



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE  
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA  
DOUTORADO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS**



**TÉCNICAS ANALÍTICAS E NUMÉRICAS PARA A  
SECAGEM DE SÓLIDOS NA FORMA DE PARALELEPÍPEDO:  
UMA ABORDAGEM TRIDIMENSIONAL**

**AUTOR: *Laerson Duarte da Silva***

**ORIENTADOR: *Prof. Dr. Wilton Pereira da Silva***

**CAMPINA GRANDE - PB  
ABRIL - 2012**



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE  
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA  
DOUTORADO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS**



**TÉCNICAS ANALÍTICAS E NUMÉRICAS PARA A  
SECAGEM DE SÓLIDOS NA FORMA DE PARALELEPÍPEDO:  
UMA ABORDAGEM TRIDIMENSIONAL**

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

**AUTOR: *Laerson Duarte da Silva***

**ORIENTADOR: *Prof. Dr. Wilton Pereira da Silva***

**CAMPINA GRANDE - PB  
ABRIL - 2012**

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

S586t Silva, Laerson Duarte da.  
Técnicas analíticas e numéricas para a secagem de sólidos na forma de paralelepípedo: uma abordagem tridimensional / Laerson Duarte da Silva. - Campina Grande, 2012.  
182f.: il. col.

Tese (Doutorado em Engenharia de Processos) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia.  
Orientador: Prof. Dr. Wilton Pereira da Silva.  
Referências.

1. Soluções Analíticas e Numéricas. 2. Método Inverso . 3. Otimização. 4. Simulação. 5. Distribuição de Umidade. I. Título.

CDU 66.047.41 (043)

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA TESE DE DOUTORADO DE LAERSON DUARTE DA SILVA APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS DO CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE.

Tese de Doutorado **aprovada com distinção** em 20 de abril de 2012



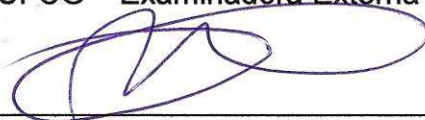
---

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



---

Profª Drª. Vera Solange de Oliveira Farias  
UAE/CES/UFCG – Examinadora Externa



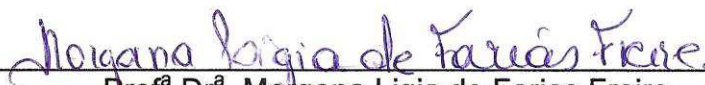
---

Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima  
UAEM/CCT/UFCG – Examinador Interno



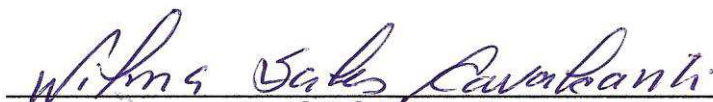
---

Prof. Dr. João Evangelista Franco do Carmo  
UAF/CCT/UFCG – Examinador Externo



---

Profª Drª. Morgana Ligia de Farias Freire  
DF/CCT/UEPB – Examinadora Externa

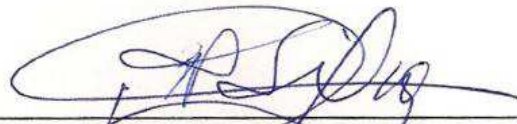


---

Profª Drª. Wilma Sales Cavalcanti  
UAEMa/CCT/UFCG – Examinadora Externa

Campina Grande, 20 de abril de 2012

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia de Processos, defendida por Laerson Duarte da Silva e aprovada pela banca em 20 de abril de 2012.



---

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

## DEDICATÓRIA

Inicialmente a Deus que me concedeu misericórdia e inteligência para concluir e ser vitorioso neste laborioso embate da vida. Aceitai meu louvor por vossa infinita clemência, de saber transformá-la em sabedoria.

Aos meus queridos e amados filhos Vângelis, Haendel e Leônidas, e a sua mãe Hianí, que muito contribuíram para minha evolução e crescimento espiritual.

Aos meus amados netinhos Heitor, Helen e Daniel, e noras pelos bons momentos de convivência.

A minha querida esposa e companheira Leonisa Carneiro pelo carinho, pela força e incentivo nos momentos de desânimo e desatino.

Aos meus queridos e amados pais Leônidas Severino da Silva e Neusa Duarte da Silva, pelo apoio incondicional para que me tornasse um vitorioso durante minha trajetória de vida.

Aos meus queridos irmãos Marconi, Marcelo, Luismar (*in memoriam*), José Linaldo, Lindimar (*in memoriam*), Lucielma e Lenilson, e sobrinhos pelos momentos valiosos que vivemos e que podemos compartilhar.

Aos meus amados avós João Duarte (*in memoriam*) e Cesarina Duarte (*in memoriam*), muitas saudades.

A toda minha família tios e tias, primos e primas, cunhados e cunhadas e família de minha esposa, que também complementam a minha existência.

A todos os meus irmãos maçons espalhados neste orbe, e em particular os da Loja Simbólica Estrela da Borborema N<sup>o</sup> 3388, um tríplice e fraternal abraço.

## AGRADECIMENTOS

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

À minha orientadora Professora Dr<sup>a</sup>. Vera Solange de Oliveira Farias, pelo valioso momento em que passou a compartilhar conosco do seu conhecimento e de sua experiência, tão necessários para a realização deste trabalho.

Aos membros da banca examinadora, professores doutores Wilton Pereira da Silva, Vera Solange de Oliveira Farias, Antônio Gilson Barbosa de Lima, João Evangelista Franco do Carmo, Morgana Ligia de Farias Freire e Wilma Sales Cavalcanti, por disponibilizarem seu precioso tempo para a avaliação deste trabalho, contribuindo significativamente para a melhoria do mesmo.

À coordenação do Programa de Pós Graduação em Engenharia de Processos, nas pessoas do Professor. Dr. Antônio Gilson Barbosa de Lima e do Professor Dr. Wilton Pereira da Silva no período de realização deste trabalho, pelo apoio e atenção.

Aos meus professores Wilton Pereira da Silva (Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional I e O Visual Fortran na solução de problemas numéricos), João Evangelista Franco do Carmo (Fenômenos de Transportes) e Mário Eduardo R. M. Cavalcanti da Mata (Secagem de Produtos Agrícolas).

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

À minha amiga Cleide Maria Diniz Pereira da Silva e Silva, sempre pronta a ajudar, principalmente pelo apoio nas utilizações dos softwares.

À minha amiga Vera Solange de Oliveira Farias e ao meu amigo Jossyl Amorim Ribeiro, sempre muito prestativos, o que me ajudou muito, principalmente no processo de secagem das placas cerâmicas de revestimento.

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

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

Aos meus colegas de doutorado, com os quais compartilhamos várias horas de estudo. Em especial a Tony, João Carlos e Pedro Luiz, com o quais cursei várias disciplinas.



## **AGRADECIMENTO ESPECIAL**

À minha co-orientadora de fato, Professora Dr<sup>a</sup>. Vera Solange de Oliveira Farias, que por não ter tido tempo hábil de ser cadastrada como professora do Programa de Pós-graduação em Engenharia de Processos, não pôde constar com segunda orientadora de direito neste trabalho de tese.

Professora, quero externar os meus mais sinceros agradecimentos por toda sua disponibilidade, dedicação, empenho, esmero e paciência, para que este trabalho fosse concluído com êxito.

Professora Vera Solange, minha gratidão por seu altruísmo.

“Toda verdade passa por três etapas:  
primeiro é ridicularizada.  
Depois, é violentamente antagonizada.  
Por último, ela é aceita universalmente  
como auto-evidente.”

*Arthur Schopenhauer*

# SUMÁRIO

<b>LISTA DE FIGURAS.....</b>	<b>xv</b>
<b>LISTA DE TABELAS.....</b>	<b>xxv</b>
<b>NOMENCLATURA.....</b>	<b>xxviii</b>
<b>RESUMO.....</b>	<b>xxxii</b>
<b>ABSTRACT.....</b>	<b>xxxiii</b>
<b>CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO.....</b>	<b>1</b>
1.1 Objetivo geral.....	3
1.2 Objetivos específicos.....	3
<b>CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....</b>	<b>6</b>
2.1 Aspectos gerais da secagem.....	6
2.2 A secagem de madeira.....	7
2.3 A secagem de materiais cerâmicos.....	11
2.4 Modelos de secagem.....	13
2.5 A equação de difusão.....	16
2.6 Soluções analíticas para a equação de difusão.....	18
2.6.1 Solução unidimensional com condição de contorno do primeiro tipo.....	19
2.6.2 Solução unidimensional com condição de contorno do terceiro tipo.....	20
2.6.3 Solução bidimensional com condição de contorno do terceiro tipo.....	22
2.7 Soluções numéricas para a equação de difusão.....	23
2.8 Condições de contorno para modelos de difusão.....	26
2.9 Aspectos geométricos.....	27

2.10 Meios homogêneo e heterogêneo.....	28
2.11 Determinação de parâmetros de processo.....	29
<b>CAPÍTULO 3 - MATERIAL E MÉTODOS.....</b>	<b>30</b>
3.1 Solução analítica para o paralelepípedo.....	30
3.1.1 Solução analítica para condição de contorno de terceiro tipo.....	32
3.1.2 Erro de truncamento.....	35
3.1.3 Otimizador para condição de contorno de primeiro tipo.....	37
3.1.4 Otimizador para condição de contorno convectiva.....	38
3.2 Solução numérica para o paralelepípedo.....	39
3.2.1 Solução numérica tridimensional em coordenadas cartesianas.....	39
3.2.2 Discretização para volumes de controle internos.....	42
3.2.3 Discretização para um volume de controle externo: oeste-norte-frente.....	43
3.3 Utilização de simetria.....	46
3.4 Determinação do valor médio contínuo para uma solução analítica.....	47
3.5 Determinação do valor médio para uma solução numérica.....	48
3.6 Avaliação de $\Gamma^{\Phi}$ nas faces dos volumes de controle.....	48
3.7 Volume variável do sólido.....	50
3.8 Cálculo do desvio padrão relativo a uma simulação numérica.....	51
3.9 Determinação de parâmetros via otimização.....	53
3.10 Modelagem computacional.....	55
3.10.1 Avaliadores de expressão e a linguagem Fortran.....	57
3.10.2 Análise comparativa.....	57
3.10.3 Interface gráfica.....	58
3.10.4 Validação do <i>solver</i> desenvolvido para o paralelepípedo.....	58
3.11 Aplicação do <i>software</i> desenvolvido na secagem de sólidos.....	59
3.11.1 Secagem de madeira.....	60
3.11.1.1 Dados experimentais da cinética de secagem de madeiras extraídos da literatura.....	60
3.11.1.2 Modelos para a descrição da cinética de secagem de madeira.....	60

3.11.2 Secagem de materiais cerâmicos.....	61
3.11.2.1 Dados experimentais da cinética de secagem de materiais cerâmicos.....	61
3.11.2.2 Matéria prima.....	61
3.11.2.3 Conformação e secagem das placas de revestimento.....	63
3.11.2.3.1 Preparação e conformação da massa.....	64
3.11.2.3.2 Secagem das placas de revestimento.....	66
<b>CAPÍTULO 4 - RESULTADOS E DISCUSSÃO.....</b>	<b>70</b>
4.1 Secagem de madeira usando soluções analíticas.....	71
4.1.1 Modelo 1: unidimensional com condição de contorno do primeiro tipo.....	72
4.1.2 Modelo 2: unidimensional com condição de contorno do terceiro tipo.....	74
4.1.3 Modelo 3: bidimensional com condição de contorno do terceiro tipo.....	77
4.1.4 Modelo 4: tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo.....	79
4.1.5 Análise dos modelos utilizados.....	81
4.2 Secagem de materiais cerâmicos.....	83
4.2.1 Dados experimentais.....	83
4.2.2 Taxa constante de secagem.....	90
4.2.3 Secagem de material cerâmico usando soluções analíticas.....	91
4.2.3.1 Modelo tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo: difusividade constante.....	92
4.3 Solução numérica: interface gráfica do <i>software</i> “Parallelepiped”.....	106
4.3.1 O menu “Parallelepiped”.....	107
4.3.2 O menu “General”.....	108
4.3.3 O menu “Information” e o menu “Exit”.....	109
4.4 Solução numérica para o paralelepípedo: testes de consistência.....	110
4.5 Solução numérica para o paralelepípedo: simetria.....	121
4.6 Teste de coerência.....	125
4.7 Validação do <i>solver</i> usando solução analítica da equação de difusão.....	127
4.7.1 Soluções analíticas da equação de difusão 1D: valor médio da grandeza para uma parede infinita.....	127

4.7.2 Soluções analíticas da equação de difusão 3D: valor médio da grandeza para um paralelepípedo.....	130
4.8 Validação do solver desenvolvido via soluções numéricas: distribuição espacial em uma parede infinita.....	132
4.9 Validação do <i>solver</i> considerando dimensões e difusividade variáveis.....	133
4.10 Secagem de materiais cerâmicos usando a solução numérica proposta.....	138
4.10.1 Expressão para a difusividade efetiva de massa.....	140
4.10.2 Secagem a 50,0 °C.....	142
4.10.3 Secagem a 60,0, 70,0 e 90,0 °C.....	146
4.11 Secagem de madeira usando solução numérica.....	163
4.11.1 Expressões para a difusividade efetiva de massa para madeira.....	163
<b>CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....</b>	<b>168</b>
5.1 Conclusões.....	168
5.1.1 Soluções analíticas.....	168
5.1.2 Soluções numéricas.....	169
5.2 Sugestões para trabalhos futuros.....	172
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....</b>	<b>173</b>

