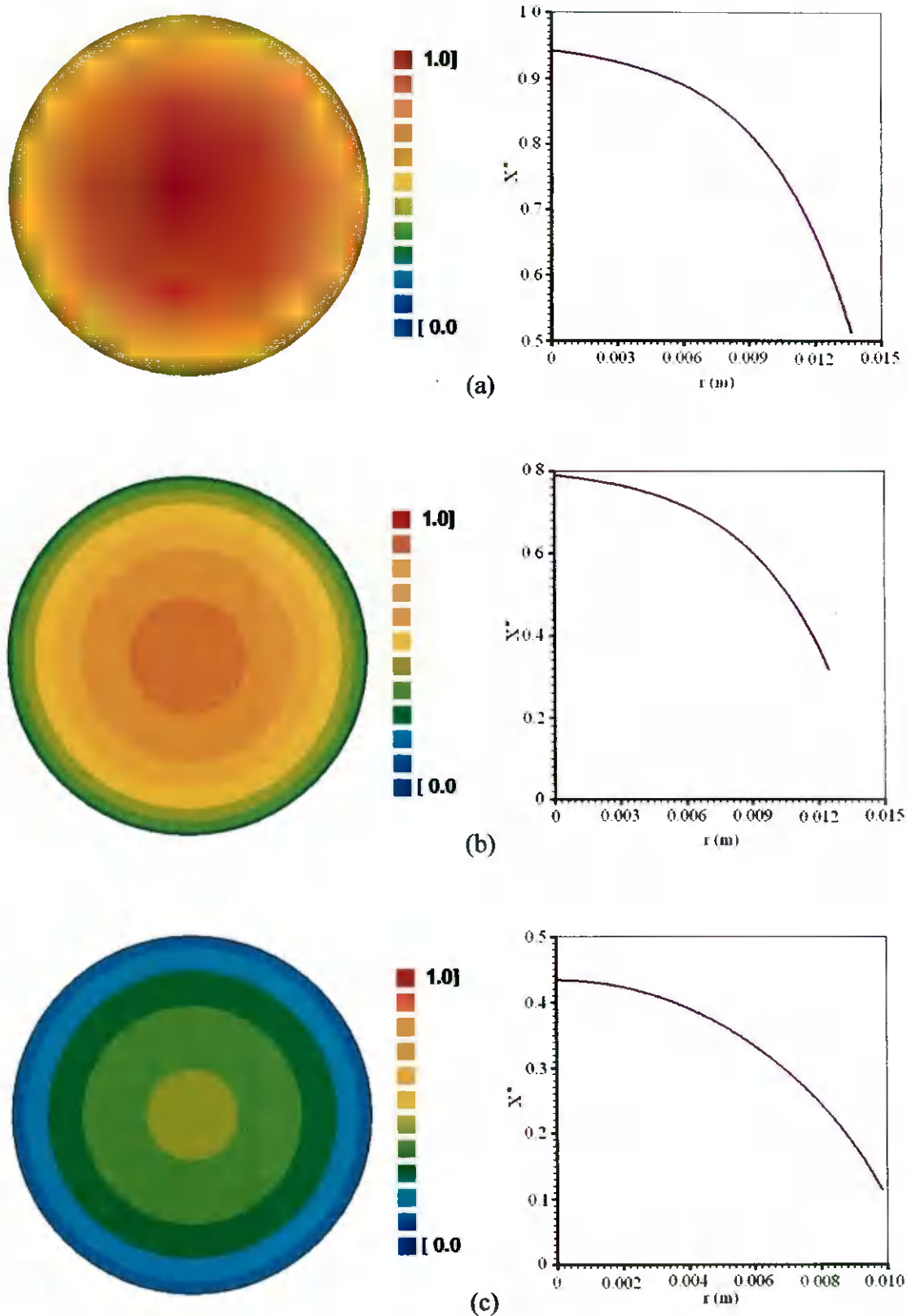


Figura 4.9 – Modelo 4 para 49,9 °C. Gráficos de contorno (fora de escala) representando a distribuição de umidade na seção reta do cilindro e gráfico da razão de umidade em função da posição radial em: (a) $t = 4,08$ h; (b) $t = 8,15$ h; (c) $t = 20,38$ h.

Os resultados para a simulação numérica da cinética de secagem em 68,4 °C, usando o modelo 4, podem ser observados através das Fig. 4.10.

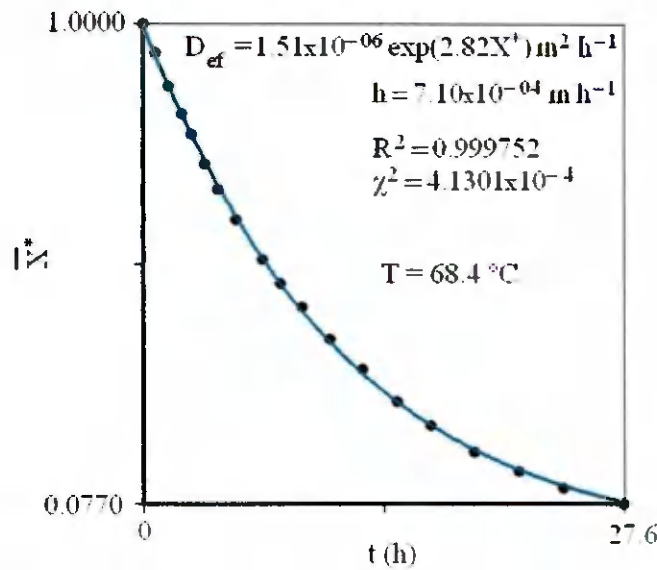


Figura 4.10 – Cinética de secagem obtida através do modelo 4 com T = 68,4 °C.

Para T = 68,4 °C, os valores da razão de umidade no contorno e também do raio, arabos ao longo do tempo, podem ser obtidos através dos gráficos apresentados na Fig. 4.11.

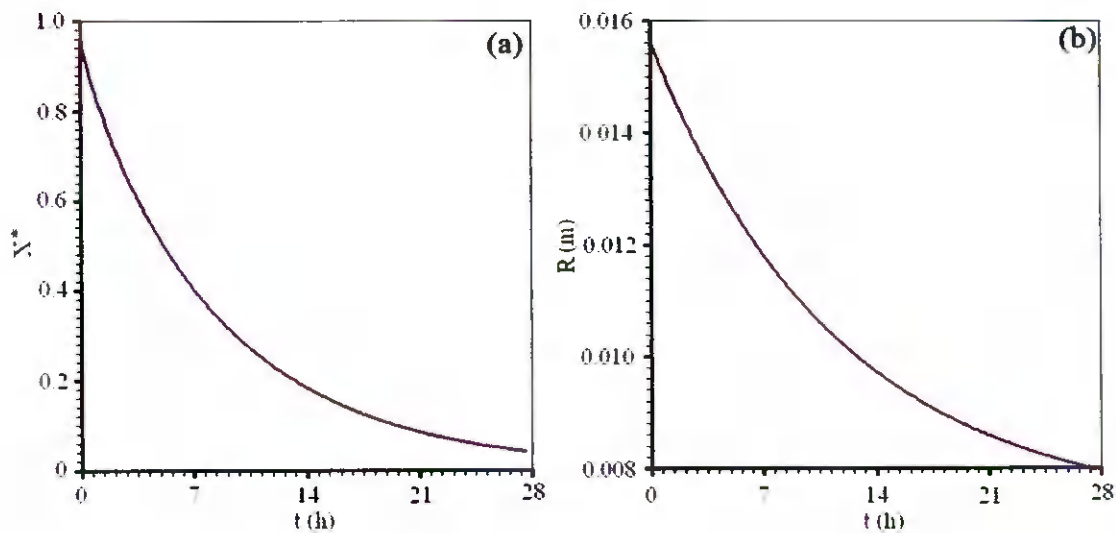


Figura 4.11 – Modelo 4 para 68,4 °C. (a) Razão de umidade no contorno; (b) raio da banana versus o tempo de secagem.

Informações sobre a distribuição de umidade em tempos específicos para a temperatura do ar de secagem em 68,4 °C podem ser obtidas na Fig. 4.12, dada a seguir.

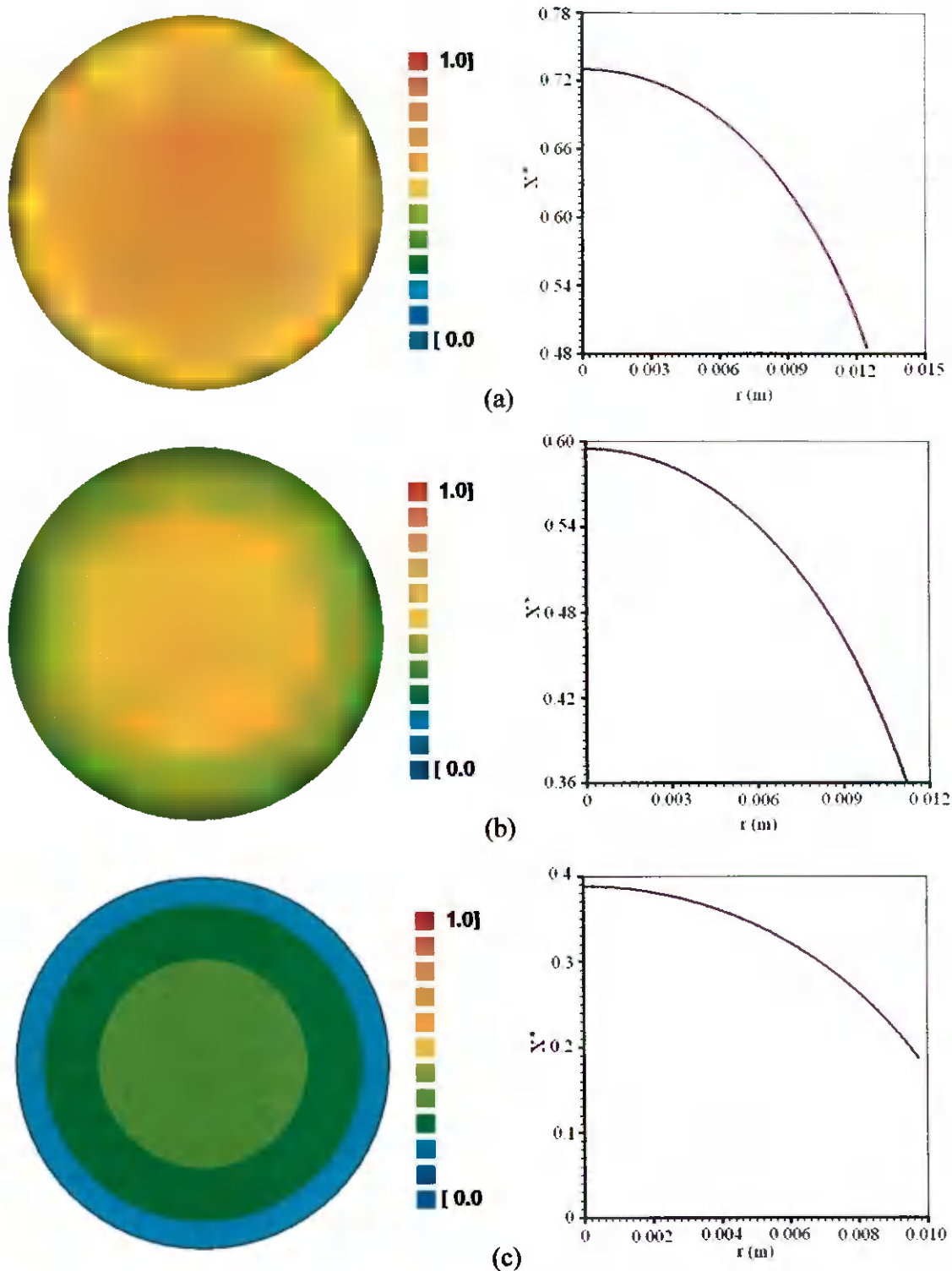


Figura 4.12 – Modelo 4 para 68,4 °C. Gráficos de contorno (fora de escala) representando a distribuição de umidade na seção reta do cilindro e gráfico da razão de umidade em função da posição radial em: (a) $t = 5,52$ h; (b) $t = 8,28$ h; (c) $t = 13,80$ h.

A proposição do modelo 4, bem como a sua aplicação no estudo da cinética de secagem de bananas, são considerados como uma contribuição do presente trabalho. Deve ser levado em consideração o fato de que tal modelo é muito superior aos demais discutidos não somente neste trabalho, mas também naqueles disponíveis na literatura consultada, conforme a discussão que será apresentada na seção a seguir. Além disso, as ferramentas desenvolvidas são capazes de resolver, numericamente, a partir de dados experimentais, a equação de difusão aplicada a tal modelo, quando as bananas são representadas por um cilindro infinito.

4.6 – Análise dos modelos utilizados

Inicialmente, convém reafirmar a inadequação do modelo 1 (condição de contorno de equilíbrio, volume e difusividade constantes) para simular a cinética de secagem de bananas. Mesmo assim, através dos resultados obtidos pelas formulações analítica e numérica, pode-se constatar a coerência das duas formulações, o que pode ser verificado tanto por inspeção da Tab. 4.6 quanto da Fig. 4.1. Conforme se observa, os resultados para as duas formulações podem ser considerados idênticos.

O modelo 2 (com condição de contorno convectiva, volume e difusividade constantes) resultou em indicadores estatísticos que podem ser considerados muito bons, tanto para a formulação analítica quanto para a formulação numérica. A propósito, novamente pode-se constatar a equivalência das duas formulações através da análise dos resultados informados na Tab. 4.7, ou mesmo por inspeção da Fig. 4.2. Provavelmente, estes bons resultados obtidos sejam provenientes de fatores que se cancelam pois, como foi mencionado, o modelo 2 não considera a significativa retração volumétrica. Conforme foi posteriormente verificado, a difusividade constante também não é adequada na descrição da cinética de secagem. Assim, provavelmente, um efeito tenha mascarado o outro no modelo 2, que apresenta bons resultados para a cinética apesar de não ser fisicamente consistente.

Os resultados referentes ao modelo 3 (com condição de contorno convectiva, difusividade constante e volume variável) deixara claro o fato de que a consideração da difusividade constante superestima este parâmetro na parte final da secagem, o que levou à constatação de que o modelo com difusividade constante não é adequado para a

secagem de bananas. A propósito, o desenvolvimento de uma ferramenta numérica capaz de considerar este fato nas simulações de transporte de água em sólidos cilíndricos é uma das contribuições deste trabalho.

Naturalmente, uma inspeção dos resultados obtidos e indicados nas Fig. 4.4, 4.7 e 4.10 possibilita afirmar que o modelo 4, que considera condição de contorno convectiva, difusividade efetiva variável (em função da razão de umidade local) e volume variável (em função da razão de umidade média), é bastante satisfatório para descrever a cinética de secagem de bananas. Para tal modelo foi obtido, inclusive, a distribuição radial da razão de umidade em um tempo especificado, conforme pode ser observado através das Fig. 4.6, 4.9 e 4.12. Estas informações sobre a distribuição de umidade são importantes porque possibilitam prever regiões de grandes tensões produzidas por gradientes do teor de umidade.

Aparentemente, o modelo 4 ainda poderia ser melhorado, ao ser levado em consideração o fato de ser fisicamente mais consistente correlacionar a retração volumétrica com a razão de umidade local, ao invés da razão de umidade média. Naturalmente, esta observação pode ser explicada baseada no fato de que no início do processo a retração deve ocorrer mais pronunciadamente nas camadas mais externas, que perdem maior quantidade de água que as camadas mais internas. Isto pode ser verificado por inspeção das Fig. 4.6, 4.9 e 4.12, que apresentam os gráficos de contorno mostrando a distribuição radial do teor de umidade no interior do cilindro infinito. Entretanto, tal modelo não será estudado neste trabalho.

Para que se possa perceber de forma rápida o quanto um modelo discutido neste trabalho tem indicadores estatísticos melhores ou piores do que os outros, um resumo de tais indicadores, referentes aos ajustes das curvas simuladas numericamente aos dados experimentais, é apresentado através da Tab. 4.10.

Deve-se observar que os modelos 1 e 2 foram aplicados somente para a cinética de secagem a 29,9 °C, enquanto que os demais foram aplicados para as três temperaturas enfocadas neste trabalho: 29,9; 49,9 e 68,4 °C.

Tabela 4.10 – Indicadores estatísticos referentes aos ajustes dos modelos numéricos aos dados experimentais relativos à secagem de bananas.

		29,9 °C	49,9 °C	68,4 °C
Modelo 1	χ^2	0,110754	-	-
	R^2	0,988160	-	-
Modelo 2	χ^2	$1,2292 \times 10^{-3}$	-	-
	R^2	0,999525	-	-
Modelo 3	χ^2	$4,8474 \times 10^{-3}$	$8,9360 \times 10^{-3}$	$4,2302 \times 10^{-3}$
	R^2	0,998138	0,995900	0,997576
Modelo 4	χ^2	$8,6426 \times 10^{-5}$	$2,3679 \times 10^{-4}$	$4,1301 \times 10^{-4}$
	R^2	0,999966	0,999895	0,999752

Uma observação da Tab. 4.10 possibilita perceber o quanto o modelo 4 é superior ao modelo 3 na descrição da cinética de secagem de bananas. Por exemplo, para a temperatura do ar de secagem igual a 29,9 °C, o qui-quadrado referente ao modelo 3 é cerca de 56 vezes maior que o qui-quadrado referente ao modelo 4. Ainda, para a temperatura de 49,9 °C o primeiro é cerca de 38 vezes maior que o segundo e, para 68,4 °C, este fator é aproximadamente igual a 10.

Obviamente, um maior número de parâmetros de ajuste deve melhorar o resultado simulado para a cinética de secagem, o que foi feito para expressar a difusividade no modelo 4. Mas o objetivo deste trabalho tem outro foco: em algumas situações físicas, como a que foi apresentada, a difusividade constante não é adequada para descrever a cinética de secagem, o que pode ser verificado analisando-se os resultados obtidos através do modelo 3. Assim, torna-se necessário propor um outro modelo para a difusividade, diferente daquele supondo a difusividade constante. Neste outro modelo, a difusividade deveria diminuir quando a razão de umidade diminui. Deve-se observar que tal expressão é equivalente à seguinte: a difusividade deveria aumentar quando a razão de umidade aumenta. Conforme foi mostrado, a escolha adequada de uma função crescente para a difusividade, com relação à razão de umidade, produz resultados melhores para a cinética de secagem que aqueles pressupondo difusividade constante.

4.7 – Expressão para a difusividade variável

Um resumo para as expressões referentes às difusividades variáveis, obtidas por otimização, usando o modelo 4, pode ser dado através da Tab. 4.11, após a devida transformação de unidades para o sistema internacional. Deve ser observado que tais expressões indicam as difusividades em função da razão umidade local, no interior das bananas, para cada temperatura do ar de secagem.

Tabela 4.11 – Expressões para a difusividade em função da razão de umidade local através do uso do modelo 4.

T (°C)	Difusividades (m^2s^{-1})
29,9	$1,1001096 \times 10^{-10} \exp(1,690455X^*)$
49,9	$2,0932963 \times 10^{-10} \exp(2,419555X^*)$
68,4	$4,1836163 \times 10^{-10} \exp(2,821496X^*)$

Uma visualização dos resultados resumidos na Tab. 4.11 pode ser observada através do gráfico mostrado na Fig. 4.13.

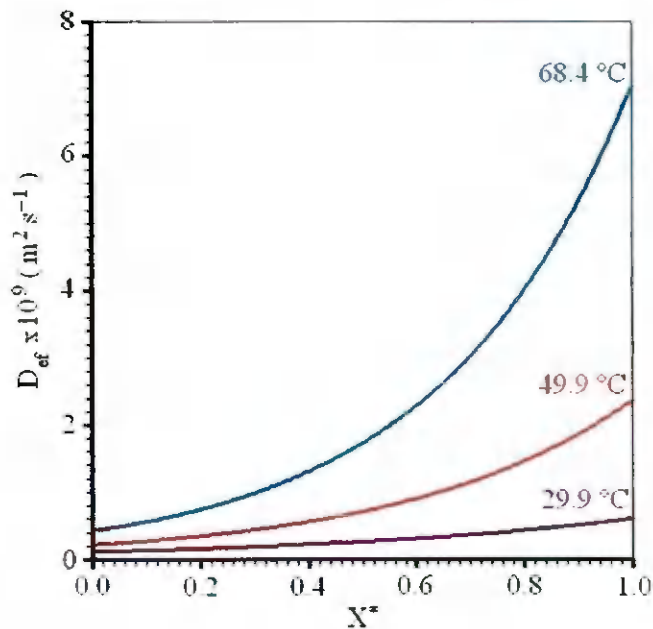


Figura 4.13 – Gráfico das difusividades em função da razão de umidade local obtidas com o uso do modelo 4.

O objetivo, agora, é determinar uma única expressão que represente as difusividades, em todas as temperaturas investigadas, e em função da razão de umidade local. Para tal, para cada temperatura serão determinados valores para as difusividades referentes a razões de umidade local previamente estipuladas: $X^* = 0,0; 0,2; 0,4; 0,8$ e $1,0$. Dessa forma, a Tab. 4.12 pode ser montada com valores das difusividades dependentes da temperatura de secagem T e da razão de umidade local X^* .