## LISTA DE FIGURAS

FIGURA 3.1	Paralelepípedo destacando um plano vertical xy, na posição $z = 0$ , onde a distribuição de água foi examinada.....	31
FIGURA 3.2	Valores de $\bar{M}^*$ (0) como função de nt para Biot = 200.....	36
FIGURA 3.3	Malha tridimensional com 27 tipos distintos de volumes de controle.....	40
FIGURA 3.4	Volume de controle interno de ponto nodal P e seus vizinhos.....	42
FIGURA 3.5	Volume de controle oeste (W) - norte (N) - frente (F).....	43
FIGURA 3.6	Esquema utilizado para explorar a condição de simetria inerente ao paralelepípedo: (a) destaque para 1/8 do paralelepípedo; (b) parte destacada do paralelepípedo.....	47
FIGURA 3.7	Dois volumes de controle com coeficientes de transporte iguais a: (a) $\Gamma_P^\Phi$ e $\Gamma_E^\Phi$ ; (b) $\Gamma_{eq}^\Phi$ . Para ambas as situações, o nó P dista $d_P$ da face comum e o nó E, $d_E$ .....	49
FIGURA 3.8	Esquema para o cálculo de $\bar{\Phi}^{sim}$ por interpolação linear.....	52
FIGURA 3.9	Matéria prima: Amostra de argila oriunda de Parelhas/RN.....	62
FIGURA 3.10	Distribuição granulométrica da argila e curva cumulativa.....	63
FIGURA 3.11	Umidificação da amostra de argila.....	64
FIGURA 3.12	Massa umidificada em descanso.....	64
FIGURA 3.13	Massa pronta para ser colocada na extrusora.....	65
FIGURA 3.14	Vista lateral da extrusora usada na conformação das placas cerâmicas de revestimento.....	65
FIGURA 3.15	Amostra do corpo de prova na forma de placa cerâmica para revestimento de alvenarias, após a secagem e antes da sinterização.....	66
FIGURA 3.16	Higrômetro digital.....	67
FIGURA 3.17	Paquímetro digital.....	67
FIGURA 3.18	Balança digital utilizada nos experimentos.....	68

FIGURA 3.19	Estufa de circulação mecânica de ar.....	68
FIGURA 4.1	Modelo 1: chi-quadrado versus difusividades nas vizinhanças do ponto ótimo.....	72
FIGURA 4.2	Cinética de secagem obtida através do Modelo 1 (Unidimensional com condição de contorno de primeiro tipo).....	73
FIGURA 4.3	Evolução temporal do teor de umidade: no centro (linha superior) e nos contornos (linha inferior) para condição de contorno do primeiro tipo.....	73
FIGURA 4.4	Modelo 2: chi-quadrado versus número de Biot nas vizinhanças do ponto ótimo.....	74
FIGURA 4.5	Cinética de secagem obtida com o Modelo 2 (Unidimensional com condição de contorno de terceiro tipo).....	75
FIGURA 4.6	Evolução temporal do teor de umidade no centro (superior) e nos contornos (inferior) para condição de contorno do terceiro tipo.....	75
FIGURA 4.7	Distribuição do teor de umidade em $t = 472$ min determinada através do modelo 2 (Unidimensional com condição de contorno do terceiro tipo).....	76
FIGURA 4.8	Modelo 3: qui-quadrado versus número de Biot nas vizinhanças do ponto ótimo.....	77
FIGURA 4.9	Cinética de secagem determinada usando o Modelo 3 (Bidimensional com condição de contorno de terceiro tipo).....	78
FIGURA 4.10	Distribuição do teor de umidade em $t = 472$ min determinada pelo modelo 3 (Bidimensional com condição de contorno do terceiro tipo).....	78
FIGURA 4.11	Modelo 4: qui-quadrado versus número de Biot nas vizinhanças do ponto ótimo.....	79
FIGURA 4.12	Cinética de secagem determinada pelo Modelo 4 (Tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo).....	80
FIGURA 4.13	Distribuição do teor de umidade em $t = 472$ min determinado pelo Modelo 4 (Tridimensional com condição de contorno do terceiro	



	tipo) no plano vertical destacado na Figura 3.1.....	80
FIGURA 4.14	Gráfico 3D do teor de umidade em $t = 472$ min, no plano vertical, com $z = 0$ , determinado pelo Modelo 4.....	81
FIGURA 4.15	Dados experimentais da cinética de secagem para as temperaturas investigadas: (a) $T = 50,0$ °C, (b) $T = 60,0$ °C, (c) $T = 70,0$ °C, (d) $T = 80,0$ °C e (e) $T = 90,0$ °C.....	89
FIGURA 4.16	Dados experimentais da cinética de secagem, no período de taxa de secagem constante, para as temperaturas: (a) $T = 50,0$ °C, (b) $T = 60,0$ °C, (c) $T = 70,0$ °C, (d) $T = 80,0$ °C e (e) $T = 90,0$ °C.....	90
FIGURA 4.17	Qui-quadrado versus número de Biot nas vizinhanças do ponto ótimo, para $T = 50,0$ °C.....	92
FIGURA 4.18	Cinética de secagem para $T = 50,0$ °C (Modelo tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo).....	93
FIGURA 4.19	Qui-quadrado versus número de Biot nas vizinhanças do ponto ótimo, para $T = 60,0$ °C.....	93
FIGURA 4.20	Cinética de secagem para $T = 60,0$ °C (Modelo tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo).....	94
FIGURA 4.21	Qui-quadrado versus número de Biot nas vizinhanças do ponto ótimo, para $T = 70,0$ °C.....	95
FIGURA 4.22	Cinética de secagem para $T = 70,0$ °C (Modelo tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo).....	95
FIGURA 4.23	Qui-quadrado versus número de Biot nas vizinhanças do ponto ótimo, para $T = 90,0$ °C.....	96
FIGURA 4.24	Cinética de secagem para $T = 90,0$ °C (Modelo tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo).....	97
FIGURA 4.25	Superposição das cinéticas de secagem para as quatro temperaturas.....	98
FIGURA 4.26	Equação de Arrhenius: (a) Difusividade efetiva em função da temperatura; b) Coeficiente de transferência convectivo em	

	função da temperatura.....	99
FIGURA 4.27	Simulação da cinética de secagem para $T = 80\text{ }^{\circ}\text{C}$ com os parâmetros determinados pelas Equações (4.4) e (4.5) e os dados experimentais.....	101
FIGURA 4.28	Destaque para o plano xy, passando pelo ponto central, onde a distribuição espacial do teor de umidade será examinada.....	101
FIGURA 4.29	Distribuição espacial do teor de umidade para $T = 50,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ .....	102
FIGURA 4.30	Distribuição espacial do teor de umidade para $T = 60,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ .....	103
FIGURA 4.31	Distribuição espacial do teor de umidade para $T = 70,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ .....	103
FIGURA 4.32	Distribuição espacial do teor de umidade para $T = 80,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ .....	104
FIGURA 4.33	Distribuição espacial do teor de umidade para $T = 90,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ .....	105
FIGURA 4.34	Distribuição espacial do teor de umidade no tempo $t = 30\text{ min}$ , para as seguintes temperaturas de secagem: (a) $T = 50,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ ; (b) $T = 60,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ ; (c) $T = 70,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ ; (d) $T = 80,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ ; (d) $T = 90,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ ..	106
FIGURA 4.35	Tela principal do <i>software</i> desenvolvido.....	107
FIGURA 4.36	Detalhes do menu “Paralelepiped”.....	107
FIGURA 4.37	Informações sobre os passos de tempo da simulação.....	108
FIGURA 4.38	Detalhes do menu “General”.....	108
FIGURA 4.39	Detalhes do menu “Information”.....	109
FIGURA 4.40	O menu “Exit”.....	109
FIGURA 4.41	Geometria (sem escala) em forma de paralelepípedo envolvendo uma malha $3 \times 3 \times 3$ utilizada para testar a consistência do <i>solver</i> desenvolvido.....	110
FIGURA 4.42	Transientes de $\Phi$ para os volumes de controle listados na Tabela 4.13 oeste, sul, atrás; (b) leste, sul, atrás; (c) leste, sul, frente; (d) oeste, sul, frente.....	111
FIGURA 4.43	Superposição dos transientes de $\Phi$ para volumes de controle localizados nos vértices inferiores do paralelepípedo.....	112
FIGURA 4.44	Transientes de $\Phi$ para os volumes de controle listados na Tabela 4.15: (a) VC (1, 3, 1); (b) VC (3, 3, 1); (c) VC (3, 3, 3) e	

	(d) VC (1, 3, 3).....	113
FIGURA 4.45	Superposição dos transientes de $\Phi$ para volumes de controle localizados nos vértices superiores do paralelepípedo.....	114
FIGURA 4.46	Transientes de $\Phi$ para os volumes de controle nas fronteiras: (a) leste; (b) oeste.....	115
FIGURA 4.47	Superposição dos transientes de $\Phi$ para volumes de controle identificados no centro das faces leste e oeste do paralelepípedo...	116
FIGURA 4.48	Transientes de $\Phi$ para dois volumes de controle listados na Tabela 4.17: (a) norte; (b) sul.....	117
FIGURA 4.49	Superposição dos transientes de $\Phi$ para volumes de controle localizados no centro das faces norte e sul do paralelepípedo para a condição de contorno convectiva.....	117
FIGURA 4.50	Transientes de $\Phi$ para dois volumes de controle listados na Tabela 4.17: (a) frente; (b) atrás.....	118
FIGURA 4.51	Superposição dos transientes de $\Phi$ para volumes de controle localizados no centro das faces frente e atrás do paralelepípedo para a condição de contorno convectiva.....	119
FIGURA 4.52	Transientes de $\Phi$ para dois volumes de controle simetricamente posicionados no paralelepípedo: (a) VC (1, 3, 3); (b) VC (3, 1, 1).	120
FIGURA 4.53	Superposição dos transientes de $\Phi$ para dois volumes de controle simetricamente posicionados para a condição de contorno convectiva.....	120
FIGURA 4.54	Esquema utilizado para explorar a condição de simetria: destaque para a parte do sólido que será analisada: 1/8 do paralelepípedo (fora de escala).....	122
FIGURA 4.55	Valor médio de $\Phi$ para o paralelepípedo da Figura 4.34: (a) paralelepípedo inteiro; (b) pedaço simétrico.....	123
FIGURA 4.56	Superposição do valor médio de $\Phi$ no paralelepípedo inteiro e do pedaço simétrico.....	124
FIGURA 4.57	Paralelepípedo inteiro, pedaço simétrico (1/8) e a malha na	

	superfície de trás do pedaço simétrico, destacando os seguintes volumes de controle: 1 (sudoeste); 2 (sudeste) e 3 (nordeste).....	125
FIGURA 4.58	Evolução temporal de $\Phi$ para os volumes de controle destacados na malha da Figura 4.37: 1 (sudoeste); 2 (sudeste) e 3 (nordeste)...	126
FIGURA 4.59	Paralelepípedo (fora de escala), destacando a simulação de uma parede infinita.....	128
FIGURA 4.60	Transientes dos valores médio de $\Phi$ em uma parede infinita com condição de contorno prescrita: (a) solução analítica ; (b) solver desenvolvido.....	129
FIGURA 4.61	Superposição das soluções analítica e do <i>solver</i> desenvolvido para o valor médio de $\Phi$ numa parede infinita com condição de contorno prescrita.....	129
FIGURA 4.62	Transientes dos valores médios de $\Phi$ em um paralelepípedo com condição de contorno convectiva: (a) solução analítica e (b) programa desenvolvido.....	131
FIGURA 4.63	Superposição das soluções analítica e do programa desenvolvido para o valor médio de $\Phi$ num paralelepípedo com condição de contorno convectiva.....	131
FIGURA 4.64	Distribuição espacial de $\Phi$ numa parede infinita com condição de contorno prescrita em $t = 145,43$ s: (a) Programa 1DHT e (b) Programa desenvolvido.....	132
FIGURA 4.65	Superposição dos gráficos da Figura 4.64, da distribuição espacial em uma parede infinita, com condição de contorno prescrita em $t = 146,43$ s.....	133
FIGURA 4.66	Malha inicial para simular a parede infinita.....	135
FIGURA 4.67	Distribuição espacial de $\Phi$ em uma parede infinita para vários instantes: (a) $t = 25$ h; (b) $t = 50$ h; (c) $t = 100$ h; (d) $t = 150$ h e (e) $t = 200$ h.....	135
FIGURA 4.68	Transiente para o volume de controle oeste de uma parede infinita com dimensão e difusividade variáveis: (a) Programa 1D Heat	

	Transfer e (b) Programa desenvolvido.....	136
FIGURA 4.69	Superposição do transiente de $\Phi$ , obtido com as duas soluções para o volume de controle oeste de uma parede infinita com dimensão e difusividade variáveis.....	136
FIGURA 4.70	Valor médio de $\Phi$ obtido com os dois <i>softwares</i> : (a) Programa 1D Heat Transfer e (b) Programa desenvolvido.....	137
FIGURA 4.71	Superposição do valor médio de $\Phi$ obtido com o <i>software</i> 1D Heat Transfer e com o <i>software</i> desenvolvido.....	137
FIGURA 4.72	Gráficos do volume versus o teor de umidade para todas as temperaturas investigadas na cinética de secagem.....	139
FIGURA 4.73	Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 50,0 °C, considerando-se a difusividade efetiva de massa variável.....	142
FIGURA 4.74	Distribuição do teor de umidade no plano xy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 1) da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de 50,0 °C, nos seguintes instantes de tempo: (a) 10,0 min; (b) 30,0 min; (c) 50,0 min; (d) 100,0 min e (e) 200,0 min.....	143
FIGURA 4.75	Distribuição do teor de umidade no plano xy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 18) da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de 50,0 °C, nos seguintes instantes de tempo: (a) 10,0 min; (b) 30,0 min; (c) 50,0 min; (d) 100,0 min e (e) 200,0 min.....	144
FIGURA 4.76	Distribuição do teor de umidade no plano xy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 20) da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de 50,0 °C, nos seguintes instantes de tempo: (a) 10,0 min; (b) 30,0 min; (c) 50,0 min; (d) 100,0 min e (e) 200,0 min.....	144
FIGURA 4.77	Distribuição do teor de umidade de uma placa cerâmica num instante de tempo 30 min, para uma temperatura de secagem de 50,0 °C, nos planos xy que passam pelos pontos nodais: (a) (1, 1, 1); (b) (1, 1, 18) e (c) (1, 1, 20).....	145