Tabela 4.12 – Difusividade de água em bananas, obtidas como função da razão de umidade local e da temperatura de secagem (modelo 4): $D_{ef} \times 10^{10}$ ($m^2 s^{-1}$).

T (°C)	X^*					
	0,0	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0
29,9	1,10	1,54	2,16	3,03	4,25	5,96
49,9	2,09	3,40	5,51	8,94	14,50	23,53
68,4	4,18	7,36	12,93	22,74	39,98	70,29

Uma inspeção da Tab. 4.12 possibilita perceber que a difusividade aumenta tanto com o aumento da temperatura quanto com o aumento da razão do teor de umidade local. Vários autores também encontraram o mesmo tipo de comportamento para a difusividade de água em estudos de secagem (KIRANOUDIS et al., 1995; ZOGZAS e MAROULIS, 1996; HAMDAMI et al., 2004; RUIZ-LÓPEZ e GARCÍA-ALVARADO, 2007), mas resultados opostos também são reportados para alguns produtos biológicos (HASSINI et al., 2004).

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 (MARINOS-KOURIS e MAROULIS, 1995; ZOGZAS e MAROULIS, 1996):

$$D_{ef} = D_0 \exp(aX^*) \exp\left(-\frac{E_a}{R(T + 273,15)}\right). \quad (4.2)$$

em que “ D_0 ”, “ a ” e “ E_a/R ” são parâmetros a serem determinados por ajuste de curvas, sendo R a constante universal dos gases ideais.

Para ajustar a Eq. (4.2) aos dados da Tab. 4.12, tais dados devem ser informados ao software LAB Fit na estrutura em colunas indicada na Tab. 4.13.

Tabela 4.13 – Estrutura dos dados da difusividade efetiva para o ajuste da Eq. (4.2).

T (°C)	X*	D _{ef} × 10 ¹⁰ (m ² s ⁻¹)
29,9	0,0	1,10
29,9	0,2	1,54
29,9	0,4	2,16
29,9	0,6	3,03
29,9	0,8	4,25
29,9	1,0	5,96
49,9	0,0	2,09
49,9	0,2	3,40
49,9	0,4	5,51
49,9	0,6	8,94
49,9	0,8	14,50
49,9	1,0	23,53
68,4	0,0	4,18
68,4	0,2	7,36
68,4	0,4	12,93
68,4	0,6	22,74
68,4	0,8	39,98
68,4	1,0	70,29

Realizando-se o ajuste da Eq. (4.2) aos dados da Tab. 4.13 é obtido o seguinte resultado:

$$D_{ef} = 4,328 \times 10^{-2} \exp(2,7643X^*) \exp\left(-\frac{6286}{(T + 273,15)}\right). \quad (4.3)$$

Com relação aos indicadores estatísticos referentes ao último ajuste, foram obtidos para o coeficiente de determinação o valor $R^2 = 0,998920$ e para o qui-quadrado o valor $\chi^2 = 7,19615$. Com relação ao teste t-Student foram obtidos: 1) parâmetro A: $t_A = 2,693$ e $P(t_A) = 0,017$; 2) parâmetro B: $t_B = 60,31$ e $P(t_B) = 0,000$; parâmetro C: $t_C = 50,24$ e $P(t_C) = 0,000$. Tais indicadores para o teste t-Student significam que os três

parâmetros são significativos, embora o parâmetro A tenha uma pequena probabilidade de ser zero (1,7%), mesmo tendo o valor obtido.

O gráfico da função que representa a difusividade, dada pela Eq. (4.3), pode ser observado através da Fig. 4.14, dada a seguir.

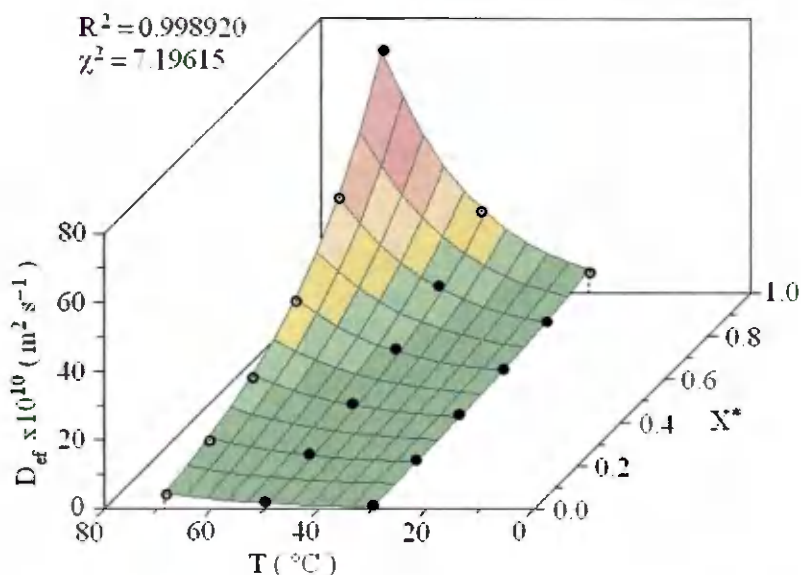


Figura 4.14 – Difusividade de bananas: os círculos cheios representam pontos sobre ou acima da superfície enquanto que os círculos vazios representam pontos abaixo.

Seguindo as razões de Hassini et al. (2004), o fator exponencial da temperatura na Eq. (4.3) pode ser considerado equivalente ao fator exponencial da equação de Arrhenius:

$$D_{ef} = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{R(T + 273,15)}\right) \quad (4.4)$$

em que D_0 é o fator pré-exponencial, R é a constante universal dos gases ideais e E_a é a energia de ativação. Assim, comparando a Eq. (4.4) com a Eq. (4.3), a energia de ativação é determinada:

$$E_a = 52,26 \text{ kJ mol}^{-1}, \quad (4.5)$$

que é um valor compatível com outros valores disponíveis na literatura para produtos biológicos. Deve-se observar a influência do modelo adotado sobre o valor determinado para a energia de ativação. No caso do modelo 3, por exemplo, o ajuste da Eq. 4.4 aos três pares de dados (T , D_{ef}) disponíveis na Tab. 4.8 resulta em $E_a = 36,0 \text{ kJmol}^{-1}$.

4.8 – Difusividades nas interfaces dos volumes de controle

Para se ter uma idéia dos valores das difusividades nas interfaces dos volumes de controle, calculados com a Eq. (3.31), alguns destes valores referentes ao modelo 4 serão apresentados. Inicialmente, na Tab. 4.14, os valores determinados para as difusividades referentes à secagem a $29,9 \text{ }^\circ\text{C}$ no instante $t = 12,18 \text{ h}$ são mostrados. Vale salientar que o volume de controle 1 é o mais interno e o 100 é o mais externo.

Tabela 4.14 – Difusividades nas interfaces para $29,9 \text{ }^\circ\text{C}$ em $t = 12,18 \text{ h}$: $D_{ef} \times 10^7 \text{ (m}^2\text{h}^{-1}\text{)}$

Volume de controle	Interface leste (externa)	Interface oeste (interna)
1	20,2145	20,2154
2	20,2118	20,2145
3	20,2073	20,2118
4	20,2010	20,2073
5	20,1928	20,2010
6	20,1828	20,1928
7	20,1710	20,1828
...
47	17,9330	18,0398
48	17,8229	17,9330
49	17,7096	17,8229
50	17,5929	17,7096
51	17,4730	17,5929
52	17,3496	17,4730
53	17,2228	17,3496
...
94	8,6183	8,9103
95	8,3229	8,6183
96	8,0241	8,3229
97	7,7221	8,0241
98	7,4171	7,7221
99	7,1093	7,4171
100	6,9583	7,1093

Conforme se observa na Tab. 4.14, as difusividades nas interfaces variam de um valor máximo a oeste do volume de controle 1, isto é, no ponto central da seção reta do

cilindro infinito ($D_{ef} = 20,2154 \times 10^{-7} \text{ m}^2\text{h}^{-1}$), até um valor mínimo a leste do volume de controle 100, isto é, no contorno ($D_{ef} = 6,9583 \times 10^{-7} \text{ m}^2\text{h}^{-1}$). Isto significa que o menor valor é cerca de 34,4% do valor máximo. A variação oeste-leste para o volume 1 é de $9,0 \times 10^{-11} \text{ m}^2\text{h}^{-1}$ enquanto que a mesma variação para o volume 100 é de $1,51 \times 10^{-8} \text{ m}^2\text{h}^{-1}$. Isto significa que a região mais externa seria a região preferencial no caso de um refino localizado de malha. Naturalmente, chega-se a esta mesma conclusão por simples inspeção da Fig. 4.9, onde é observado que a região próxima do contorno é aquela com maiores gradientes de umidade.

Para a secagem a $49,9 \text{ }^\circ\text{C}$, no instante $t = 4,08 \text{ h}$, a variação dos valores da difusividade efetiva para alguns dos 100 volumes de controle pode ser observada através da Tab. 4.15.

Tabela 4.15 – Difusividades nas interfaces para $49,9 \text{ }^\circ\text{C}$ em $t = 4,08 \text{ h}$: $D_{ef} \times 10^7 \text{ (m}^2\text{h}^{-1}\text{)}$.

Volume de controle	Interface leste (externa)	Interface oeste (interna)
1	72,7966	72,8007
2	72,7841	72,7966
3	72,7633	72,7841
4	72,7341	72,7633
5	72,6966	72,7341
6	72,6508	72,6966
7	72,5966	72,6508
...
47	63,1324	63,5578
48	62,6963	63,1324
49	62,2494	62,6963
50	61,7915	62,2494
51	61,3227	61,7915
52	60,8427	61,3227
53	60,3516	60,8427
...
94	29,4046	30,4334
95	28,3615	29,4046
96	27,3040	28,3615
97	26,2321	27,3040
98	25,1459	26,2321
99	24,0456	25,1459
100	23,5051	24,0456

Observando-se a Tab. 4.15, percebe-se que as difusividades nas interfaces novamente variam de um valor máximo a oeste do volume de controle 1, isto é, no ponto central da seção reta do cilindro infinito ($D_{ef} = 72,8007 \times 10^{-7} \text{ m}^2\text{h}^{-1}$), até um valor mínimo a leste do volume de controle número 100, isto é, no entorno do cilindro infinito ($D_{ef} = 23,5051 \times 10^{-7} \text{ m}^2\text{h}^{-1}$). Isto significa que o menor valor é cerca de 32,3% do valor máximo para o instante considerado.

Por último, para a secagem a 68,4 °C, no instante $t = 5,52 \text{ h}$, a variação dos valores da difusividade efetiva para alguns dos 100 volumes de controle pode ser observada através da Tab. 4.16.

Tabela 4.16 – Difusividades nas interfaces para 68,4 °C em $t = 5,52 \text{ h}$: $D_{ef} \times 10^7 \text{ (m}^2\text{h}^{-1}\text{)}$.

Volume de controle	Interface leste (externa)	Interface oeste (interna)
1	118,4693	118,4752
2	118,4518	118,4693
3	118,4224	118,4518
4	118,3814	118,4224
5	118,3287	118,3814
6	118,2642	118,3287
7	118,1880	118,2642
...
47	105,4876	106,0360
48	104,9273	105,4876
49	104,3550	104,9273
50	103,7708	104,3550
51	103,1746	103,7708
52	102,5664	103,1746
53	101,9462	102,5664
...
94	66,0286	67,1526
95	64,8919	66,0286
96	63,7426	64,8919
97	62,5806	63,7426
98	61,4058	62,5806
99	60,2183	61,4058
100	59,6275	60,2183

Observando-se a Tab. 4.16, percebe-se que as difusividades nas interfaces novamente variam de um valor máximo a oeste do volume de controle 1, isto é, no ponto central da seção reta do cilindro infinito ($D_{ef} = 118,4752 \times 10^{-7} \text{ m}^2\text{h}^{-1}$), até um valor

mínimo a leste do volume de controle número 100, isto é, no contorno do cilindro infinito ($D_{ef} = 59,6275 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ h}^{-1}$). Isto significa que o menor valor é cerca de 50,3% do valor máximo para o instante considerado.

4.9 Resultados simulados e dados experimentais

Obviamente, os indicadores estatísticos referentes ao modelo 4 possibilitam avaliar a coerência entre os resultados simulados e os dados experimentais. Entretanto, como o software desenvolvido apresenta os resultados simulados referentes à cinética do transporte de água, tais resultados serão apresentados neste texto para fins de comparação. Para a temperatura do ar de secagem igual a 29,9 °C, os dados experimentais e os resultados simulados são apresentados na Tab. 4.17.

Tabela 4.17 – Dados experimentais (exp) e resultados simulados (sim) para $T = 29,9 \text{ °C}$.

t (h)	\bar{X}_{exp}^*	\bar{X}_{sim}^*
0,000	1,000	1,0000
1,250	0,9569	0,9567
2,250	0,9275	0,9273
3,500	0,8943	0,8947
5,250	0,8531	0,8542
7,050	0,8148	0,8158
9,100	0,7753	0,7763
12,10	0,7239	0,7250
14,35	0,6891	0,6897
17,60	0,6431	0,6422
20,35	0,6071	0,6053
25,10	0,5495	0,5465
28,35	0,5122	0,5096
32,85	0,4642	0,4626
36,35	0,4293	0,4285
41,35	0,3841	0,3841
46,10	0,3463	0,3455
51,10	0,3089	0,3086
56,85	0,2686	0,2706
62,60	0,2336	0,2366
69,60	0,1992	0,2007
76,54	0,1732	0,1695
83,35	0,1401	0,1435
90,60	0,1169	0,1197
98,82	0,0966	0,0972
107,6	0,0754	0,0776
121,8	0,0547	0,0535

Para a temperatura do ar de secagem igual a 49,9 °C, os dados experimentais e os resultados simulados são apresentados na Tab. 4.18.

Tabela 4.18 – Dados experimentais (exp) e resultados simulados (sim) para T = 49,9 °C.

t (h)	\bar{X}_{exp}^*	\bar{X}_{sim}^*
0,000	1,000	1,0000
0,750	0,9494	0,9425
1,250	0,9142	0,9095
1,750	0,8816	0,8783
2,250	0,8511	0,8488
3,000	0,8080	0,8082
3,750	0,7683	0,7698
5,000	0,7082	0,7119
6,500	0,6451	0,6489
8,017	0,5889	0,5924
9,517	0,5393	0,5414
11,02	0,4945	0,4954
13,77	0,4221	0,4217
15,77	0,3766	0,3752
18,02	0,3323	0,3289
20,77	0,2847	0,2803
23,02	0,2504	0,2458
25,77	0,2129	0,2093
29,52	0,1680	0,1680
32,77	0,1365	0,1388
34,77	0,1201	0,1232
37,27	0,1027	0,1062
40,77	0,0822	0,0862

Por último, para a temperatura do ar de secagem igual a 68,4 °C, os dados experimentais e os resultados simulados são apresentados na Tab. 4.19, dada a seguir.

Tabela 4.19 – Dados experimentais (exp) e resultados simulados (sim) para T = 68,4 °C.

t (h)	\bar{X}_{exp}	\bar{X}_{sim}
0,000	1,000	1,0000
0,750	0,9433	0,9374
1,500	0,8800	0,8795
2,250	0,8216	0,8254
2,750	0,7854	0,7960
3,550	0,7279	0,7372
4,317	0,6800	0,6900
5,317	0,6235	0,6318
6,817	0,5466	0,5531
7,850	0,4977	0,5041
9,100	0,4453	0,4502
10,85	0,3805	0,3842
12,60	0,3230	0,3277
14,60	0,2663	0,2728
16,60	0,2180	0,2269
19,10	0,1687	0,1799
21,60	0,1302	0,1426
24,10	0,1015	0,1129
27,60	0,0708	0,0814

4.10 – Taxas de secagem

Obviamente, inspeções nas Fig. 4.4, 4.7 e 4.10 possibilitam afirmar que as cinéticas de secagens para as três temperaturas ocorrem exclusivamente em taxas decrescentes. Entretanto, para conhecer o comportamento destas taxas em relação ao tempo, o seguinte procedimento será empregado. Os resultados obtidos para as simulações, dados nas Tab. 4.17, 4.18 e 4.19 serão fornecidos ao software LAB Fit, que tem uma ferramenta denominada “Finder”. Esta ferramenta desobscure e classifica as melhores funções de sua biblioteca que se ajustam a cada um dos conjuntos de dados experimentais. Desta forma, é possível conhecer uma função que representa as razões de

umidade ao longo do tempo para cada temperatura, e que pode ser derivada em relação ao tempo, para cada tempo de interesse. Assim a taxa de secagem torna-se conhecida para cada temperatura.

Os resultados para as funções que melhor representam as cinéticas de secagem nas três temperaturas são dados na Tab. 4.20.

Tabela 4.20 – Funções representando a cinética de secagem.

T(°C)	Função	χ^2	R ²
29,9	$\bar{X}^* = 1,0425\exp(-0,01790t - 0,02587t^{1/2}) - 0,03927$	$1,58 \times 10^{-4}$	0,999935
49,9	$\bar{X}^* = [-0,37015 + 1,37292\exp(0,31770t)]^{-0,18412}$	$3,42 \times 10^{-6}$	0,999998
68,4	$\bar{X}^* = 1,0762\exp(-0,09339t) - 0,0770\exp(-0,22872t)$	$2,77 \times 10^{-5}$	0,999983

Cada uma das funções obtidas e relacionadas na Tab 4.20 será derivada em relação ao tempo, nos tempos especificados nas Tab. 4.17, 4.18 e 4.19, e esta operação também será feita usando o software LAB Fit. Os resultados para a temperatura de secagem em 29,9 °C serão apresentados na Tab. 4.21.

Tabela 4.21 – Taxas de secagem em função do tempo para T = 29,9 °C.

t (h)	$-\frac{d\bar{X}}{dt} (h^{-1})$	t (h)	$-\frac{d\bar{X}}{dt} (h^{-1})$
1,25	0,0292	36,35	0,0093
2,25	0,0255	41,35	0,0084
3,5	0,0231	46,10	0,0076
5,25	0,0211	51,10	0,0068
7,05	0,0195	56,85	0,0061
9,1	0,0182	62,60	0,0054
12,1	0,0166	69,60	0,0047
14,35	0,0156	76,54	0,0041
17,6	0,0143	83,35	0,0036
20,35	0,0134	90,60	0,0031
25,1	0,0120	98,82	0,0026
28,35	0,0111	107,60	0,0022
32,85	0,0101	121,80	0,0017

Com os dados apresentados na Tab. 4.21, as taxas de secagem podem ser representadas em função do tempo, o que é feito através da Fig. 4.15, dada a seguir.

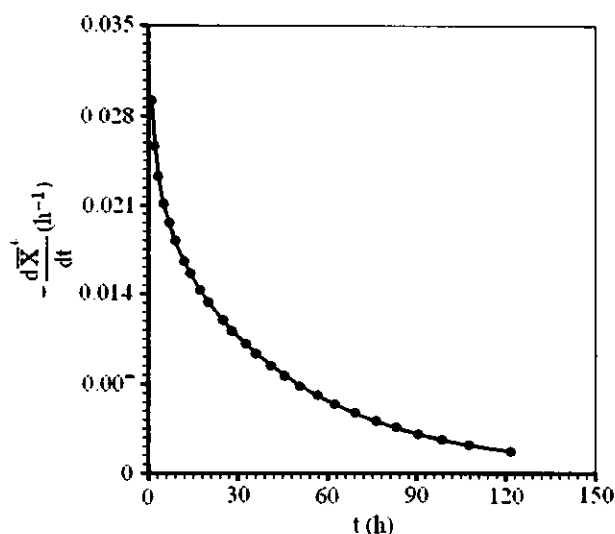


Figura 4.15 – Taxa de secagem em 29,9 °C.

Pam a temperatura de secagem em 49,9 °C as taxas de secagem serão apresentadas através da Tab. 4.22, dada a seguir.

Tabela 4.22 – Taxas de secagem em função do tempo para T = 49,9 °C.

t (h)	$-\frac{d\bar{X}}{dt} \text{ (h}^{-1}\text{)}$	t (h)	$-\frac{d\bar{X}}{dt} \text{ (h}^{-1}\text{)}$
0,750	0,0701	13,770	0,0248
1,250	0,0650	15,770	0,0220
1,750	0,0608	18,020	0,0193
2,250	0,0572	20,770	0,0164
3,000	0,0527	23,020	0,0144
3,750	0,0490	25,770	0,0122
5,000	0,0440	29,520	0,0098
6,500	0,0393	32,770	0,0081
8,017	0,0354	34,770	0,0072
9,517	0,0321	37,270	0,0062
11,020	0,0292	40,770	0,0051

Com os dados apresentados na Tab. 4.22, as taxas de secagem podem ser representadas em função do tempo, o que é feito através da Fig. 4.16, dada a seguir.