FIGURA 4.78	Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 60,0 °C, considerando-se a difusividade efetiva de massa variável.....	146
FIGURA 4.79	Distribuição do teor de umidade no plano xy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 1) da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de 60,0 °C, nos seguintes instantes de tempo: (a) 10,0 min; (b) 30,0 min; (c) 50,0 min; (d) 100,0 min e (e) 200,0 min.....	147
FIGURA 4.80	Distribuição do teor de umidade de uma placa cerâmica num instante de tempo 30 min, para uma temperatura de secagem de 60,0 °C, nos planos xy que passam pelos pontos nodais: (a) (1, 1, 1); (b) (1, 1, 18) e (c) (1, 1, 20).....	148
FIGURA 4.81	Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 70,0 °C, considerando-se a difusividade efetiva de massa variável.....	148
FIGURA 4.82	Distribuição do teor de umidade no plano xy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 1) da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de 70,0 °C, nos seguintes instantes de tempo: (a) 10,0 min; (b) 30,0 min; (c) 50,0 min; (d) 100,0 min e (e) 200,0 min.....	149
FIGURA 4.83	Distribuição do teor de umidade de uma placa cerâmica num instante de tempo 30 min, para uma temperatura de secagem de 70,0 °C, nos planos xy, que passam pelos pontos nodais: (a) (1, 1, 1); (b) (1, 1, 18) e (c) (1, 1, 20).....	150
FIGURA 4.84	Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 90,0 °C, considerando-se a difusividade efetiva de massa variável.....	150
FIGURA 4.85	Distribuição do teor de umidade no plano xy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 1) da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de 90,0 °C, nos seguintes instantes de tempo: (a) 10,0 min; (b) 30,0 min; (c) 50,0 min; (d) 100,0 min e (e) 200,0 min.....	151
FIGURA 4.86	Distribuição do teor de umidade de uma placa cerâmica num instante de tempo 30 min, para uma temperatura de secagem de 90,0 °C, nos planos xy, que passam pelos pontos nodais: (a) (1, 1, 1); (b)(1, 1, 18) e (c) (1, 1, 20).....	152

FIGURA 4.87	Destaque para o plano zy, passando pelo ponto central, onde a distribuição espacial do teor de umidade será examinada.....	153
FIGURA 4.88	Distribuição do teor de umidade no plano zy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 1) da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de 50,0 °C, nos seguintes instantes de tempo: (a) 10,0 min; (b) 30,0 min; (c) 50,0 min; (d) 100,0 min e (e) 200,0 min.....	154
FIGURA 4.89	Distribuição do teor de umidade no plano zy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 1) da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de 90,0 °C nos seguintes instantes de tempo: (a) 10,0 min; (b) 30,0 min; (c) 50,0 min; (d) 100,0 min e (e) 200,0 min.....	155
FIGURA 4.90	Superposição das cinéticas de secagem para as quatro temperaturas usadas no processo de otimização.....	156
FIGURA 4.91	Difusividade efetiva de massa para as temperaturas: (a) T = 50,0 °C, (b) T = 60,0 °C, (c) T = 70,0 °C e (d) T = 90,0 °C.....	157
FIGURA 4.92	Difusividades efetivas para as quatro temperaturas em função do teor de umidade local.....	158
FIGURA 4.93	Difusividade efetiva de massa em função da temperatura T e do teor de umidade M.....	160
FIGURA 4.94	Coeficiente de transferência convectivo de massa em função da temperatura considerando difusividade variável.....	161
FIGURA 4.95	Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 80,0 °C, considerando-se a difusividade efetiva de massa variável.....	162
FIGURA 4.96	Gráficos das expressões para a difusividade efetiva versus o teor de umidade local.....	164
FIGURA 4.97	Simulações da cinética de secagem de pranchas de madeira usando as seguintes expressões para a difusividade efetiva de massa: (a) número 2; (b) número 3; (c) número 4; (d) número 5....	165
FIGURA 4.98	Distribuição do teor de umidade no plano xy que passa no ponto	

nodal (1, 1, 1) da madeira serrada, para uma temperatura de secagem de 40,0 °C, nos seguintes instantes de tempo: (a) 360,0 min; (b) 720,0 min; (c) 1260,0 min; (d) 2160,0 min..... 166

FIGURA 4.99 Distribuição do teor de umidade em uma prancha de madeira serrada no instante de tempo de 720 min, para a temperatura de secagem de 40,0 °C, nos planos xy que passam pelos pontos nodais: (a) (1, 1, 1); (b) (1, 1, 24) e (c) (1, 1, 25)..... 167



## LISTA DE TABELAS

TABELA 3.1	Algumas raízes da equação característica para vários números de Biot.....	35
TABELA 3.2	Valores médios de $M^*(0)$ como função de $nt$ para vários números de Biot.....	36
TABELA 3.3	Composição química da argila.....	62
TABELA 4.1	Dados experimentais relativos à cinética de secagem da madeira.	71
TABELA 4.2	Resultados para os parâmetros determinados pelos quatro modelos.....	81
TABELA 4.3	Resultados para $\bar{M}$ (504 min) obtido através dos quatro modelos.....	82
TABELA 4.4	Temperatura de secagem (T), teor de umidade inicial ( $M_i$ ), teor de umidade equilíbrio ( $M_{eq}$ ) e dimensões iniciais das placas cerâmicas de revestimento.....	83
TABELA 4.5	Dados da secagem das placas cerâmicas de revestimento para $T = 50,0$ °C.....	84
TABELA 4.6	Dados da secagem das placas cerâmicas de revestimento para $T = 60,0$ °C.....	85
TABELA 4.7	Dados da secagem das placas cerâmicas de revestimento para $T = 70,0$ °C.....	86
TABELA 4.8	Dados da secagem das placas cerâmicas de revestimento para $T = 80,0$ °C.....	87
TABELA 4.9	Dados da secagem das placas cerâmicas de revestimento para $T = 90,0$ °C.....	88
TABELA 4.10	Dados dos ajustes relativos às cinéticas de secagem das placas cerâmicas de revestimento, relativos ao período de taxa constante.....	91
TABELA 4.11	Resultados para os parâmetros determinados para quatro temperaturas.....	97

TABELA 4.12	Parâmetros determinados pelas Equações (4.5) e (4.6) e os erros percentuais calculados em relação aos valores ótimos da Tabela 4.11.....	100
TABELA 4.13	Identificação dos volumes de controle localizados nos vértices inferiores da geometria em forma de paralelepípedo.....	111
TABELA 4.14	Valores de $\Phi$ para os volumes de controle localizados nos vértices inferiores do paralelepípedo, para 5 instantes de tempo previamente escolhidos.....	112
TABELA 4.15	Identificação dos volumes de controle localizados nos vértices superiores da geometria em forma de paralelepípedo.....	113
TABELA 4.16	Valores dos transientes de $\Phi$ para os volumes de controle localizados nos vértices superiores do paralelepípedo, para 5 instantes de tempo previamente escolhidos.....	114
TABELA 4.17	Identificação dos volumes de controle localizados no centro de cada face do paralelepípedo.....	115
TABELA 4.18	Valores dos transientes de $\Phi$ para os volumes de controle localizados no centro das faces leste e oeste do paralelepípedo, para cinco instantes de tempo.....	116
TABELA 4.19	Valores dos transientes de $\Phi$ para os volumes de controle localizados nas faces norte e sul do paralelepípedo, para cinco instantes de tempo quaisquer.....	118
TABELA 4.20	Valores dos transientes de $\Phi$ para os volumes de controle localizados nas faces frente e atrás do paralelepípedo, para cinco valores de tempo quaisquer.....	119
TABELA 4.21	Valores dos transientes de $\Phi$ para dois volumes de controle do paralelepípedo da Figura 4.21, em cinco instantes de tempo quaisquer.....	121
TABELA 4.22	Valores médios de $\Phi$ para 6 valores de tempo quaisquer.....	124
TABELA 4.23	Valores médios de $\Phi$ para 5 valores de tempo quaisquer.....	130
TABELA 4.24	Informações sobre a simulação de uma parede infinita com	

	largura e difusividade variáveis.....	134
TABELA 4.25	Resultados para os parâmetros de transporte considerando difusividade efetiva de massa variável.....	141
TABELA 4.26	Valores para a difusividade efetiva de massa.....	158
TABELA 4.27	Estrutura dos dados para determinar uma única expressão que represente a difusividade efetiva de massa D Valores para a difusividade efetiva de massa.....	159
TABELA 4.28	Expressões propostas para a difusividade e resultados dos processos de otimização.....	164

# NOMENCLATURA

## Letras Latinas

$A_p, A_w, A_e, A_s$ - Coeficientes da equação de difusão discretizada.....	[-]
$A_f, A_b$ - Coeficientes da equação de difusão discretizada.....	[-]
$A_{1n}$ - Coeficientes da solução analítica dependentes da posição (Condição de contorno do primeiro tipo).....	[-]
$A_{3n}$ - Coeficientes da solução analítica dependentes da posição (Condição de contorno do terceiro tipo).....	[-]
$B_{1n}$ - Coeficientes da solução analítica para o teor de umidade médio (Condição de contorno do primeiro tipo).....	[-]
$B_{3n}$ - Coeficientes da solução analítica para o teor de umidade médio (Condição de contorno do terceiro tipo).....	[-]
$B$ - Termo independente de $\Phi$ na equação de difusão discretizada.....	[-]
$Bi$ - Número de Biot.....	[-]
$D$ - Coeficiente de difusão.....	$[m^2 s^{-1}]$
$D_{ef}$ - Coeficiente de difusão efetivo de massa.....	$[m^2 s^{-1}]$
$D_0$ - Fator de Arrhenius.....	$[m^2 s^{-1}]$
$E$ - Espessura das peças cerâmica.....	[m]
$h$ - Coeficiente de transferência de massa por convecção.....	$[ms^{-1}]$
$i, j, k$ - Índices para uma posição de pontos na malha.....	[-]
$k$ - Condutividade térmica.....	$[Wm^{-1}K^{-1}]$
$L_x$ - Espessura de um paralelepípedo .....	[m]
$L_y$ - Largura de um paralelepípedo.....	[m]
$L_z$ - Comprimento de um paralelepípedo.....	[m]
$m$ - Massa do corpo estudado.....	[kg]
$m_{eq}$ - Massa de equilíbrio.....	[kg]

$m_s$ - Massa seca.....	[kg]
$M$ - Teor de umidade numa dada posição de um corpo.....	[kg kg <sup>-1</sup> ]
$\bar{M}$ - Teor de umidade médio (base seca).....	[kg kg <sup>-1</sup> ]
$M_0$ - Teor de umidade inicial (base seca).....	[kg kg <sup>-1</sup> ]
$M_{eq}$ - Teor de umidade de equilíbrio (base seca).....	[kg kg <sup>-1</sup> ]
$\bar{M}(t)$ - Teor de umidade médio em um instante $t$ (base seca).....	[kg kg <sup>-1</sup> ]
$\bar{M}_i^{exp}$ - Teor de umidade médio do $i$ -ésimo ponto experimental (base seca).....	[kg kg <sup>-1</sup> ]
$\bar{M}_i^{ana}$ - Teor de umidade médio determinado pela solução analítica (base seca).....	[kg kg <sup>-1</sup> ]
$\bar{M}(x, t)$ - Teor de umidade médio em um instante $t$ na posição $x$ (base seca)...	[kg kg <sup>-1</sup> ]
$\bar{M}(x, y, t)$ - Teor de umidade médio em um instante $t$ na posição $(x,y)$ (base seca).....	[kg kg <sup>-1</sup> ]
$\bar{M}(x, y, z, t)$ - Teor de umidade médio em um instante $t$ na posição $(x,y,z)$ (base seca).....	[kg kg <sup>-1</sup> ]
$MR$ - Razão de umidade.....	[-]
$N, S, E, W, F, B, P$ - Pontos nodais.....	[-]
$\vec{r}$ - Vetor posição.....	[m]
$R$ - Constante universal dos gases ideais.....	[Jmol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]
$R^2$ - Coeficiente de determinação (adimensional).....	[-]
$\Delta S$ - Área elementar.....	[m <sup>2</sup> ]
$S$ - Termo fonte da equação de difusão.....	[-]
$S^\Phi$ - Termo fonte da equação de transporte.....	[-]
$t$ - Tempo.....	[s]
$T$ - Temperatura.....	[°C]
$\vec{v}$ - Velocidade do meio.....	[ms <sup>-1</sup> ]
$\Delta V$ - Volume elementar.....	[m <sup>3</sup> ]

$\Delta V'_{ij}$ - Volume do volume de controle.....	[ m <sup>3</sup> ]
V - Volume.....	[ m <sup>3</sup> ]
x, y, z - Coordenadas cartesianas.....	[-]

### Letras Gregas

$\alpha$ - Difusividade térmica.....	[m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\Gamma^\Phi$ - Coeficiente de transporte.....	[-]
$\Delta$ - Variação.....	[-]
$\lambda$ - Coeficiente de transporte.....	[-]
$\mu_n$ - Raízes de equação transcendental.....	[-]
$\rho$ - Densidade.....	[kg m <sup>-3</sup> ]
$1/\sigma_i$ - Peso estatístico do i-ésimo ponto experimental.....	[-]
$\Phi$ - Variável de transporte.....	[-]
$\bar{\Phi}$ - Valor médio da variável de transporte.....	[-]
$\Phi_{eq}$ - Variável de transporte de equilíbrio.....	[-]
$\Phi_i$ - Valor inicial da variável de transporte.....	[-]
$\Phi_\infty$ - Variável de transporte para um fluido ambiente.....	[-]
$\bar{\Phi}_i$ - Valor do i-ésimo ponto experimental.....	[-]
$\delta\Phi_i$ - Desvio do i-ésimo ponto experimental.....	[-]
$\Phi^{sim}$ - Valor simulado de $\Phi$ .....	[-]
$\Phi_P, \Phi_E, \Phi_W, \Phi_N, \Phi_S$ - Variáveis dependentes na equação discretizada.....	[-]
$\Phi_F, \Phi_B$ - Variáveis dependentes na equação discretizada.....	[-]
$\phi'$ - Fluxo de $\Phi$ .....	[-]
$\phi''$ - Fluxo de $\Phi$ por unidade de área.....	[-]
$\phi''_w$ - Fluxo de $\Phi$ por unidade de área no contorno oeste.....	[-]

$\chi^2$ - Qui-quadrado.....	[-]
$\nabla$ - Operador Nabla.....	[-]

### **Sobrescritos**

0 - Tempo anterior

w - Face oeste do volume de controle

P - Nó do volume de controle em estudo

n - Expoente da posição radial r

### **Subscritos**

ef - Efetiva

eq - Equilíbrio

e, w, n,s, f, b - Fronteiras de um volume de controle

i - Inicial

s - Seco

bs - Base seca

## RESUMO

Este trabalho tem como objetivo propor técnicas analíticas e numéricas para descrever o fenômeno da difusão transiente de uma grandeza em sólidos com a forma de paralelepípedo, incluindo paredes finita e infinita. Neste estudo são apresentadas algumas soluções da equação de difusão em meios onde a condição de contorno adequada é do terceiro tipo. Para atingir o objetivo delineado, foram desenvolvidas ferramentas analíticas e numéricas para o estudo de fenômenos difusivos envolvendo as três geometrias mencionadas. Para a solução numérica proposta, a equação de difusão tridimensional foi discretizada por meio do método dos volumes finitos, com uma formulação totalmente implícita, usando coordenadas cartesianas. Foi desenvolvido um *software* na plataforma *Windows*, utilizando a linguagem de programação Fortran, incluindo a interface gráfica com o usuário. O *software* gerou resultados coerentes e consistentes em todos os testes efetuados, e foi validado para meios envolvendo parâmetros termofísicos tanto constantes quanto variáveis. As ferramentas desenvolvidas foram aplicadas na descrição de dados disponíveis na literatura sobre a secagem de pranchas de madeira, e de dados experimentais originais sobre a secagem de corpos de prova usados como revestimentos cerâmicos de alvenaria. Os resultados obtidos foram discutidos e analisados. De acordo com os resultados obtidos, as técnicas propostas foram eficientes para descrever secagens de sólidos na forma de paralelepípedo, usando a teoria da difusão líquida.