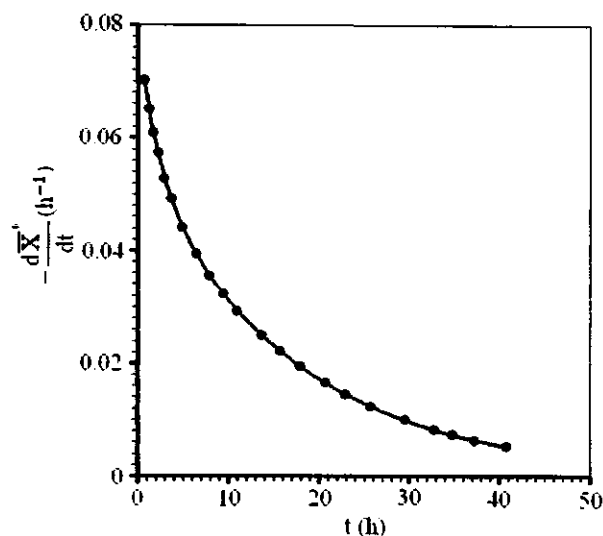


Figura 4.16 – Taxa de secagem em 49,9 °C.

Para a temperatura de secagem em 68,4 °C as taxas de secagem serão apresentadas através da Tab. 4.23.

Tabela 4.23 – Taxas de secagem em função do tempo para T = 68,4 °C.

t (h)	$-\frac{d\bar{X}}{dt} \text{ (h}^{-1}\text{)}$	t (h)	$-\frac{d\bar{X}}{dt} \text{ (h}^{-1}\text{)}$
0,750	0,0789	9,10	0,0408
1,500	0,0749	10,85	0,0350
2,250	0,0709	12,60	0,0300
2,750	0,0683	14,60	0,0251
3,550	0,0643	16,60	0,0209
4,317	0,0606	19,10	0,0167
5,317	0,0559	21,60	0,0132
6,817	0,0495	24,10	0,0105
7,850	0,0454	27,60	0,0076

Com os dados apresentados na Tab. 4.23, as taxas de secagem podem ser representadas em função do tempo, o que é feito através da Fig. 4.17.

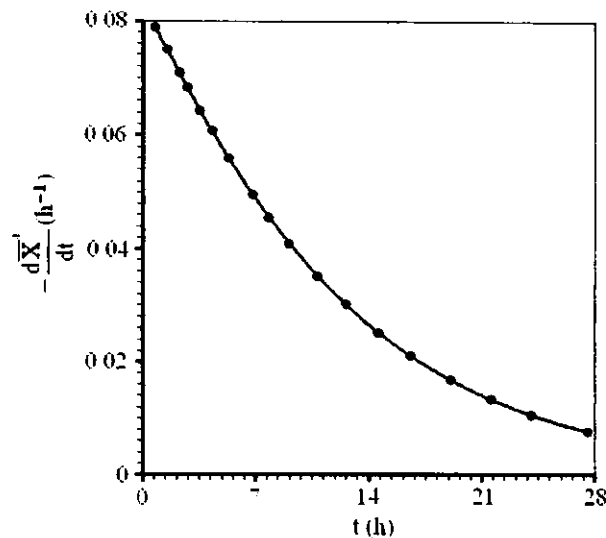


Figura 4.17 – Taxa de secagem em 68,4 °C.

As inspeções nas Fig. 4.15, 4.16 e 4.17 possibilitam confirmar que as cinéticas de secagens para as três temperaturas ocorrem exclusivamente em taxas decrescentes.

4.11 – Comentários sobre as metodologias desenvolvidas

Nesta seção será feito um resumo das metodologias desenvolvidas, bem como uma avaliação sucinta dos resultados obtidos através de suas aplicações.

Com referência ao otimizador desenvolvido para a solução analítica da equação de difusão com condição de contorno de equilíbrio, os resultados obtidos possibilitam afirmar que o algoritmo proposto é adequado aos propósitos estabelecidos, visando eliminar a restrição do uso de poucos termos da série, o que é imposição para a realização de ajustes de curvas. Naturalmente, poder-se-ia acoplar outras soluções analíticas com condição de contorno de equilíbrio ao otimizador. Mas deve ser observado que as soluções analíticas para o cilindro finito ou mesmo para o paralelepípedo são computacionalmente muito mais demoradas que a solução apresentada para o cilindro infinito. Sendo assim, o algoritmo por varreduras diretas pode não ser suficientemente rápido no processo de determinação de valores ótimos para a difusividade referentes a estas geometrias. Neste caso, poder-se-ia fazer uma varredura inicial para determinar o intervalo que contém a difusividade referente ao quadrado mínimo, como a varredura inicial que foi proposta neste trabalho. Então, poderia ser utilizado um algoritmo mais eficiente no processo de otimização como, por

exemplo, o algoritmo do método da bisseção, que requer apenas a função a ser minimizada (no presente caso o qui-quadrado) e o intervalo que contém o mínimo.

Para a solução analítica com condição de contorno convectiva, o otimizador desenvolvido teve que ser adaptado porque, neste caso, a função objetivo depende da difusividade efetiva D_{ef} e do coeficiente de transferência convectiva de massa h . Uma vez admitido que D_{ef} e h são parâmetros não-correlacionados, pode-se fixar h (na verdade, o número de Biot) e neste caso, novamente o qui-quadrado passa a ser função unicamente de D_{ef} . Os resultados obtidos para os parâmetros D_{ef} e h possibilitam afirmar que também neste caso, o otimizador funciona de forma adequada.

O “solver” desenvolvido para a solução numérica da equação de difusão com condição de contorno de equilíbrio apresenta resultados coerentes com os resultados obtidos através da solução analítica, conforme pode ser visto para o modelo 1. Embora tal “solver” também admita valores variáveis para a difusividade (difusividade como função do teor de umidade local), este modelo para a simulação da cinética de secagem não foi apresentado no presente trabalho, embora já tenha sido usado na descrição da cinética de secagem relativa a outros dados experimentais (SILVA et al., 2008a).

Com relação ao “solver” para a solução numérica da equação de difusão com condição de contorno convectiva, pode-se observar, através do modelo 2, a coerência dos resultados obtidos através das soluções numérica e analítica. A possibilidade de simular modelos fisicamente consistentes, com a consideração de volume e difusividade variáveis, faz deste “solver” um poderoso aliado de pesquisadores interessados em problemas difusivos em sólidos de geometria cilíndrica.

O segundo otimizador desenvolvido, baseado no método inverso, foi acoplado com sucesso aos dois “solvers” criados para as soluções numéricas da equação de difusão. A boa performance deste otimizador pode ser constatada através dos resultados analíticos e numéricos obtidos para os modelos 1 e 2. A possível dificuldade de uso deste segundo otimizador seria aquela referente ao fato de ser necessário fazer estimativas iniciais para os parâmetros a serem determinados. Neste ponto, deve ser enfatizada a importância do otimizador analítico desenvolvido: mesmo que as soluções analíticas pressuponham volume e difusividade constantes, os resultados obtidos para a

difusividade efetiva e o coeficiente de transferência convectiva de massa podem ser usados como valores iniciais em simulações numéricas de modelos fisicamente mais consistentes.

Deve-se salientar que, embora neste trabalho a aplicação das ferramentas desenvolvidas tenha sido feita para a secagem de bananas, tais metodologias podem ser usadas para outros sólidos com forma cilíndrica como, por exemplo, arroz e trigo. Ademais, além da secagem, as ferramentas também podem ser aplicadas na descrição da cinética de re-hidratação de produtos anteriormente secos.

Um outro aspecto quanto a outras utilidades das metodologias desenvolvidas é que, com pequenas modificações, a modelagem numérica apresentada neste trabalho pode ser aproveitada para ser utilizada na simulação do transporte de água em sólidos com a forma de cilindros ocos (“hollow cylinder”) como, por exemplo, em macarrão.

Como um comentário final nesta seção, deve-se observar que as ferramentas desenvolvidas também podem ser usadas para o estudo da condução de calor em sólidos que podem ser considerados cilindros infinitos, inclusive para a determinação da difusividade térmica aparente. Naturalmente, o único cuidado a ser observado é quanto à nomenclatura empregada no desenvolvimento do software, voltada para a simulação do transporte de água.

4.12 – Comentários sobre as simulações realizadas

Os resultados obtidos através dos modelos 2 (difusividade e volume constantes, com condição de contorno convectiva), tanto obtidos analítica como numericamente, são enganosamente bons, melhores até que os resultados do modelo 3 (difusividade constante e volume variável, com condição de contorno convectiva). A explicação para o aparente paradoxo parece que pode ser dada pela superposição de erros que devem se cancelar, e que foram introduzidos no modelo 2: a) não consideração da variação do volume; b) não consideração da variação da difusividade com a razão de umidade. Naturalmente, se a retração volumétrica for considerada, há que se considerar também o efeito desta retração sobre a difusividade, o que não foi observado no modelo 3.

Quando os dois efeitos mencionados no parágrafo anterior são considerados, o que resultou no modelo 4, pode-se perceber a absoluta superioridade de tal modelo com relação a todos os outros e, por isto, os resultados de tal modelo foram amplamente explorados neste trabalho.

Com relação à subdivisão do intervalo de tempo em 2000 passos, vale salientar que uma simulação não apresentada neste texto, com 4000 passos, apontou para resultados equivalentes aos anteriores, com 2000 passos, quando foi considerada uma tolerância de 1×10^{-4} para a razão de umidade.

4.13 – Comparação com os resultados obtidos por Queiroz e Nebra (2001)

Queiroz e Nebra (2001), ao determinarem os parâmetros ótimos para as cinéticas de secagem de bananas, obtiveram os resultados dados através da Tab. 4.24, referentes ao modelo 3 definido neste trabalho (modelo 4 dos referidos pesquisadores).

Tabela 4.24 – Parâmetros ótimos para três condições de secagem: dados disponíveis na literatura.

T (°C)	D_{ef} (m^2s^{-1})	h (ms^{-1})
29,9	$1,48 \times 10^{-10}$	$3,19 \times 10^{-7}$
49,9	$3,31 \times 10^{-10}$	$6,94 \times 10^{-7}$
68,4	$5,90 \times 10^{-10}$	$4,99 \times 10^{-7}$

Fonte: Queiroz e Nebra (2001)

Uma comparação entre os resultados obtidos por Queiroz e Nebra (2001) e os resultados obtidos neste trabalho para o modelo 3, dados na Tab. 4.8, indica que tais resultados são compatíveis. Naturalmente, a diferença de valores para um mesmo parâmetro é explicada por diferenças na metodologia para o processo de otimização e, principalmente, devido às diferentes tolerâncias que devem ter sido impostas na determinação de tais parâmetros. Mas para que seja observado que os resultados realmente são equivalentes, o “solver” desenvolvido no presente trabalho para a solução numérica com condição de contorno convectiva foi usado para simular as cinéticas de

secagem, usando os parâmetros de processo obtidos por Queiroz e Nebra (2001). Os resultados obtidos são apresentados através da Fig. 4.18, dada a seguir.