**Palavras-chave:** Soluções analíticas e numéricas, Método inverso, Otimização, Simulação, Distribuição de umidade.



## ABSTRACT

This work aims to propose techniques analytical and numerical to describe a transient diffusion process in a medium parallelepiped shaped, including finite and infinite labs. This study presents some solutions of the diffusion equation in media where the boundary condition of the third kind is appropriate. Analytical and numerical tools for the study of diffusion phenomena have been developed, involving the three geometries mentioned. In order to obtain a numerical solution, the three-dimensional diffusion equation was discretized by the finite volume method with a fully implicit formulation, using Cartesian coordinates. Software was developed on the Windows platform, using the Fortran programming language, including the graphical user interface. The software has generated consistent and coherent results in all tests performed; and it was validated for both: constant and variable thermo-physical parameters. We can conclude that the tools developed are appropriate for the study of diffusive problems in general. Such tools were applied in the description of data available in the literature on the drying of lumber of wood, and in original data on drying ceramic coating. The obtained results were discussed and analyzed. According to all obtained results, the proposed techniques are efficient to describe drying of solids parallelepiped shaped, using the liquid diffusion theory.

**Keywords:** Analytical and numerical solutions, Inverse method, Optimization, Simulation, Moisture distribution.

# **CAPÍTULO 1**

## **INTRODUÇÃO**

Uma das etapas mais importantes em vários processos produtivos, nos mais diversos setores da atividade humana, é aquela referente à secagem de produtos úmidos, para as mais diferentes finalidades.

Na produção agrícola, por exemplo, a secagem é feita, tendo como objetivo principal a conservação das qualidades nutricionais do produto para armazenamento. Na indústria de alimentos tais como massas e alimentos de origem animal, o recurso da secagem é muito importante para sua conservação por longos períodos.

Dentre outras áreas, uma extremamente importante, na qual a secagem é uma das etapas fundamentais do processo produtivo, é aquela referente à fabricação de materiais cerâmicos (blocos, tijolos, telhas, revestimentos e pisos) que são amplamente utilizados na construção civil. Na fabricação desses materiais, produzidos a partir da matéria prima em forma de pó, inicialmente se acrescenta água para possibilitar a conformação das peças. Em seguida, as mesmas devem ser submetidas à secagem, o que lhes confere uma maior resistência mecânica e um teor de umidade adequado, possibilitando a sua queima para sua utilização como produto final.

A madeira também apresenta grande utilidade (construção de casas de madeira, móveis, revestimentos e pisos), proporcionando durabilidade, conforto térmico e acústico, na aplicação de projetos arquitetônicos da construção civil. A secagem da madeira tem como finalidade a redução do seu teor de umidade com o intuito de minimizar os defeitos que uma peça possa apresentar desde o seu estado natural até o seu estado final de utilização. É conveniente utilizar uma técnica de secagem que seja economicamente viável.

No Brasil, de modo geral, essa prática é pouco difundida e utilizada por aqueles que vivem do ramo madeireiro. São raras as madeireiras que dispõem de locais apropriados (pátios) para estocagem de madeira, e quando possuem são geralmente de baixa eficiência.

É muito comum o transporte de toras de madeira com alto teor de umidade para os lugares mais diversos. A simples prática da secagem da madeira ao ar livre poderia reduzir suficientemente o peso da carga de madeira transportada, o que diminuiria sensivelmente os custos com frete e mão-de-obra. Assim, a utilização da secagem contribui não só para o desenvolvimento da indústria de produtos madeireiros, como também para que estes produtos possam atingir uma melhor qualidade, capaz de competir com outros produtos do mercado internacional.

Para melhorar a secagem se faz necessário um perfeito entendimento dos processos físicos envolvidos na transferência simultânea de calor e de massa. De um modo geral, secagem é uma operação através da qual se retira água do interior de um corpo. Durante a secagem de um sólido, calor é transferido da superfície para o interior do sólido. A resistência ao calor da superfície é representada pelo coeficiente convectivo de calor, e a resistência à condução de calor para o interior do sólido, pela sua condutividade térmica.

Em secagem, dependendo das condições externas, a transferência de calor ao produto pode trazer como consequência a perda de umidade, com o movimento de água do interior do corpo para a superfície, através de mecanismos de capilaridade e difusão, e da superfície do corpo para o ar, por vaporização e convecção.

A utilização de modelos matemáticos que simulam a secagem de produtos que apresentam umidade em seu estado natural é uma das alternativas adotadas para melhorar a prática de secagem, permitindo diminuir os custos, a energia, o tempo e os defeitos de secagem. Modelos que descrevem adequadamente os processos de transferência calor e de massa servem de base para estudar processos industriais complexos, facilitar os ensaios experimentais e explicar os mecanismos físicos que estão envolvidos.

## 1.1 Objetivo geral

Este trabalho tem como objetivo geral, fazer um estudo para viabilizar a aplicação de soluções analíticas e numéricas da equação de difusão para a secagem de sólidos na forma de paralelepípedo, com condições de contorno do terceiro tipo. Tais soluções foram aplicadas na descrição da cinética de secagem, envolvendo difusão de massa no interior de sólidos na forma de paralelepípedo, incluindo o efeito de seu encolhimento. Para tal, devem ser explicitados critérios, mecanismos e procedimentos adotados visando ao cumprimento dos objetivos delineados.

## 1.2 Objetivos específicos

Como objetivos específicos podem-se citar:

- Apresentar soluções analíticas e numéricas para o problema de difusão transiente de massa, em corpos com forma de paralelepípedo, baseando-se nas lei de Fick;
- Desenvolver um *software* computacional, na plataforma *Windows*, incluindo interface gráfica com o usuário, para simular o processo de difusão de massa e determinar parâmetros termofísicos, via técnicas de otimização, a partir de dados experimentais;
- Criar um código otimizador a ser acoplado às soluções analíticas, com vistas a determinar valores para os parâmetros termofísicos inerentes aos fenômenos de difusão de massa;

- Criar um código otimizador, a ser acoplado às soluções numéricas, visando determinar parâmetros termofísicos a partir de dados experimentais da cinética de secagem;
- Aplicar os modelos analíticos ao estudo da secagem de madeira e revestimento cerâmico, a partir de dados experimentais;
- Realizar experimentos de secagem, em várias temperaturas distintas, para materiais cerâmicos na forma de placas que podem ser utilizadas como revestimento;
- Aplicar o *software* computacional desenvolvido no estudo da secagem de madeira e de materiais cerâmicos;
- Comparar os resultados da simulação numérica com os resultados experimentais, e determinar os coeficientes de transferência de massa: difusivo no interior e convectivo na superfície do produto, para várias condições de secagem;
- Estudar os efeitos das considerações adotadas nos diversos modelos, sobre os coeficientes de transporte;
- Obter correlações matemáticas para os coeficientes de difusão e de transferência convectiva de massa, como função dos parâmetros de secagem e das dimensões do sólido.
- Examinar o efeito da retração ocorrida em consequência do processo da secagem;
- Simular a distribuição do teor de umidade no interior do sólido, bem como as suas respectivas cinéticas de difusão, utilizando-se de modelos matemáticos a serem propostos.

Desse modo, pretende-se colocar à disposição de interessados, subsídios teóricos no tocante à transferência de massa nos processos de secagem de sólidos na forma de

paralelepípedo, incluindo variações dimensionais, bem como propriedades termofísicas variáveis, o que ainda é pouco discutido pela comunidade científica para os produtos estudados. Normalmente, lança-se mão de simplificações na descrição da cinética de secagem, reduzindo-se o modelo em estudo ao caso unidimensional e, não raro, os estudos referentes à secagem envolvem apenas modelos analíticos o que pressupõe, quase sempre, propriedades termofísicas constantes.

Diante da escassez de pesquisas em fenômenos tridimensionais transientes de difusão de massa, voltadas para sólidos na forma de paralelepípedo, enfocando parâmetros termofísicos variáveis, em particular na determinação de tais parâmetros através de conceitos de otimização, esse trabalho contém aspectos inovadores, fornecendo novos subsídios à comunidade científica com relação à descrição de secagem de produtos com a geometria mencionada.

## **CAPÍTULO 2**

### **REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

#### **2.1 Aspectos gerais da secagem**

A secagem é a retirada, total ou parcial de um fluido (água ou vapor) de qualquer produto, envolvendo exclusivamente a transferência de calor e de massa. Consiste em duas etapas simultâneas: a transferência de calor seja por condução, convecção ou radiação ou ainda por uma combinação desses processos, do meio ambiente para o produto. Ao mesmo tempo ocorre a evaporação da água líquida contida no produto e sua retirada na forma de vapor, por convecção natural ou forçada.

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

Lima (1999), Nascimento (2002) e Carmo (2004) observaram que, em geral, no decorrer da secagem de sólidos constituídos de material poroso, ocorre uma retração, ou seja, um encolhimento dos produtos em decorrência da difusão de água, bem como uma variação nas propriedades termofísicas do material, que podem depender da temperatura, do teor de umidade e da própria estrutura física do corpo.

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

## **2.2 A secagem da madeira**

As principais fontes de madeira do Brasil são a floresta amazônica, com cerca de 412 milhões de hectares, concentrados na região norte, e as florestas de crescimento rápido, com mais de 4,7 milhões de hectares, localizadas nas regiões sudeste e sul (JANKOWSKY e LUIZ, 2006).

Segundo os autores, devido à secagem agregar qualidade e valor aos produtos derivados da madeira, as indústrias têm se ajustado rapidamente à tecnologia de secagem para madeiras serradas, o que ocasiona uma grande procura por informações técnicas e científicas. No Brasil existem algumas universidades com pesquisadores e instalações apropriadas para a realização de estudos sobre secagem de madeira, e nas duas últimas décadas os esforços de investigação foram direcionados para aspectos aplicados, com ênfase para melhorar a secagem de madeira serrada. Por exemplo, o estudo da deformação da madeira serrada de *Eucalyptus* submetida a condições agressivas de secagem resultaram em métodos para definir o tempo de forno para esse tipo de madeira. A relação entre o teor de umidade e a resistividade elétrica foi utilizada para melhorar o controle da qualidade da madeira seca, bem como o controle automático do processo de secagem em estufa. O forno de secagem convencional é o método mais comum para a secagem industrial, mas a secagem solar também é bastante utilizada.



A indústria de produtos de madeira desempenha um papel fundamental na economia de diversos países. Segundo Dincer (1998), em alguns países como o Canadá, essa indústria utiliza cerca de 1% do total da energia consumida, mesmo sem levar em conta a indústria de papel e celulose. Por outro lado, a secagem é uma das etapas mais importantes no processamento de madeira, tendo grande influência sobre a qualidade final do produto. Em seu trabalho, Dincer (1998) apresenta uma técnica analítica para determinação da difusividade e do coeficiente de transferência de umidade de pranchas de madeira submetidas a um processo de secagem. A análise da difusão transiente de umidade foi realizada com base em dois importantes critérios para os números de Biot:  $0,1 < Bi < 100$  e  $Bi > 100$ . Os parâmetros de secagem e fatores de atraso são definidos na secagem da madeira e são incorporados ao modelo. Os resultados obtidos pelo modelo foram comparados com dados experimentais da literatura, apresentando uma boa concordância. A técnica apresentada é capaz de determinar a difusividade e o coeficiente de transferência de umidade para pranchas de madeira de uma forma simples, para aplicações práticas em secagem de madeira. Essa abordagem pode ser estendida para diferentes produtos de madeira de formas regular e irregular.

A elaboração de programas de secagem adequados é fundamental para a obtenção de madeiras secas com boa qualidade em estufa convencional. Madeiras de *Eucalyptus* são particularmente difíceis de secar e, por isso, é desejável que os programas de secagem sejam cuidadosamente desenvolvidos (BARBOSA et al., 2005). Nesse trabalho os autores elaboraram um programa de secagem para dez clones de híbridos de madeira de *Eucalyptus*, para verificar a sua susceptibilidade a defeitos pós-secagem. Para atingir esses objetivos, utilizaram a metodologia de secagem drástica a 100 °C, que consiste em associar defeitos, tempo e velocidade de secagem de pequenas amostras de madeira, ao comportamento de tábuas na secagem convencional. De acordo com os resultados obtidos, os autores desenvolveram um programa de secagem comum para os dez clones de madeira estudados. Esse programa levou em consideração uma temperatura inicial de 40 °C até uma temperatura final de 66 °C. O tempo de secagem pode ser reduzido, considerando os clones agrupados segundo suas velocidades de secagem. De forma geral, os clones apresentaram baixa susceptibilidade a rachaduras e alta susceptibilidade ao colapso.

A madeira é um material higroscópico que apresenta relações dinâmicas com a água do meio ambiente, em função do seu próprio teor de umidade, da umidade relativa e da umidade do ambiente, podendo ceder ou absorver água do meio ambiente. Em geral, há dois tipos de água na madeira: água livre ou capilar, localizada nos lumens celulares e espaços intercelulares, retidas por forças capilares, e água de impregnação ou higroscópica, que se encontra nos espaços submicroscópicos da parede celular, ligada por forças físico-químicas (MELLADO, 2007). Este autor afirma, ainda, que no processo de secagem de madeira, que consiste resumidamente na remoção da umidade de sua superfície e concomitante movimento de água do seu interior para esta superfície, há dois tipos de movimento de água. O movimento de água capilar, que ocasiona apenas perda de peso na madeira, isto ocorre quando a madeira apresenta teores de umidade acima do Ponto de Saturação das Fibras (PSF), ou seja, o ponto em que os lumens celulares da madeira estão vazios e apenas as paredes celulares possuem água. Em seguida o movimento de água de impregnação ou higroscópica, que corresponde à perda de água pelo material abaixo do Ponto de Saturação de Fibras, ocasionando, além da perda de peso, variações dimensionais no material e é considerado, geralmente, como um processo de difusão.

Dedic e Zlatanovic (2001), a partir de pesquisa experimental, compararam a secagem por microondas de madeiras de faia e de abeto. Tomaram três amostras de cada espécie de madeira, e analisaram o efeito nas dimensões de cada amostra, quando submetidas ao processo de secagem. A intensidade de liberação de umidade das amostras foi analisada e concluíram que, a velocidade de secagem pela radiação de microondas, foi 13 vezes maior do que pelo processo de convecção. Determinaram, experimentalmente, o consumo de energia elétrica para a secagem de uma pilha de dez tábuas, com  $200 \times 12 \times 2 \text{ cm}^3$ , nas mesmas condições de secagem das amostras do experimento, que foi de aproximadamente 7,6 kWh. Desse modo, concluíram que a secagem de madeira pelo processo de microondas, apresentou uma vantagem considerável em relação ao processo convencional por convecção, devido à redução do tempo de secagem e da redução do consumo de energia elétrica.

Diante do exposto, deve-se utilizar a prática de secagem da madeira por alguns motivos elencados a seguir:

a) A madeira tende a contrair-se à medida que vai secando e tende a expandir-se conforme aumenta o seu teor de umidade. Uma secagem adequada até um determinado teor de umidade final diminui a movimentação dimensional da peça evitando empenos ou rachaduras (redução na movimentação dimensional);

b) Madeira verde serve como fonte de alimento para organismos como fungos e insetos. A presença desses microrganismos na madeira pode comprometer seriamente as suas propriedades mecânicas, além de alterar significativamente sua aparência. Madeiras com baixo teor de umidade tornam-se praticamente imunes ao ataque desses organismos (redução dos riscos de ataque de fungos);

c) Uma peça de madeira com baixo teor de umidade pode ser mais facilmente tratada por produtos químicos preservativos ou retardantes de fogo, bem como aceitará mais facilmente pinturas, vernizes, ceras e outros materiais de acabamento (melhoria no tratamento da madeira);

d) Quando previamente seca, a madeira apresenta uma sensível melhora nas suas propriedades mecânicas, tais como: flexão estática, compressão, dureza e cisalhamento (aumento da resistência mecânica);

e) A madeira seca apresenta melhores resultados com respeito às operações visando aplainar, lixar e furar as peças, melhorando o seu aspecto final;

f) Madeira com alto teor de umidade não permite uma boa aderência de produtos fabricados à base de cola ou colados, como por exemplo, compensados e laminados;

g) Pregos e parafusos afixados em madeira verde tendem a afrouxar após a secagem. Com isso, juntas cravadas em madeira podem perder suficientemente a sua resistência;

h) A madeira seca é menos condutora de calor do que a verde e apresenta melhores propriedades de isolante elétrico e acústico (melhora nas propriedades de isolamento).

### **2.3 A secagem de materiais cerâmicos**

Os materiais cerâmicos são compostos basicamente por argila, e são muito utilizados na construção civil. São fabricados a partir de matérias-primas classificadas em naturais e sintéticas. Utilizando-se de um processamento adequado, suas propriedades químicas e fases cristalinas podem ser alteradas. Para a fabricação de peças cerâmicas, é fundamental observar as seguintes etapas: exploração das jazidas, tratamento prévio das matérias primas, homogeneização, secagem e queima. Na homogeneização, água é adicionada à argila para dar características de plasticidade e facilitar a moldagem das peças. A secagem é o processo responsável pela retirada dessa água, durante a fabricação de produtos cerâmicos.

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

Conforme Silva, A. et al. (2009), a secagem de uma peça cerâmica retira a água acumulada nos poros da mesma. Esse procedimento é realizado antes da queima, para evitar que a peça exploda dentro do forno. Durante o processo de secagem de um material cerâmico, a água contida no mesmo migra para a atmosfera exterior, enquanto que o calor, proveniente do ar de secagem, penetra do exterior para o interior do material, onde a temperatura é menor. Como a camada exterior do material cerâmico seca mais rápido do que o seu interior (uma vez que está em contato direto com o ar de secagem), essa camada contrai-se primeiro. Os produtos fabricados pelas indústrias cerâmicas (blocos, tijolos, telhas, tubos cerâmicos, revestimentos, louça sanitária, isoladores elétricos de porcelana, isolantes térmicos, entre outros) em geral, oferecem melhor durabilidade, conforto térmico e acústico e baixo custo, em aplicações da construção civil. São responsáveis por mais de 90% das alvenarias e coberturas

realizadas no país, os produtos cerâmicos são os únicos produtos totalmente naturais. Quando utilizados através do sistema de alvenaria estrutural, podem reduzir em até 40% o custo final de uma habitação.

Segundo Cadé et al. (2005) é fundamental conhecer os efeitos da secagem e o seu controle, uma vez que estes alteram as propriedades físicas e químicas do produto, e tais alterações afetam sensivelmente o processo de transferência de calor e massa. Após a secagem de um produto cerâmico, fatores tais como elevados gradientes de umidade e de temperatura, que causam tensões termomecânicas no seu interior, devem ser controlados, para evitar defeitos irreversíveis ao produto (trincas e fraturas). A não observância destes fatores produz deformações, ocasionando perda de qualidade ao produto final.

A indústria cerâmica apresenta processos industriais com um grande consumo de energia e elevado impacto ambiental. A grande maioria destas indústrias está desenvolvendo produtos de baixa qualidade devido a processos inadequados de secagem e queima (BATISTA et al., 2009). Estes autores apresentaram um estudo experimental da secagem de amostras de argila para cerâmica vermelha (blocos vazados e tijolos maciços), com diferentes dimensões e umidades iniciais. Utilizaram nos processos de secagem, várias temperaturas e umidades relativas do ar, e várias curvas da cinética de secagem e de retração volumétrica. Propuseram um modelo matemático para descrever a perda de água e variações dimensionais durante o processo de secagem. Concluíram que o processo de secagem ocorreu no período de taxa decrescente e o encolhimento apresentou dois períodos distintos.

Um setor dessa área de produção que tem merecido especial atenção por parte de pesquisadores é aquela referente à de revestimento cerâmico, uma vez que o controle das dimensões e formato dos revestimentos cerâmicos é fundamental para se garantir a qualidade do produto. Produtos que apresentam significativas variações dimensionais e/ou desvios da forma podem prejudicar os efeitos estéticos obtidos com as peças assentadas (MELCHIADES et al., 2001). Segundo estes autores, os parâmetros dimensionais também influenciam a seleção, estocagem e distribuição dos produtos, aumentando os custos operacionais quando se tem de trabalhar com várias bitolas. A obtenção de produtos capazes de atender os requisitos geométricos está diretamente

ligada às características do processo de fabricação e as etapas que se sucedem ao processo de fabricação. Levando em consideração que as superfícies das prensas estejam perfeitamente ajustadas e que não tenham sofrido desgastes, as peças recém-conformadas possuem o formato mais regular possível. A partir de então, as sucessivas etapas do processo de fabricação não devem alterar de maneira significativa o formato das peças para que o produto acabado continue apresentando o formato desejado. De maneira análoga, se alguma das etapas do processo de fabricação altera o formato das peças de maneira marcante, é conveniente que em alguma das etapas sucessivas ocorra à reversão da alteração de formato produzida, de tal maneira que o produto acabado continue apresentando a geometria desejada.

Após a conformação, algumas das etapas do processo podem alterar a forma das peças. A secagem, por exemplo, pode causar imprecisões no formato geradas por gradientes térmicos no secador que acarretam retrações diferenciais entre regiões de uma mesma peça. Pode causar ainda deformações geradas por retrações diferenciais entre regiões de uma mesma peça, causadas por heterogeneidades na compactação do corpo verde.

Caso o processo não seja bem conduzido, podem ocorrer deformações e consequentemente trincas, afetando a qualidade final do produto. Em muitas situações, a perda do produto é verificada imediatamente após a secagem (MAČIULAITIS e MALAIŠKIENĖ, 2009). Em outras situações, os danos causados pelo processo são observados somente após a queima MAČIULAITIS et al. (2008). Assim, a descrição detalhada do processo de secagem é importante por fornecer informações que resultam em um produto final de boa qualidade com o mínimo de desperdício.

## **2.4 Modelos de secagem**

Pode-se descrever um processo de secagem através de um modelo matemático. Vários modelos de secagem estão disponíveis na literatura e, entre estes, podem ser citados os seguintes: modelos empíricos (DINCER, 1998; JIAN-FENG et al., 2007); modelos baseados na lei de Darcy (PINHEIRO et al., 1998) e modelos de difusão. O modelo de difusão é muito usado para descrever a cinética de secagem de madeira (LIU e SIMPSON, 1996; DINCER, 1998; LIU e SIMPSON, 1999; BARONAS et al., 1999;

BARONAS et al., 2001; LIU et al., 2001; KULASIRI e WOODHEAD, 2005; RICARDEZ et al., 2005; OLEK e WERES, 2007).

Pinheiro et al. (1998) apresentaram um modelo matemático para um processo de secagem de *Eucalyptus spp.* Esse modelo tomou por base as equações de transferência de calor e de massa e foi resolvido numericamente usando o método de volumes finitos. Esses autores utilizaram um programa na linguagem FORTRAN para resolver o modelo matemático. Desenvolveram um modelo matemático bidimensional para simular um processo isotérmico para secagem de madeira. Ele foi validado através de dados experimentais obtidos a partir de testes de termo-gravimetria isotérmica de *Eucalyptus grandis*. Nesse trabalho, os autores estudaram as mudanças nas propriedades da madeira durante a secagem e também obtiveram uma correlação entre a temperatura de secagem e o coeficiente de difusão efetivo das espécies analisadas, a madeira original e as amostras de madeira submetidas ao processo de secagem. Devido à complexidade do modelo e seu conjunto de equações não lineares, a sua solução se baseou em técnicas numéricas, que se tornaram cada vez mais populares devido à alta velocidade de processamento dos computadores.

Jian-Feng et al. (2007) utilizaram dois procedimentos analíticos, os métodos matemáticos de Crank e de Dincer, para determinar os coeficientes de difusão de umidade e os coeficientes de transferência de umidade para madeira de lariço submetida à secagem. A equação de difusão foi utilizada para interpretar o processo de secagem. A madeira foi idealizada na modelagem como placas infinitas, ou seja, o processo de transporte de umidade no seu interior foi considerado unidimensional. A cinética de secagem da madeira foi determinada com base nos dados experimentais. O cálculo para os coeficientes de difusão de umidade e para os coeficientes de transferência de umidade foram determinados pelo método de Dincer. Os coeficientes de difusão de umidade também foram calculados pelo método de Crank. Em geral, os coeficientes de difusão calculados pelo método de Dincer, foram maiores do que os determinados pelo método de Crank. As diferenças observadas podem ser devido aos dois métodos analíticos apresentarem características diferentes entre os processos contínuo de difusão de umidade e o de transferência de calor. Com o aumento da temperatura de secagem, o coeficiente de difusão de umidade ( $D$ ) e o coeficiente de transferência de umidade ( $h$ ) aumentaram, proporcionalmente. As relações entre os coeficientes de difusão e a

temperatura, foram analisadas usando a Equação de Arrhenius e a teoria de transporte de água ligada.

Vários tipos de secagem são descritas na literatura para materiais cerâmicos e, dentre os quais, podem ser citados: secagem por micro-ondas (SKANSI e TOMAS, 1995), secagem utilizando o ar quente (SU, 1997; MUSIELAK, 2001; SANDER et al., 2003; MUSIELAK e MIERZWA, 2009), secagem por líquido dessecante (BARATI et al., 2003), radiação de calor em estufa (ITAYA et al., 2005), secagem convectiva-radioativa (BOUKADIDA e NASRALLAH, 2002) e vapor superaquecido sob pressão (LOOI et al., 2002). Em alguns países, como Brasil, o ar quente é normalmente usado na secagem de produtos cerâmicos, não obstante os vários tipos de secagem disponíveis.

Na literatura, particularmente para materiais cerâmicos, estão disponíveis vários modelos de secagem. Dentre esses modelos, podem ser citados: modelos empíricos (SKANSI e TOMAS, 1995; SANDER et al., 2003), modelos de difusão (LOOI et al., 2002; SANDER et al., 2003; CHEMKHI e ZAGROUBA, 2005) e o modelo de Darcy (SU, 1997; CHEMKHI e ZAGROUBA, 2008). Em alguns trabalhos, os períodos de secagem são descritos por diferentes modelos: período de taxa constante e período de taxa decrescente (GHOSAL et al., 1999). Para modelos de difusão, as condições de contorno apropriadas devem ser identificadas na descrição do processo de secagem. Embora o uso de condições de contorno do terceiro tipo seja mais comum, alguns trabalhos usando condições de contorno do primeiro tipo são também encontrados na literatura (CHEMKHI e ZAGROUBA, 2005).

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



Almeida (2009) analisou o funcionamento de um secador tipo túnel utilizado pela indústria de cerâmica através de estudos experimentais e numéricos da secagem de tijolos cerâmicos vazados industriais. O objetivo foi oferecer às indústrias e/ou empresas que tenham interesse em otimizar o funcionamento de secadores industriais de tijolos cerâmicos, informações indispensáveis e raramente encontradas na literatura, para o processo de secagem.

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

Neste trabalho, o mecanismo de transporte de água no interior do sólido é descrito pela teoria da difusão líquida. Por outro lado, segundo Carmo (2004), existem outros tipos de mecanismos de difusão, tais como: Teoria da condensação-evaporação, considera que nesse mecanismo, o vapor de água no interior do produto é condensado perto da superfície, com a taxa de condensação igual à taxa de evaporação; Teoria capilar, que se refere ao fluxo de um líquido através dos interstícios e sobre a superfície de um sólido, devido a atrações moleculares entre o líquido e o sólido; Teoria de Luikov considera 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; Teoria de Krischer enfatiza 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; Teoria de Philip e De Vries considera que, em meios porosos, a água é movida através da difusão de vapor e por capilaridade.

## 2.5 A equação de difusão

Dada a equação de transporte:

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

os seguintes elementos são identificados:  $\Phi$  é a variável dependente de interesse,  $\lambda$  e  $\Gamma^\Phi$  são coeficientes de transporte,  $\vec{v}$  é o vetor velocidade do meio, enquanto  $S$  é o termo fonte.