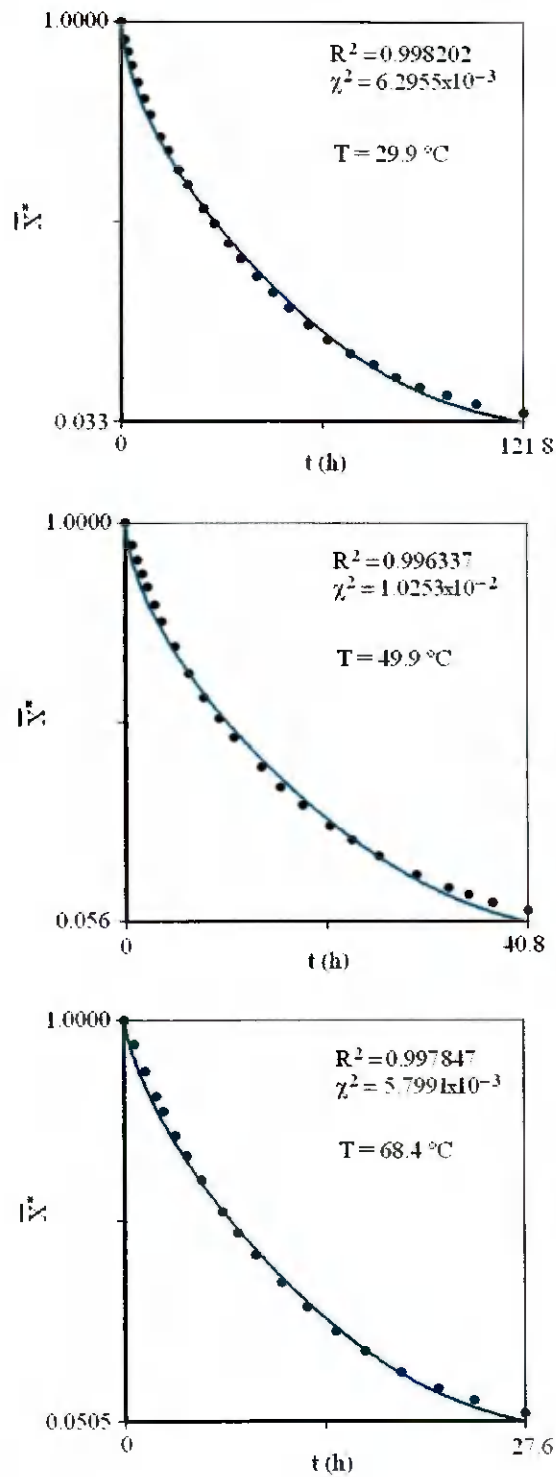


Figura 4.18 – Simulações usando o “Infinite Cylinder” com os parâmetros obtidos por Queiroz e Nebra (2001).

Uma inspeção da Fig. 4.18 possibilita concluir que, em termos práticos, os resultados obtidos por Queiroz e Nebra (2001) são equivalentes aos resultados obtidos no presente trabalho para o modelo 3, inclusive os indicadores estatísticos dos ajustes (ver Fig. 4.3). Uma conclusão adicional pode ainda ser mencionada, baseada nestas últimas simulações: o “solver” desenvolvido neste trabalho para a solução numérica da equação de difusão, que pode ser considerado correto por apresentar resultados equivalentes aos das soluções analíticas, também apresentadas neste trabalho, foi validado por uma ferramenta desenvolvida externamente ao âmbito desta pesquisa. Isto, obviamente, é uma garantia a mais sobre a confiabilidade no produto desenvolvido.

Apenas como uma informação adicional, o ajuste da Eq. (4.4) aos três pares de dados (T , D_{ef}) obtidos por Queiroz e Nebra (2001), e apresentados na Tab. 4.24, resulta em uma energia de ativação $E_a = 30,0 \text{ kJmol}^{-1}$. Obviamente, este é um resultado coerente com aquele obtido para o modelo 3 através das ferramentas desenvolvidas no presente trabalho ($E_a = 36,0 \text{ kJmol}^{-1}$).

Os ajustes da Eq. (4.4) realizados com os resultados obtidos com o modelo 3 são mostrados através da Fig. 4.19, dada a seguir.

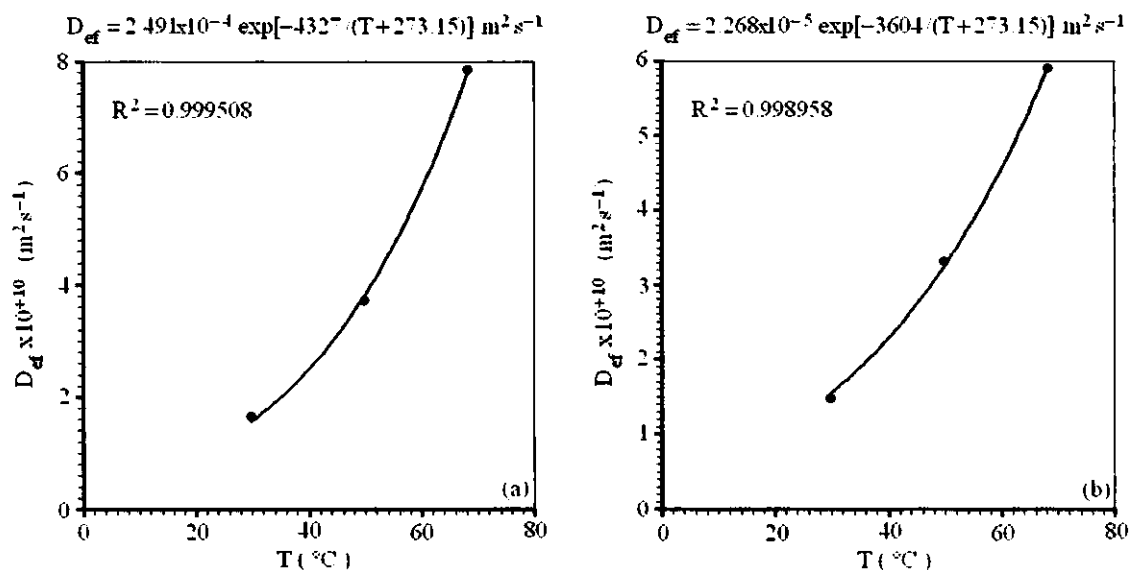


Figura 4.19 – Equação de Arrhenius ajustada aos resultados obtidos com o modelo 3:
(a) obtidos neste trabalho; (b) obtidos por Queiroz e Nebra (2001).

Vale salientar que os valores obtidos para a energia de ativação a partir dos resultados de Queiroz e Nebra (2001) e com os resultados deste trabalho para o modelo 3 são compatíveis com aqueles obtidos por outros pesquisadores (BAINI e LANGRISH, 2007; THUWAPANICHAYANAN et al., 2008).

CAPÍTULO 5 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Neste capítulo serão apresentadas as principais conclusões obtidas a partir desta pesquisa; e também serão sugeridos alguns temas para trabalhos futuros.

5.1 – Conclusões

De acordo com os resultados obtidos é possível concluir que:

- Os otimizadores desenvolvidos para as soluções analíticas com condições de contorno de equilíbrio e convectiva funcionam de forma adequada, e não requerem a informação de valores iniciais por parte do usuário para a determinação da difusividade efetiva, o que é uma vantagem em relação a outros otimizadores que exigem a definição de uma faixa de valores de D_{ef} para a minimização;
- O uso dos 200 primeiros termos da série infinita para representar a solução da equação de difusão com condição de contorno de equilíbrio possibilita afirmar que o maior erro de truncamento ocorre em $t = 0$, e é igual a 0,01%. Mesmo assim, foi possível perceber que tal condição de contorno não é adequada para descrever a cinética de secagem de bananas;

- Os valores encontrados para D_{ef} e h através da solução analítica com condição de contorno convectiva pressupõem hipóteses restritivas, impondo ao volume e à difusividade efetiva valores constantes. Mas mesmo nos casos em que esta imposição não é aceitável, os valores obtidos para D_{ef} e h são úteis porque podem ser utilizados como valores iniciais em processos de otimização de transporte de água usando soluções numéricas que levem em consideração volume e difusividade efetiva variáveis;
- O otimizador desenvolvido com base no método inverso e acoplado às soluções numéricas da equação de difusão, com condições de contorno de equilíbrio e convectiva, funcionou de forma adequada na determinação da difusividade efetiva variável e do coeficiente de transferência convectiva de massa;
- A principal vantagem de soluções numéricas sobre soluções analíticas da equação de difusão é que as primeiras possibilitam admitir volume e difusividade efetiva variáveis, de forma geral;
- A secagem de bananas ocorreu exclusivamente em taxas decrescentes e, conforme esperado, quanto maior a temperatura do ar de secagem, menor o tempo relativo ao processo, nas condições estudadas;
- Uma comparação entre os indicadores estatísticos do modelo 2 (condição de contorno do terceiro tipo; com volume e difusividade efetiva constantes) e do modelo 3 (condição de contorno do terceiro tipo; com difusividade efetiva constante e volume variável) apresenta uma aparente inconsistência: a descrição da cinética de secagem através do modelo 2 é melhor que a do modelo 3. Para explicar esta incoerência foi suposto que o modelo 2 contivesse dois erros que parcialmente se cancelam: volume e difusividade constantes. Assim, a correção de um único erro (variação de volume) poderia piorar os resultados, ao invés de melhorá-los;
- A consideração da condição de contorno do terceiro tipo com volume e difusividade efetiva variáveis (modelo 4) resultou em um modelo fisicamente

consistente para a simulação numérica da cinética de secagem de bananas. Os indicadores estatísticos dos ajustes realizados são muito superiores aos de todos os outros modelos estudados. Assim, pôde-se concluir que a difusividade efetiva aumenta não só com a temperatura do ar de secagem, mas também com a razão de umidade local;

- Para o modelo 4, a menor difusividade ocorre em $T = 29,9 \text{ }^\circ\text{C}$ com $X^* = 0$ e vale $1,10 \times 10^{-10} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$. Por outro lado, a maior difusividade referente a este modelo ocorre para $T = 68,4 \text{ }^\circ\text{C}$ com $X^* = 1$ e vale $70,29 \times 10^{-10} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$.
- Para o modelo 4, o ajuste da equação de Arrhenius aos dados obtidos resultou em uma energia de ativação igual a $52,26 \text{ kJmol}^{-1}$;
- Embora as metodologias analíticas e numéricas tenham sido aplicadas na descrição da cinética de secagem de bananas, elas poderiam ser aplicadas na descrição da cinética de secagem de qualquer sólido cuja geometria possa ser aproximada à geometria de um cilindro infinito;
- Embora as metodologias desenvolvidas tenham sido aplicadas em um problema de secagem, elas também poderiam ser aplicadas em problemas de absorção de água;
- Apesar de toda a sintaxe do software desenvolvido ser referente à difusão de água, as metodologias desenvolvidas também podem ser usadas no estudo de condução de calor.