Na Equação (2.1), cada termo é definido como:

a) Transiente -  $\frac{\partial(\lambda\Phi)}{\partial t}$  ;

b) Advecção -  $\nabla \cdot (\lambda \vec{v} \Phi)$  ;

c) Difusão -  $\nabla \cdot (\Gamma^\Phi \nabla \Phi)$  ;

d) Termo fonte –  $S$ .

Para obter-se a equação de difusão, basta tomar como nulo o termo de advecção, e para isso admite-se que  $|\vec{v}| = 0$ .

Assim, a equação de difusão, muito usada para descrever o transporte de água em meios porosos, pode ser escrita como (LUIKOV, 1968; CRANK, 1992; BIRD et al., 2001):

$$\frac{\partial(\lambda\Phi)}{\partial t} = \nabla \cdot (\Gamma^\Phi \nabla \Phi), \quad (2.2)$$

em que, no caso específico de secagem,  $\lambda = 1$ ,  $\Phi = M$  é o teor de umidade em base seca,  $t$  é o tempo e  $\Gamma^\Phi = D$  é a difusividade efetiva de massa no produto.

Para resolver a Equação. (2.2) analiticamente, com o objetivo de descrever um processo de secagem, devem ser definidas as condições iniciais e de contorno e estabelecidas algumas hipóteses:

- o mecanismo de transporte de água no interior do sólido é somente a difusão líquida;

- a distribuição inicial de umidade deve ser uniforme;
- as dimensões do sólido não variam durante a difusão de água;
- o coeficiente convectivo de transferência de massa é constante durante a difusão de água;
- a difusividade efetiva da água não varia durante a difusão;
- o sólido é considerado homogêneo e isotrópico.

As soluções analíticas, considerando as hipóteses acima, podem ser obtidas para diversas geometrias através de separação de variáveis, e algumas delas são apresentadas a seguir.

## **2.6 Soluções analíticas para a equação de difusão**

A descrição da cinética de secagem de um produto, baseado em um modelo difusivo, se dá através da solução de uma equação de difusão. Alguns trabalhos apresentam soluções analíticas para a equação de difusão, especialmente se a condição de contorno é do primeiro tipo (KULASIRI e WOODHEAD, 2005; RICARDEZ et al., 2005).

Para a condição de contorno do terceiro tipo, as soluções numéricas são frequentemente encontradas na literatura (BARONAS et al., 1999; LIU e SIMPSON, 1999; LIU et al., 2001; OLEK et al., 2005; OLEK e WERES, 2007).

Dedic et al. (2003) propuseram um modelo tridimensional para descrever a cinética de secagem de madeira. O modelo é baseado na conservação de massa e energia. Seus resultados experimentais para os perfis de temperatura foram obtidos pela secagem de um bloco de madeira de faia e foram comparados com os resultados obtidos pelo modelo, apresentando valores satisfatórios para certo intervalo de temperatura e velocidade de secagem.

As equações diferenciais parciais que regem a transferência de calor e umidade são resolvidas normalmente através de técnicas numéricas. Entretanto, Kulasiri e Woodhead (2005) utilizaram a teoria de Luikov de transferência de calor e de massa para descrever um modelo de secagem para materiais porosos. Nesse trabalho apresentaram soluções analíticas para situações de secagem industrial. Analisaram a natureza das soluções utilizando as propriedades físicas de *Pinus radiata*. Observaram que os gradientes de temperatura são de grande importância para definir o perfil de umidade no interior do material muito espesso e que modelos baseados somente em gradientes de umidade podem não ser suficientes para explicar os fenômenos de secagem de materiais porosos úmidos.

Na literatura, se uma solução analítica for proposta para a condição de contorno do terceiro tipo, a série que representa a solução em geral é expressa apenas pelo primeiro termo, e os parâmetros de processo são determinados por regressão (DINCER, 1998; JIAN-FENG et al., 2007). Este procedimento dispensa o cálculo das raízes através da equação característica, e funciona bem se o valor do número de Biot for pequeno. Se o número de Biot não for pequeno, mais termos da série são necessários para representar a cinética de secagem. Então, uma possível razão para a falta de soluções analíticas na literatura para problemas de difusão com condição de contorno do terceiro tipo pode ser atribuída à grande quantidade de raízes, que deve ser determinada de forma a cobrir todo o domínio do número de Biot, quando são considerados muitos termos da série.

### 2.6.1 Solução unidimensional com condição de contorno do primeiro tipo

A solução unidimensional da Equação (2.2) para descrever um processo de secagem para a condição de contorno do primeiro tipo, em coordenadas cartesianas e supondo uma parede infinita com espessura  $L_x$  na direção  $x$ , é dada por (LUIKOV, 1968; CRANK, 1992):

$$M(x,t) = M_{eq} + (M_0 - M_{eq}) \sum_{n=1}^{\infty} A_{1n} \cos\left(\mu_{1n} \frac{x}{L_x/2}\right) \exp\left(-\mu_{1n}^2 \frac{D}{(L_x/2)^2} t\right), \quad (2.3)$$

onde  $M(x,t)$  é o teor de umidade no instante  $t$  numa posição  $x$  no interior da parede infinita,  $M_{eq}$  e  $M_0$  são, respectivamente, o teor de umidade de equilíbrio e o teor de umidade inicial e as expressões para  $A_{1n}$  (coeficientes da solução analítica dependente da posição para a condição de contorno do primeiro tipo) e  $\mu_{1n}$  (raízes da equação característica para condição de contorno do primeiro tipo) são dadas por:

$$A_{1n} = (-1)^{n+1} \frac{2}{\mu_{1n}} \quad \text{e} \quad \mu_{1n} = (2n-1) \frac{\pi}{2}. \quad (2.4a-b)$$

O valor médio do teor de umidade em um instante  $t$ , denotada por  $\bar{M}(t)$ , pode ser obtido através da expressão:

$$\bar{M}(t) = \frac{1}{L_x} \int M(x,t) dx, \quad (2.5)$$

onde a integração é realizada em todo o domínio (de  $-L_x/2$  até  $L_x/2$ ), que resulta em:

$$\bar{M}(t) = M_{eq} + (M_0 - M_{eq}) \sum_{n=1}^{\infty} B_{1n} \exp\left(-\mu_{1n}^2 \frac{D}{(L_x/2)^2} t\right), \quad (2.6)$$

em que  $B_{1n}$  são os coeficientes da solução analítica para o teor de umidade médio (condição de contorno do primeiro tipo) dado por:

$$B_{1n} = \frac{8}{(2n-1)^2 \pi^2}. \quad (2.7)$$

### 2.6.2 Solução unidimensional com condição de contorno do terceiro tipo

Para um problema de difusão unidimensional, a condição de contorno do terceiro tipo é expressa da seguinte forma:

$$-D \frac{\partial M(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=\pm L_x/2} = h \left( M(x,t) \Big|_{x=\pm L_x/2} - M_{eq} \right), \quad (2.8)$$

onde  $h$  é o coeficiente de transferência convectivo de massa. A solução para essa condição de contorno é dada por (LUIKOV, 1968; CRANK, 1992):

$$M(x,t) = M_{eq} + (M_0 - M_{eq}) \sum_{n=1}^{\infty} A_{3n} \cos\left(\mu_{3n} \frac{x}{L_x/2}\right) \exp\left(-\mu_{3n}^2 \frac{D}{(L_x/2)^2} t\right), \quad (2.9)$$

onde as expressões para  $A_{3n}$  (coeficientes da solução analítica em função da posição para condição de contorno do terceiro tipo) e  $\mu_{3n}$  (raízes da equação característica para condição de contorno do terceiro tipo) são:

$$A_{3n} = \frac{4\text{sen}(\mu_{3n})}{2\mu_{3n} + \text{sen}(2\mu_{3n})} \quad \text{e} \quad \cot g(\mu_{3n}) = \frac{\mu_{3n}}{\text{Bi}}. \quad (2.10a-b)$$

O número de Biot ( $\text{Bi}$ ) é dado por:

$$\text{Bi} = \frac{hL_x/2}{D}. \quad (2.11)$$

Então, para um determinado número de Biot, se os  $\mu_{3n}$  são conhecidos, os coeficientes  $A_{3n}$  são completamente definidos. A Equação (2.10b) é chamada equação característica e pode ser numericamente resolvida para qualquer número de Biot. Silva et al. (2010) mostraram que para baixos números de Biot ( $\text{Bi} < 5$ ), em geral apenas 5 termos da série produzem erros de truncamentos desprezíveis. Já para elevados números de Biot, por exemplo,  $\text{Bi} = 200$ , mesmo a consideração de 16 termos resulta em um erro de truncamento de 1,7% em  $t = 0$  (que é o instante com erro máximo devido ao truncamento). Portanto, um programa auxiliar foi escrito em Fortran, e as primeiras 16 raízes da Equação (2.10b) foram calculadas para 469 valores especificados de números de Biot, de  $\text{Bi} = 0$  (o que corresponde a uma resistência infinita ao fluxo de água na superfície) até  $\text{Bi} = 200$  (que corresponde praticamente a uma condição de contorno de equilíbrio).

De acordo com a Equação (2.5), o valor médio do teor de umidade num instante  $t$  é dado como a seguir:

$$\bar{M}(t) = M_{eq} - (M_{eq} - M_0) \sum_{n=1}^{\infty} B_{3n} \exp\left[-\frac{\mu_{3n}^2}{(L_x/2)^2} Dt\right], \quad (2.12)$$

onde  $B_{3n}$  são os coeficientes da solução analítica para o teor de umidade médio (condição de contorno do terceiro tipo), dados pela seguinte expressão:

$$B_{3n} = \frac{2Bi^2}{\mu_{3n}^2 (Bi^2 + Bi + \mu_{3n}^2)}. \quad (2.13)$$

Então, para um determinado número de Biot, com os  $\mu_{3n}$  calculados pela Equação (2.10b), os coeficientes  $B_{3n}$  são completamente definidos. Assim, a Equação (2.12) pode ser usada para calcular o teor de umidade médio em um dado instante de tempo  $t$ .

### 2.6.3 Solução bidimensional com condição de contorno do terceiro tipo

Para um problema de difusão bidimensional, considerando-se uma placa plana retangular com lados de comprimentos  $L_x$  e  $L_y$ , a solução analítica num instante  $t$  numa posição  $(x, y)$  é apresentada da seguinte forma (LUIKOV, 1968; CRANK, 1992):

$$M(x, y, t) = M_{eq} - (M_{eq} - M_0) \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} A_{3n} A_{3m} \cos\left(\mu_{3n} \frac{x}{L_x/2}\right) \times \cos\left(\mu_{3m} \frac{y}{L_y/2}\right) \times \exp\left[-\left(\frac{\mu_{3n}^2}{(L_x/2)^2} + \frac{\mu_{3m}^2}{(L_y/2)^2}\right) Dt\right], \quad (2.14)$$

onde expressões análogas às Equações (2.10) e (2.11) são também usadas para calcular os termos referentes ao índice  $m$  relativo ao  $L_y$ . Por outro lado, o teor de umidade médio num instante  $t$  é dado por:

$$\bar{M}(t) = M_{eq} - (M_{eq} - M_0) \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} B_{3n} B_{3m} \exp\left[-\left(\frac{\mu_{3n}^2}{(L_x/2)^2} + \frac{\mu_{3m}^2}{(L_y/2)^2}\right) Dt\right], \quad (2.15)$$

e os parâmetros  $B_{3m}$  são obtidos de modo análogo a Equação (2.13).

## 2.7 Soluções numéricas para a equação de difusão

Com o desenvolvimento de computadores cada vez mais velozes e com grande capacidade de armazenamento, o uso de técnicas numéricas para a solução de problemas complexos abrangendo as mais diversas áreas de interesse é cada vez mais frequente. Assim, nas últimas décadas, o desenvolvimento de métodos numéricos cada vez mais rápidos e precisos têm sido um dos principais objetivos dos pesquisadores. Com essa disponibilidade computacional, mesmo reconhecendo a importância das soluções analíticas para problemas de difusão, é cada vez maior o número de pesquisadores que optam por soluções numéricas (BORTOLI, 2000).

Para realizar a simulação de secagem de corpos individuais bi e tridimensionais, incluindo o estudo de t $\acute{e}$ mpera e análise de tensões internas, Jia et al. (2001) desenvolveram um pacote computacional em ambiente MATLAB, empregando o método dos elementos finitos para resolver a equação de difusão de calor e de massa. Como afirmam os autores, o pacote computacional desenvolvido é uma ferramenta útil para prever as distribuições de temperatura, teor de umidade e tensões internas no interior dos corpos individuais.

Nascimento (2002) em seus estudos de secagem de tijolos cerâmicos, moldados com argila vermelha, analisou o fenômeno da difusão transiente em sólidos na forma de paralelepípedo e apresentou vários modelos matemáticos utilizando um sistema tridimensional de coordenadas cartesianas, obtendo soluções analíticas e numéricas para a equação de difusão. Na solução numérica foi usado o método dos volumes finitos com uma formulação totalmente implícita, considerando as propriedades termofísicas constantes ou variáveis, com condições de contorno do primeiro e terceiro tipos, com ou sem efeito da retração dos corpos. Segundo esse autor, ao se comparar os dados simulados com os experimentais houve uma excelente concordância entre ambos.

Cadé et al. (2005) estudaram o transporte de massa durante a secagem de tijolos cerâmicos vazados utilizando coordenadas cartesianas tridimensionais. Nesse estudo foi apresentada e analisada a solução numérica da equação de difusão, utilizando-se do método de volumes finitos, considerando as propriedades termofísicas e condições de



contorno na superfície do sólido constantes. Esses autores concluíram que a modelagem matemática utilizada foi adequada para obtenção da solução numérica.

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

Silva et al. (2008) fizeram uma simulação numérica da difusão da água em sólidos cilíndricos, considerando variáveis os coeficientes de transporte e o raio do cilindro durante o processo. A modelagem matemática desenvolvida foi aplicada na simulação da secagem de banana e arroz com casca, utilizando dados experimentais da literatura. Os autores concluíram que, com a difusividade de massa variável, os resultados obtidos são melhores que os resultados obtidos levando em consideração a difusividade de massa constante.

Com o intuito de verificar a influência da secagem sobre a qualidade da soja, Rafiee et al. (2008) estudaram a transferência difusiva de massa em corpos individuais, empregando o método de elementos finitos. Eles apresentaram um modelo matemático bidimensional escrito em coordenadas cartesianas, considerando a condição de simetria do corpo e sem considerar o encolhimento ocorrido durante a secagem. Os dados simulados foram comparados com dados experimentais obtidos a partir de experiências de secagem realizadas em camada delgada para grãos de soja. Esses autores concluíram que a distribuição do teor de umidade no interior dos grãos de soja pode ser simulada pelo método dos elementos finitos.