5.2 – Sugestões para trabalhos futuros

Este trabalho tem como proposta básica o desenvolvimento de metodologias para resolver problemas de difusão em sólidos cuja forma possa ser aproximada para a geometria de um cilindro infinito. Neste sentido, as metodologias desenvolvidas são restritivas, e podem ser bem mais gerais se forem observadas as seguintes sugestões:

- Desenvolver um otimizador mais rápido que o de varredura para as soluções analíticas; de forma que tal otimizador possa ser acoplado às soluções analíticas para o cilindro finito, cuja solução é computacionalmente muito mais demorada que a solução para o cilindro infinito;
- Utilizar o método dos volumes finitos para propor uma solução numérica para o estudo da difusão de água em sólidos na forma de um cilindro finito;
- Estudar, simultaneamente ao estudo da difusão de água, a cinética da transferência de calor ao sólido, incluindo o acoplamento entre os dois fenômenos: difusão de água e condução de calor;
- Para viabilizar a sugestão anterior, um estudo visando à determinação de expressões para o calor latente de vaporização de água no produto em função do teor de umidade e da temperatura do ar de secagem deve ser realizado;
- 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, o que deve requerer o uso de malhas não uniformes na análise numérica do problema.

CAPÍTULO 6 – REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AHO, A. V.; SETHI, R.; ULMAN, J. D. **Compilers: principles, techniques, and tools.** New York: Addison-Wesley Publishing Company, p. 203-208, 1987.

AKPINAR, E. K.; BICER, Y. Mathematical modeling and experimental study on thin layer drying of strawberry. **International Journal of Food Engineering**, v. 2, n. 1, art. 5, 2006.

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.

ARASZKIEWICZ, M.; KOZIOL, A.; OSKWAREK, A.; LUPINSKI, M. Microwave drying of porous materials. **Drying Technology**, v. 22, n. 10, p. 2331-2341, 2004.

AZZOUZ, S.; GUIZANI, A.; JOMAA, W.; BELGHITH, A. Moisture diffusivity and drying kinetic equation of convective drying of grapes. **Journal of Food Engineering**, v. 55, n. 4, p. 323-330, 2002.

BAINI, R. R.; LANGRISH, T. A. G. Choosing an appropriate drying model for intermittent and continuous drying of bananas. **Journal of Food Engineering**, v. 79, n. 1, p. 330-343, 2007.

BELLO, M.; TOLABA, M. P.; SUAREZ, C. Factors affecting water uptake of rice grain during soaking. **Lebensmittel-Wissenschaft und-Technologie**, v. 37, n. 8, p. 811-816, 2004.

BELLO, M.; TOLABA, M. P.; SUAREZ, C. Hydration kinetics of rice kernels under Vacuum and Pressure. **International Journal of Food Engineering**, v. 4, n. 4, art. 3, 2008.

BEVINGTON P. R.; ROBINSON, D. K. **Data reduction and error analysis for the physical sciences**. Boston: WCB/McGraw-Hill, Second Edition, 1992, 328 p.

BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. **Transport phenomena**. 2nd Ed. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2001, 912 p.

BORTOLI, A. L. **Introdução à dinâmica dos fluidos computacional**. Porto Alegre: Ed. Universidade/UFRS, 2000, 134 p.

BROOKER, D. B.; BAKKER-ARKEMA, F. W.; HALL, C. W. **Drying and storage of grains and oilseeds**. Westport: The AVI Publishing Company, 1992, 450 p.

CARBONERA, L.; CARCIOFI, B. M.; HUBER, E.; LAURINDO, J. B. Determinação experimental da difusividade térmica de uma massa de tomate comercial. **Brazilian Journal of Food Technology**, v. 6, n.2, p. 285-290, 2003.

CARMO, J. E. F. **Fenômeno de difusão transiente em sólidos esféricos e oblatos. Estudo de caso: secagem de lentilhas**. 2004. 139 p. (Tese Doutorado). Doutorado em Engenharia de Processos, Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de 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.

CAVALCANTI, W. S.; CARVALHO, L. H.; LIMA, A. G. B. Difusão de água em compósitos poliéster insaturado reforçados por tecido híbrido de juta-vidro: modelagem e simulação. **Revista Matéria**, v. 10, n. 1, p. 14-23, 2005.

COCHRANE, C.; GAN, Q.; WALKER, G.; ALLEN, S. J. Preparation of composite PCL-Chitosan porous scaffolds by freeze-drying for tissue engineering applications. In: Bioengineering Ireland Conference, 2006, Galway. **Proceedings...** Galway: School of Chemistry, 2006.

CORRÊA, P. C.; RESENDE, O.; MARTINAZZO, A. P.; ANDRÉ L. D. GONELI, A. L. D.; BOTELHO, F. M. Modelagem matemática para a descrição do processo de secagem do feijão (*phaseolus vulgaris* L.) em camadas delgadas. **Engenbaria Agrícola**, Jaboticabal, v. 27, n. 2, p. 501-510, 2007.

COUSSOT P. Scaling approach of the convective drying of a porous medium. **The European Physical Journal B**, v. 15, n. 1, p. 557-566, 2000.

CRANK, J. **The mathematics of diffusion**, Clarendon Press, Oxford, UK, 1992, 414 p.

CUNNINGHAM, S. E.; MCMINN, W.A.M.; MAGEE, T. R. A.; RICHARDSON, P. S. Modelling water absorption of pasta during soaking. **Journal of Food Engineering**, v. 82, n. 4, p. 600-607, 2007.

DEMIREL, D.; TURHAN, M. Air-drying behavior of Dwarf Cavendish and Gros Michel banana slices. **Journal of Food Engineering**, v. 59, n.1 , p. 1-11, 2003.

DOYMAZ, I.; PALA, M. The thin-layer drying characteristics of corn. **Jouoal of Food Engineering**, v. 60, n. 2, p. 125-130, 2003.

DOYMAZ, I. Drying kinetics of white mulberry. **Journal of Food Engineering**, v. 61, n.3, pp. 341-346, 2004.

DOYMAZ, I. Drying behaviour of green beans. **Jornnal of Food Engineering**, v. 69, n. 1, p. 161-165, 2005.

DYADKIN, L. J. Multibox Parsers: No more hand-written lexical analyzers, **IEEE Computer Society**, v. 12, n. 5, p. 61-67, 1995.

FENG, H.; TANG, J.; CAVALIERE, R. P.; PLUMB, O. A. Heat and mass transport in microwave drying of porous materials in a spouted bed. **American Institute of Chemical Engineers Journal**, v. 47, n. 7, p. 1499-1512, 2004.

FERREIRA, F. C.; SILVEIRA JÚNIOR, V. Secagem a vácuo a diferentes pressões: avaliações físicas e sensoriais de manjeriço. **Revista Brasileira de Produtos Agroindustriais**, v. 1, n. 1, p. 59-65, 1999.

FIOREZE, R. **Princípios de secagem de produtos biológicos**. Editora Universitária da UFPB, João Pessoa, PB, 2004, 229 p.

FISCHER, C. N.; LEBLANC JR., R. J. **Crafting a compiler with C**. Redwood City: The Benjamin/Cummings Publishing Company, p. 382-387, 1991.

GASTÓN, A. L.; ABALONE, R. M.; GINER, S. A. Wheat drying kinetics. Diffusivities for sphere and ellipsoid by finite elements. **Journal of Food Engineering**, v. 52, n. 1, p. 313-322, 2002.

GASTÓN, A. L.; ABALONE, R. M.; GINER, S. A.; BRUCE, D. M.. Geometry effect on water diffusivity estimation in printa-isla verde and broom wheat cultivars. **Latin American Applied Research**, v. 33, n. 1, p. 327-331, 2003.

GHOSAL, S.; EMAMI-NAEINI, A. A physical model for drying of gelcast ceramics. **Journal of the American Ceramic Society**, v. 82, n. 3, p. 513-520, 1999.

HACIHAFIZOGLU, 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, p. 787-793, 2008.

HAMDAMI, N.; MONTEAU, J. Y., LE BAILL, A..Transport properties of a high porosity model food at above and sub-freezing temperatures. Part 2: Evaluation of the effective moisture diffusivity from drying data. **Drying Technology**, v. 62, p. 385–392, 2004.

HASSINI, L.; AZZOUZ, S.; BELGHITH, A. Estimation of the moisture diffusion coefficient of potato during hot-air drying. 14th International Drying Symposium, São Paulo. **Proceedings...** São Paulo: UNICAMPI, v. B, p. 1488-1495, 2004.

HENRIQUES, P. R.; PEREIRA, M. J. V.; MERNIK, M.; GRAY, J.; WU, H. Automatic generation of language-based tool. **Electronic Notes in Theoretical Computer Science**, v. 65, n. 3, p. 1-20, 2002.

HENRIQUES, P. R.; PEREIRA, M. J. V.; MERNIK, M.; LENIC, M.; GRAY, J.; WU, H. Automatic generation of language-based tool using the LISA system. **IEE Proceedings - Software**, v. 152, n. 2, p. 54-69, 2005.

IGUAZ, A.; SAN MARTÍN, M. B.; MATÉ, J. I.; FERNÁNDEZ, T.; VÍRSEDA, P. Modelling effective moisture diffusivity of rough rice (*Lido cultivar*) at low drying temperatures. **Journal of Food Engineering**, v. 59, n. 2-3, p. 253-258, 2003.

INAZU, T.; IWASAKI, K. Mathematical evaluation of effective moisture diffusivity in fresh Japanese noodles (udon) by regular regime theory. **Journal of Food Science**, v. 65, n. 3, p. 440-444, 2000.

ITAYA, Y.; UCHIYAMA, S.; HATANO, S.; MORI, S. Drying enhancement of clay by microwave heating. 14th International Drying Symposium, In: IDS 2004. São Paulo, Brasil. **Proceedings...** São Paulo: UNICAMP, 2004, v. A, p. 193-200.

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.

KATEKAWA, M. E. **Análise teórico-experimental do encolhimento: estudo da secagem de banana**. 2006. 151 p. (Tese Doutorado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, Brasil.

KEYY, R. B. **Drying of loose and particulate materials**. New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1992, 504 p.

KIRANOUDIS, C. T.; MAROULIS, Z. B.; MARINOS-KOURIS, D. Heat and mass transfer model building in drying with multiresponse data. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 38, n. 3, p. 463-480, 1995.

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 esféricos prolatos. Estudo de caso: secagem de banana**. 1999. 244 p. (Tese Doutorado). Doutorado em Engenharia Mecânica, Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, Brasil.

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. 1, p. 667-680, 2004.

LUIKOV, A. V. **Analytical heat diffusion theory**, Academic Press, Inc. Ltd, London 1968, 685 p.

MALISKA, C. R. **Transcal V 1.1 (1998)**, software livre disponível em <<http://www.sinmec.ufsc.br/sinmec/software/transcal.html>> acesso em 25/05/2006

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. Rio de Janeiro: LTC Editora S. A., 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.

MARINOS-KOURIS, D.; MAROULIS, B. Transport properties in the drying of solids. **Handbook of Industrial Drying**. New York: Marcel Dekker Inc., v. 1, p. 113-159, 1995.

MASCARENHAS, W. J.; AKAY, H. U.; PIKAL, M. J. A computacional model for finite element analysis of the freeze-drying process. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 148, n. 1, p. 105-125, 1997.

MCATEE, J. L. J.; PRESLEY, T. S.; LEMONS, K. Electron microscopy of smectites prepared by low temperature freeze-drying. **American Mineralogist**, v. 67, n. 1, p. 848-852, 1982.

MIDGLEY, S. Department of Physics, University of Western Australia, **Fortran Parser**, 2004, acesso em novembro de 2008, online, disponível na internet em <<http://stu.ods.org/fortran/>>.

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

MOINÁR, K. Experimental techniques in drying. **Handbook of Industrial Drying**. New York: Marcel Dekker Inc., v. 1, p. 41-69, 1995.

MUJUMDAR, A. S. **Handbook of industrial drying**. New York, Marcel Dekker, 1995.

NASCIMENTO, J. J. S. **Fenômenos de difusão transiente em sólidos paralelepípedos. Estudo de caso: secagem de materiais cerâmicos**. 2002. 181 p. (Tese Doutorado em Engenharia Mecânica). Doutorado em Engenharia Mecânica, Centro de Tecnologia, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, PB, Brasil.

NOGUEIRA, R. I., PARK, K. J. Drying parameters to obtain “banana-passa”. In: Drying '92, Part A, p. 874-883, 1992.

OKOS, M. R.; NARSIMHAN, G.; SINGH, R. K.; WITNAUER, A. C. Food dehydration. In D. R. Heldman e D. B. Land (Eds), **Handbook of Food Engineering**. New York, Marcel Dekker, 1992.

OZDEMIR, M.; DEVRES, Y. O. The thin layer drying characteristics of hazelnuts during roasting. **Journal of Food Engineering**, v. 42, n. 4, p. 225-233, 1999.

PARK, K. J.; VOHNIKOVA, Z.; BROD, F. P. R. Evaluation of drying parameters and desorption isotherms of garden mint leaves (*Mentha Crispa L.*). **Journal of Food Engineering**, v. 51, n. 3, p. 193-199, 2002.

PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow**, New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1980, 193 p.

PEARCE, F. Going bananas, **New Scientist** 177 (2378), p. 1-27, 2003.

PIERITZ, R. A.; MENDES, R.; FERRAZ R.; MALISKA, C. R. CFD Studio: an educational software for CFD analysis. **Engenharia Térmica**, v. 2, n. 4, p. 9-16, 2003.

PIROZZI, D. C. Z.; AMENDOLA, M. Modelagem matemática e simulação numérica do resfriamento rápido de morango com ar forçado. **Engenharia Agrícola de Jaboticahal**, v. 25, n. 1, p. 222-230, 2005.

POONNOY, P.; TANSAKUL, A.; CHINNAN, M. Estimation of moisture ratio of a mushroom undergoing microwave-vacuum drying using artificial neural network and regression models. **Chemical Product and Process Modeling**, v. 2, n. 3, art. 25, 2007.

PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. **Numerical recipes in Fortran 77. The art of scientific computing**. New York: Cambridge University Press, v. 1, 1996, 933p.

QUEIROZ, M. R. **Estudo teórico-experimental da cinética de secagem de bananas**. 1994. 176 p. (Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica). Faculdade de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, SP, Brasil,.

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.

ROBERTS, J. S.; TONG, C. H. Drying kinetics of hygroscopic porous materials under isothermal conditions and the use of a first-order reaction kinetic model for predicting drying. **Journal of Food Properties**, v. 6, n. 3, p. 355-367, 2003.

RUIZ-LÓPEZ, I. I; GARCÍA-ALVARADO, M. A. Analytical solution for food-drying kinetics considering shrinkage and variable diffusivity. **Journal of Food Engineering**, v. 79 p. 208-216, 2007.

SALINAS, C.; ANANIAS, R. A.; ALVEAR, M. Simulación del secado convencional de la madera: wood drying simulation. **Maderas. Ciencia y Tecnología**, v. 6, n. 1, p. 3-18, 2004.

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.

SCHILDT, H. **C completo e total**. Rio de Janeiro: Makron Books, 3rd edition, 1997, 856 p.

SCHMEHL, R. **Function Parser**, 2005, online, disponível na Internet em <http://sourceforge.net/projects/fparser>, acesso em 28/11/2008.

SCHWARTZ, M. O. E.; TOMÉ, J. A. T. R.; LIRA, B. B.; HIPÓLITO, F. Avaliação da adição de vermiculita na secagem de massa cerâmica através da curva de Bigot. **Cerâmica Industrial**. v. 10, n. 1, p. 28-30, 2005.

SHARMA, G. P.; VERMA, R. C.; PATHARE, P. B. Thin-layer infrared radiation drying of onion slices. **Journal of Food Engineering**, v. 67, n. 3, p. 361-366, 2005.

SILVA, W. P. e SILVA, C. M. D. P. S., **Tratamento de Dados Experimentais**. João Pessoa: UFPB/Editora Universitária, 2ª Edição, 1998, 197 p.

SILVA, S. O.; ALVES, E. J.; NETO, T. M. A.; LICHTENBERG, L. A.; FERREIRA, F. R. Avaliação de clones de bananeira do subgrupo cavendish (*musa acuminata*, aaa) em Cruz das Almas-BA. **Ciências e Agrotecnologia**, Lavras, v. 28, n. 6, p. 1247-1258, 2004a.

SILVA, S. O.; PIRES, E. T.; PESTANA, R. K. N.; ALVES, J. S.; SILVEIRA, D. C. Avaliação de clones de banana cavendish. **Ciências e Agrotecnologia**, Lavras, v. 30, n. 5, p. 832-837, 2006.

SILVA, W. P. ; SILVA, C. M. D. P. S. ; CAVALCANTI, C. G. B. ; SILVA, D. P. S. ; SOARES, I. B. ; OLIVEIRA, J. A. S. O. ; SILVA, C. D. P. S. “LAB Fit Ajuste de Curvas”: um software em português para tratamento de dados experimentais. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 26, n. 4, p. 419-429, 2004b.

SILVA, W. P.; SILVA, C. M. D. P. S.; SOARES, I. B.; NASCIMENTO, J. L.; SILVA, C. D. P. S. Um avaliador de expressões em Fortran. **Science & Engineering Journal**, v. 14, n. 1, p. 95-99, 2005a.

SILVA, W. P.; SILVA, C. M. D. P. S.; SILVA, D. D. P. S.; SILVA, C. D. P. S. Um programa para recuperação de pontos em gráficos 2D. **Science & Engineering Journal**, v. 14, n. 1, p. 101-105, 2005b.

SILVA, W. P.; CAVALCANTI MATA, M. E. R. M.; PRECKER, J. W.; SILVA, C. M. D. P. S.; SILVA, C. D. P. S.; SILVA, D. D. P. S.; LIMA, A. G. B. Uma equação empírica para determinação de teor de água de equilíbrio para grãos. **Revista Brasileira de Produtos Agroindustriais**, Campina Grande, v.7, n.1, p.71-82, 2005c.

SILVA, W. P. **Transporte difusivo em sólidos com forma arbitrária usando coordenadas generalizadas**. 2007. 263 p. (Tese Doutorado). 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**. Proceedings of 8º Congresso Iberoamericano de Engenharia Mecânica, Cusco, Peru, 2007.

SILVA, W. P.; SILVA, C. M. D. P. S.; SILVA, D. 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, art. 6, 2008a.

SILVA, W. P.; MATA, M. E. R. M. C.; 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 no comportamento da secagem. **Eugenharía Agrícola**, v. 28, n. 2, p. 325-333, 2008b.

SIMAL, S.; GARAU, C.; FEMENIA, A.; ROSSELL, C. Drying of red pepper (*Capsicum Annuum*): water desorption and quality. **International Journal of Food Engineering**, v. 1, n. 4, art. 1, 2005.

SINGH, B.; PANESAR, S. P.; NANDA, V. Rehydration kinetics of un-osmosed and pre-osmosed carrot cubes. **World Journal of Dairy & Food Sciences**, v. 2, n. 1, p. 10-17, 2007.

TAYLOR, J. R.. **An introduction to error analysis**. 2.ed. Sausalito. California: University Science Books, 1997, 327 p.

TELLO-PANDURO, B.; GARCÍA-VÁZQUEZ, Y.; MEDINA-VIVANCO, M.; MENDIETA-TABOADA, O. Air drying of clams (*Anodonta trapesialis*) and tilapia (*Oreochromis niloticus*) fillet. In: Drying 2004- **Proceedings** of the 14th International Drying Symposium (IDS 2004), São Paulo, Brazil, v. C, p. 1977-1983, 2004.

THAKUR, A. K.; GUPTA, A. K. Water absorption characteristics of paddy, brown rice and husk during soaking. **Journal of Food Engineering**, v. 75, n. 2, p. 252-257, 2006.

THUWAPANICHAYANAN, R.; PRACHAYAWARAKORN, S.; SOPONRONNARIT, S. Drying characteristics and quality of banana foam mat. **Journal of Food Engineering**, v. 86, n. 4, p. 573-583, 2008.

TRUJILLO, F. J.; WIANGKAEW, C.; PHAM, Q. T. Comparison of three methods of estimating the effective diffusivity of moisture in meat from drying data. In: **International Conference Engineering and Food - ICEF9, 2004, Montpellier – França.**

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. 191-200, 2004.

ZOGZAS, N. P.; MAROULIS, Z. B. Effective Moisture diffusivity estimation from drying data-A comparison between various methods of analysis. **Drying Technology**, v. 14, n.7 p. 1543-1573, 1996.(NO CAP.4)