Em seus estudos, Batista et al. (2008) utilizaram técnicas numéricas, analíticas e experimentais para a solução de problemas específicos envolvendo transferência de calor e massa, retração volumétrica e tensões provenientes de gradientes térmicos e de umidade. O objetivo do estudo foi o desenvolvimento de sistemas de secagem, com ênfase para a secagem de materiais cerâmicos em forma de paralelepípedo (tijolos cerâmicos) e de equipamento industrial (secador). Foram usadas várias temperaturas e umidades relativas no ambiente de secagem. Desse modo, foram obtidas várias curvas da cinética de secagem e encolhimento. O processo de secagem ocorreu no período de taxa decrescente e da retração volumétrica. Eles concluíram que, para as condições adotadas no ensaio de choque térmico, não houve danos estruturais nos corpos de prova.

Lima (1999) apresentou soluções analíticas e numéricas da equação de difusão bidimensional para sólidos esferoidais prolatos, com propriedades termofísicas constantes ou variáveis e condições de contorno convectiva ou de equilíbrio, com ou sem encolhimento, usando o método de volume finito. Na solução numérica utilizou malhas ortogonais, geradas por expressões analíticas, válidas somente para elipsóides. Os modelos apresentados não dependem da estrutura física do sólido. O autor enfatizou a secagem de bananas, variedade “nanicão”, obtendo resultados consistentes com dados experimentais da literatura.

Liu e Simpson (1999) apresentaram um trabalho para determinação inversa do coeficiente de difusão, a partir de uma equação de difusão unidimensional em regime transiente, utilizando o método de diferenças finitas de segunda ordem. Utilizaram para análise numérica, dados experimentais de dessorção de umidade em carvalho vermelho do norte (*Quercus rubra*). Seus resultados indicaram que o coeficiente de difusão é uma função do tempo, da posição, do teor de umidade e do gradiente de umidade. Esses resultados estão em desacordo com alguns dados da literatura que afirmam que o coeficiente de difusão pode ser constante ou uma função apenas do teor de umidade. No entanto, há dados experimentais da literatura que relacionam difusão de certas substâncias em materiais porosos que apresentam semelhança com os seus resultados. Os autores concluíram que a forma funcional do coeficiente de difusão, para a difusão de umidade na madeira, necessita de uma análise mais aprofundada.

Nos estudos de Carmo (2004), foram apresentadas soluções numéricas da equação de difusão, utilizando geometria do tipo esferoidal oblata para sólidos. O autor usou o método de volumes finitos, numa formulação totalmente implícita, considerando o encolhimento dos corpos, bem como a variação nas propriedades termofísicas, além da condição de contorno convectiva. Os modelos formulados descreveram a secagem em multipasse (têmpera) de lentilhas e os resultados experimentais foram consistentes com a simulação numérica.

## **2.8 Condições de contorno para modelos de difusão**

Para descrever a cinética de secagem através de um modelo de difusão, deve-se conhecer as condições iniciais e de contorno. Na literatura, quando se usa ar quente no processo de secagem, a condição de contorno usual é a do terceiro tipo (LIU e SIMPSON, 1996; DINCER, 1998; LIU e SIMPSON, 1999; BARONAS et al., 1999; BARONAS et al., 2001; LIU et al., 2001; OLEK e WERES, 2007), mas a do primeiro tipo é também utilizada em alguns trabalhos de pesquisa (KULASIRI e WOODHEAD, 2005; RICARDEZ et al., 2005).

Silva et al. (2007) apresentaram um trabalho que teve por objetivo propor uma solução numérica da equação de difusão para sólidos obtidos através da revolução de geometrias bidimensionais arbitrárias, utilizando coordenadas generalizadas, com a finalidade de descrever a transferência de massa em tais sólidos. Para tal, a equação de difusão foi discretizada e resolvida utilizando o método dos volumes finitos, com uma formulação totalmente implícita, para a condição de contorno de primeira espécie. A solução proposta tira proveito de condições de simetria, e a justificativa de seu emprego pode ser dada através da significativa redução do esforço computacional exigido em relação ao método tradicional de solução numérica com a utilização de malhas tridimensionais.

Carmo e Lima (2008) apresentaram uma solução numérica da equação de difusão bidimensional transiente para descrever a transferência de massa dentro de esferóides oblatos, com coeficiente de difusão constante, condição de contorno convectiva e as dimensões da partícula como parâmetros variáveis. O modelo foi validado com resultados analíticos encontrados na literatura. Os autores observaram,

também, que o modelo matemático é consistente e que pode ser utilizado para resolver outros problemas de difusão, como por exemplo, para corpos que possam ser aproximados a discos ou esferas e/ou outros casos com propriedades variáveis, com pequenas modificações no modelo.

## **2.9 Aspectos geométricos**

Em muitos trabalhos de pesquisa, é adotado o modelo unidimensional (LIU e SIMPSON, 1996; DINCER, 1998; LIU et al., 2001; KULASIRI e WOODHEAD, 2005; MELLADO, 2007). Em alguns trabalhos, a fim de garantir que o processo de difusão seja unidimensional, algumas superfícies do produto são seladas antes da secagem (LIU e SIMPSON, 1999; TREMBLAY et al., 2000; OLEK e WERES, 2007; JIAN-FENG et al., 2007).

Apesar dos modelos unidimensionais serem encontrados frequentemente na literatura, são encontrados também modelos bidimensionais (BARONAS et al., 1999; BARONAS et al., 2001; RICARDEZ et al., 2005) e tridimensionais (DEDIC et al., 2003; SALIN, 2008).

Ricardez et al. (2005) observaram que a secagem a vácuo causa menos defeitos na madeira de carvalho vermelho do que a secagem tradicional. Apresentaram um modelo matemático para descrever a secagem da madeira, considerando a difusão molecular e o fluxo bidimensional de umidade. Experimentalmente, a temperatura e o teor de umidade foram controlados para estimar o coeficiente de difusão efetivo e o teor de umidade da madeira. Uma equação do tipo Arrhenius foi utilizada para determinar a relação entre a temperatura e o coeficiente de difusão.

De acordo com Baronas et al. (1999), a secagem de madeira envolve transferência de umidade a partir do interior da madeira para a superfície e, em seguida, da superfície para o ar circundante. Esses processos podem ser caracterizados pelos coeficientes de transferência de umidade interno e da superfície do material. Esses autores desenvolveram um modelo baseado na equação de difusão com coeficiente de difusão variável, bidimensional, para determinar esses coeficientes, e observaram a

influência da geometria da madeira em contraste com o modelo unidimensional proposto por Liu e Simpson (1999).

Para descrever o transporte de umidade em materiais cerâmicos, a geometria do sólido poroso deve ser definida. Em muitos estudos sobre secagem de produtos cerâmicos são usados corpos de prova cuja forma geométrica é aproximada para uma parede infinita como os trabalhos desenvolvidos por Su (1997); Musielak (2001); Itaya et al. (2005); Chemkhi e Zagrouba (2005). Esses últimos pesquisadores estimaram o coeficiente de difusão de massa a partir de dados experimentais obtidos em diferentes condições de secagem para três amostras de argila. A solução analítica da equação de difusão unidimensional em coordenadas cartesianas foi empregada para mostrar como o coeficiente de difusão depende das condições experimentais. Em outros trabalhos, sólidos como tijolos cerâmicos são simplificados para o caso bidimensional (BOUKADIDA e NASRALLAH, 2002).

## **2.10 Meios homogêneo e heterogêneo**

Em geral, os trabalhos encontrados na literatura consideram o meio homogêneo para descrever a cinética de secagem de madeira (LIU et al., 2001; RICARDEZ et al., 2005; KULASIRI e WOODHEAD, 2005; MELLADO, 2007). No entanto, existem autores que consideram a madeira como um meio heterogêneo (PERRÉ e TURNER, 2002).

Perré e Turner (2002) constataram que a heterogeneidade da madeira influi substancialmente no processo de transporte de calor e de massa no seu interior, quando submetida a um processo de secagem. Os autores utilizaram um modelo bidimensional de secagem, conhecido como Transpore, de modo que os efeitos da heterogeneidade do material e a direção local do transporte de calor e de massa foram investigados. O modelo permite que o comportamento do teor de umidade, temperatura interna e campos de pressão possam ser monitorados durante o processo de secagem, usando uma formulação com Volumes de Controle de Elementos Finitos (CV-FE). Essa formulação, em conjunto com sofisticadas técnicas numéricas, garante a eficácia dos resultados da simulação. Uma seção de placa de madeira macia foi utilizada para descrever as possibilidades oferecidas por este modelo. Uma comparação da cinética de secagem

gerada por esse modelo heterogêneo e dos modelos clássicos homogêneos forneceu uma compreensão do impacto e da importância de tratar as propriedades locais da madeira quando submetida à secagem.

## **2.11 Determinação de parâmetros de processo**

Para usar as soluções anteriormente referidas na descrição da cinética de secagem, os parâmetros de processo devem ser conhecidos. Esses parâmetros podem ser determinados através de correlações empíricas (PINHEIRO et al., 1998; TREMBLAY et al., 2000; NABHANI et al., 2003) ou através de processos de otimização, que normalmente utilizam o método inverso (LIU e SIMPSON, 1999; LIU et al., 2001; OLEK e WERES, 2007).

Allegretti e Ferrari (2008) observaram que uma vez conhecidos os parâmetros do processo, a cinética de secagem pode ser realizada, e o teor de umidade em um instante  $t$  em qualquer posição no interior da madeira pode ser determinado. O conhecimento da distribuição de umidade durante a secagem é importante porque os gradientes de umidade e de temperatura produzem tensões internas que podem danificar a madeira.

Silva (2007) simulou a cinética de secagem de membranas cerâmicas na forma de tubos, para várias condições de secagem. Os resultados numéricos foram comparados com dados experimentais. A partir desta comparação foi determinada, via otimização, uma expressão para a difusividade de massa em função do teor de umidade e da temperatura do ar de secagem, e também o valor do coeficiente de transferência convectivo de massa correspondente para cada temperatura de secagem. Neste trabalho, a equação de difusão bidimensional foi discretizada em domínio arbitrário.

Conforme pode ser constatado neste capítulo, a secagem tem sido exaustivamente estudada, por ser um processo usado em diversos setores industriais, com diferentes finalidades. Os trabalhos apresentados nesta revisão bibliográfica deram suporte ao presente trabalho, cujo objetivo geral consiste em propor técnicas analíticas e numéricas para a descrição de processos de difusão em corpos na forma de paralelepípedos (geometria tridimensional), incluindo paredes finitas (geometria bidimensional) e paredes infinitas (geometria unidimensional).

## **CAPÍTULO 3**

### **MATERIAL E MÉTODOS**

Para determinar o campo de temperatura ou o teor de umidade em um corpo, com uma determinada geometria, em um dado instante de tempo, considerando o modelo de difusão, é necessário conhecer as características do material e do meio externo. Isto é necessário para obter-se a solução da equação de difusão para tal corpo, pois, para diferentes formas geométricas e/ou interações com o meio, existem diferentes soluções para a equação de difusão. Estas soluções dependem ainda das condições de contorno consideradas no modelo matemático, o que possibilita determinar a temperatura (ou teor de umidade) em um ponto do material, em um dado instante de tempo.

#### **3.1 Solução analítica para o paralelepípedo**

As soluções analíticas unidimensionais para uma parede infinita e bidimensional para uma placa retangular da equação de difusão em coordenadas cartesianas foram apresentadas no Capítulo 2. Neste capítulo foi apresentado apenas a solução analítica tridimensional para um paralelepípedo.

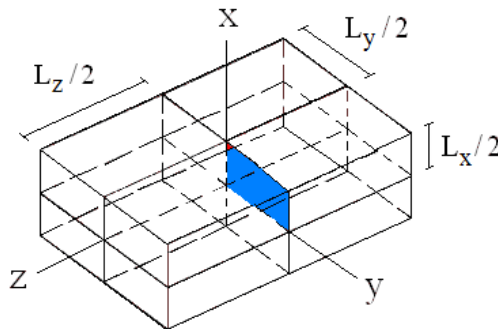
Partindo da equação de difusão escrita na sua forma geral, e assumindo  $\Phi = M$  (teor de umidade em base seca),  $\Gamma^\Phi = D$  (difusividade efetiva da água),  $\lambda = 1$  e  $S = 0$ , a Equação (2.2) passa a ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial(M)}{\partial t} = \nabla \cdot (\Gamma^\Phi \nabla M). \quad (3.1)$$

Essa Equação é conhecida como a equação de difusão de massa que, escrita em coordenadas cartesianas é dada por:

$$\frac{\partial(M)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial M}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D \frac{\partial M}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D \frac{\partial M}{\partial z} \right). \quad (3.2)$$

Os sólidos a serem estudados devem apresentar a forma de um paralelepípedo, como é apresentado na Figura 3.1.



**Figura 3.1** - Paralelepípedo destacando um plano vertical xy, na posição  $z = 0$ , onde a distribuição de água foi examinada.

A Equação (3.2) pode ser resolvida analiticamente sob as seguintes hipóteses:

- as dimensões do sólido não variam durante a difusão da água;
- a difusão líquida é o único mecanismo de transporte de água dentro do sólido;
- a distribuição inicial do teor de umidade deve ser uniforme;



- d) o sólido é considerado homogêneo e isotrópico;
- e) o coeficiente de transferência convectivo de massa é constante durante a difusão da água;
- f) a difusividade efetiva da água não varia durante o processo.

Esse estudo foi conduzido assumindo que as condições de contorno do primeiro e terceiro tipo possam ser usadas para descrever o processo de secagem. A descrição da cinética de secagem considerando a condição de contorno do primeiro tipo foi realizada através do *software* “Prescribed Adsorption - Desorption” (SILVA e SILVA, 2009a) acessível na Internet em <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/Prescribed.htm>. Por outro lado, a solução analítica da equação de difusão para condição de contorno de terceiro tipo é apresentada abaixo.

### 3.1.1 Solução analítica para condição de contorno de terceiro tipo

A condição de contorno convectiva é obtida impondo a igualdade entre o fluxo difusivo no interior da superfície e o fluxo convectivo externo nas vizinhanças da mesma superfície. Para um paralelepípedo, essa imposição resulta em:

$$-D \frac{\partial M(x,y,z,t)}{\partial x} \Big|_{x=\pm L_x/2} = h \left( M(x,y,z,t) \Big|_{x=\pm L_x/2} - M_{eq} \right), \quad (3.3a)$$

$$-D \frac{\partial M(x,y,z,t)}{\partial y} \Big|_{y=\pm L_y/2} = h \left( M(x,y,z,t) \Big|_{y=\pm L_y/2} - M_{eq} \right), \quad (3.3b)$$

e

$$-D \frac{\partial M(x,y,z,t)}{\partial z} \Big|_{z=\pm L_z/2} = h \left( M(x,y,z,t) \Big|_{z=\pm L_z/2} - M_{eq} \right). \quad (3.3c)$$

Em que  $h$  é o coeficiente de transferência convectivo de massa,  $M(x,y,z,t)$  é o teor de umidade na posição  $(x, y, z)$  dentro do paralelepípedo no instante  $t$ ,  $M_{eq}$  é o teor de umidade de equilíbrio e  $L_x$ ,  $L_y$  e  $L_z$  são os comprimentos das arestas do paralelepípedo ao longo de  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente.

Para um paralelepípedo homogêneo com teor de umidade inicial uniforme  $M_0$  e condição de contorno definida pelas Equações (3.3a-c), a solução analítica  $M(x, y, z, t)$  da Equação (3.2) é obtida por separação de variáveis (LUIKOV, 1968; CRANK, 1992):

$$M(x, y, z, t) = M_{\text{eq}} - (M_{\text{eq}} - M_0) \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} A_n A_m A_k \cos\left(\mu_n \frac{x}{L_x/2}\right) \times \cos\left(\mu_m \frac{y}{L_y/2}\right) \times \cos\left(\mu_k \frac{z}{L_z/2}\right) \exp\left[-\left(\frac{\mu_n^2}{(L_x/2)^2} + \frac{\mu_m^2}{(L_y/2)^2} + \frac{\mu_k^2}{(L_z/2)^2}\right) Dt\right], \quad (3.4)$$

em que

$$A_j = \frac{4 \operatorname{sen} \mu_j}{2\mu_j + \operatorname{sen}(2\mu_j)}, \quad (3.5)$$

onde  $\mu_j$  são as raízes da equação característica para a parede infinita, dada por:

$$\cotg \mu_j = \frac{\mu_j}{\operatorname{Bi}}. \quad (3.6)$$

O parâmetro Bi (número de Biot) é definido como

$$\operatorname{Bi} = \frac{hL/2}{D}, \quad (3.7)$$

onde  $L$  é um comprimento característico.

Observando a Equação (3.4), verifica-se que o valor do teor de umidade pode ser obtido para qualquer posição  $(x, y, z)$  em qualquer instante  $t$ , isto é, pode-se conhecer o perfil de  $M(x, y, z, t)$  no interior do corpo. No entanto, em muitos casos de interesse, necessita-se conhecer o valor do teor de umidade no corpo inteiro, ao longo do processo. Para esses casos, a expressão para o teor de umidade médio no tempo  $t$  pode ser escrito como:

$$\bar{M}(t) = \frac{1}{V} \int M(x, y, z, t) dV, \quad (3.8)$$

onde  $V$  é o volume do paralelepípedo.

Substituindo a Equação (3.4) na Equação (3.8) e realizando-se a integração, o teor de umidade médio no tempo  $t$ ,  $\bar{M}(t)$ , é dado por:

$$\bar{M}(t) = M_{eq} - (M_{eq} - M_0) \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} B_n B_m B_k \exp \left[ - \left( \frac{\mu_n^2}{(L_x/2)^2} + \frac{\mu_m^2}{(L_y/2)^2} + \frac{\mu_k^2}{(L_z/2)^2} \right) Dt \right], \quad (3.9)$$

onde os coeficientes  $B_n$ ,  $B_m$  e  $B_k$  são dados por

$$B_j = \frac{2Bi^2}{\mu_j^2 (Bi^2 + Bi + \mu_j^2)}. \quad (3.10)$$

Para a situação física analisada, é razoável admitir o mesmo valor de  $h$  em todas as faces do paralelepípedo, e esta suposição resulta em:

$$Bi_1 = \frac{h(L_x/2)}{D}, \quad (3.11a)$$

$$Bi_2 = Bi_1 \frac{L_y}{L_x}, \quad (3.11b)$$

e

$$Bi_3 = Bi_1 \frac{L_z}{L_x}. \quad (3.11c)$$

A Equação (3.6) é uma equação transcendental que pode ser reescrita como:

$$\mu_j \operatorname{sen} \mu_j - Bi \cos \mu_j = 0. \quad (3.12)$$

A Equação (3.12) pode ser resolvida numericamente para qualquer número de Biot estipulado. Para isto, um programa auxiliar foi escrito em Fortran, e as 25 primeiras raízes da equação foram calculadas para 469 valores específicos dos números de Biot que variaram desde  $Bi = 0$  (que corresponde a uma resistência infinita para o fluxo de água na superfície) até  $Bi = 200$  (que praticamente corresponde à condição de contorno de equilíbrio). Como exemplo, as primeiras seis raízes da Equação (3.12), para alguns números de Biot, estão na Tabela 3.1.

**Tabela 3.1** - Algumas raízes da equação característica para vários números de Biot.

Bi	$\mu_1$	$\mu_2$	$\mu_3$	$\mu_4$	$\mu_5$	$\mu_6$
0,001	0,031618	3,14191	6,28334	9,42488	12,5665	15,7080
0,400	0,593242	3,26355	6,34613	9,46700	12,5981	15,7334
1,000	0,860334	3,42562	6,43730	9,52933	12,6453	15,7713
10,00	1,42887	4,30580	7,22811	10,2003	13,2142	16,2594
200,0	1,56298	4,68895	7,81493	10,9409	14,0669	17,1930

### 3.1.2 Erro de truncamento

A fim de estabelecer o número de termos usados na série, deve ser observado que o maior erro devido ao truncamento ocorre em  $t = 0$ . Neste caso a Equação (3.9) pode ser reescrita para  $nt$  termos, ao invés de infinitos termos, da seguinte forma:

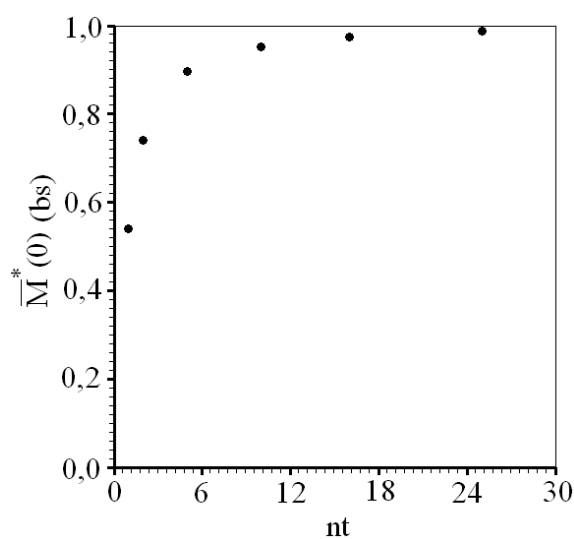
$$\bar{M}^*(0) = \frac{\bar{M}(0) - M_{eq}}{M_0 - M_{eq}} = \sum_{n=1}^{nt} \sum_{m=1}^{nt} \sum_{k=1}^{nt} B_n B_m B_k. \quad (3.13)$$

Obviamente, para  $nt \rightarrow \infty$ ,  $\bar{M}^*(0) = 1$ , e não há erro de truncamento. Por outro lado, para um valor finito de  $nt$ ,  $\bar{M}^*(0)$  depende do número de Biot. A Tabela 3.2 apresenta a dependência entre  $\bar{M}^*(0)$  e  $nt$  para vários números de Biot. Nesta tabela, por simplicidade, todas as dimensões do paralelepípedo foram consideradas iguais a  $L$ , o que implica em  $Bi_1 = Bi_2 = Bi_3$ .

**Tabela 3.2** - Valores de  $\overline{M}^*(0)$  como função de  $nt$  para vários números de Biot.

Biot	1 termo	2 termos	5 termos	10 termos	16 termos	25 termos
0,001	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
0,400	0,9912	0,9992	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
1,000	0,9589	0,9955	0,9998	1,0000	1,0000	1,0000
10,00	0,6683	0,8799	0,9846	0,9978	0,9995	0,9998
200,0	0,5405	0,7413	0,8963	0,9532	0,9747	0,9871

Uma inspeção na Tabela 3.2 torna possível afirmar que, para números de Biot pequenos, poucos termos da série são suficientes para obter resultados com erros desprezíveis devido ao truncamento. Por exemplo, para  $Bi = 0,001$ , somente 1 termo é requerido para obter  $\overline{M}^*(0) = 1,0000$ . Quando o número de Biot cresce, torna-se necessário aumentar o número de termos para obter erros de truncamento desprezíveis: para  $Biot = 200$ , mesmo com 25 termos, obtém-se  $\overline{M}^*(0) = 0,9871$ , que fornece um erro de 1,3%. Neste trabalho foi estabelecido  $nt = 16$  para  $Bi < 10$ , e  $nt = 25$  para  $Bi > 10$ , que garante um erro de truncamento de até 1,3% para  $\overline{M}^*(0)$ , correspondente a  $Biot = 200$ . Com o propósito de se ter uma idéia sobre a convergência da série em função de  $nt$ , o pior caso, correspondente a  $Bi = 200$ , que é apresentado na Figura 3.2.



**Figura 3.2** - Valores de  $\overline{M}^*(0)$  como função de  $nt$  para  $Biot = 200$ .

A Figura 3.2 sugere que quando  $n_t$  cresce, o valor de  $\overline{M}^*(0)$  tende a 1. Mas a ocorrência de  $\overline{M}^*(0) = 1,0000$  só acontece para  $n_t$  maior do que 25 termos.

### 3.1.3 Otimizador para condição de contorno de primeiro tipo (Solução analítica)

Silva et al. (2009) apresentaram um algoritmo para a determinação da difusividade da água durante o processo de secagem, a partir de um conjunto de dados experimentais, usando o método inverso. O transporte da água é descrito pela equação de difusão com condição de contorno de primeiro tipo, e a solução analítica é acoplada a um otimizador que varre o domínio da difusividade. A função objetivo para este problema inverso é o qui-quadrado ( $\chi^2$ ), definido por (BEVINGTON e ROBINSON, 1992; TAYLOR, 1997):

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N_p} [\overline{M}_i^{\text{exp}} - \overline{M}_i^{\text{ana}}(D)]^2 \frac{1}{\sigma_i^2}, \quad (3.14)$$

onde  $\overline{M}_i^{\text{exp}}$  é o  $i$ -ésimo ponto experimental do teor de umidade médio;  $\overline{M}_i^{\text{ana}}(D)$  é o teor de umidade médio no mesmo ponto obtido a partir da solução analítica da equação de difusão;  $\sigma_i$  é o desvio padrão do teor de umidade médio experimental no ponto  $i$ ;  $D$  é a difusividade efetiva da água e  $N_p$  é o número de pontos experimentais. O qui-quadrado depende unicamente da difusividade efetiva da água, para a condição de contorno de primeiro tipo. Então, um valor ótimo de  $D$  pode ser determinado minimizando a função qui-quadrado. Se  $\sigma_i$  não foi obtido a partir dos pontos experimentais e é, portanto, desconhecido, então o peso estatístico  $1/\sigma_i^2 = 1$  pode ser artificialmente atribuído a todos os pontos experimentais, o que significa o mesmo peso estatístico para todos eles.

A Equação (3.14) dá o qui-quadrado como função da difusividade efetiva da água, que é o parâmetro a ser determinado. O algoritmo não necessita de um valor inicial, nem da definição de um intervalo de pesquisa a ser informado pelo usuário para a determinação do valor ótimo de  $D$ . O algoritmo consiste, essencialmente, dos seguintes passos:

(a) Um valor inicial próximo de zero ( $1 \times 10^{-20}$ ) é atribuído a D e substituído na solução analítica da equação de difusão, aproximada por um certo número nt de termos. Então,  $\overline{M}_i^{ana}(D)$  pode ser calculado para um dado tempo e, conseqüentemente,  $\chi^2$  pode ser determinado para um conjunto de dados experimentais, através da Equação (3.14). Assim, o valor de D é dobrado, e um novo  $\chi^2$  é calculado. Então, o novo valor do  $\chi^2$  é comparado com o anterior e, se for menor, D é novamente dobrado e o valor correspondente do  $\chi^2$  é novamente calculado e comparado com o anterior. Este procedimento é repetido até que o valor do  $\chi^2$  calculado seja maior do que o anterior. Assim, o antepenúltimo e o último valores para D, denotados por  $D_a$  e  $D_b$ , respectivamente, definem uma região que contém o valor mínimo do  $\chi^2$ . O penúltimo valor da difusividade efetiva da água corresponde ao menor valor do  $\chi^2$  obtido neste intervalo.

(b) O último passo refere-se ao refinamento entre  $D_a$  e  $D_b$ . Isto é feito, subdividindo este intervalo em n valores de D uniformemente distribuídos. Então, um intervalo mais refinado pode ser obtido, e o procedimento descrito na letra (a) é repetido até satisfazer o critério de convergência estabelecido.

### 3.1.4 Otimizador para condição de contorno convectiva

No intuito de aplicar o otimizador descrito acima para condição de contorno convectiva, a Equação (3.14) deve ser adequadamente adaptada. Neste caso, a função objetivo para a minimização torna-se:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N_p} [\overline{M}_i^{exp} - \overline{M}_i^{ana}(D, Bi)]^2 \frac{1}{\sigma_i^2}. \quad (3.15)$$

A função objetivo dada pela Equação (3.15) depende da difusividade efetiva da água e do número de Biot para transferência de massa ou, equivalentemente, do coeficiente de transferência convectivo de massa h. No entanto, para um número de Biot previamente estipulado, essa equação é função somente da difusividade efetiva de massa. Assim, o otimizador desenvolvido por Silva et al. (2009) pode ser aplicado para

minimização da Equação (3.15), determinando um valor ótimo para a difusividade efetiva supondo um número de Biot especificado. Admitindo que a difusividade efetiva da água  $D$  e o coeficiente de transferência convectivo da massa  $h$  sejam independentes entre si, o processo de otimização pode ser repetido para todos os 469 números de Biot estipulados, cobrindo o domínio de 0 a 200. Após varrer todos os números de Biot, o menor qui-quadrado dentre os 469 mínimos é identificado. Desde que o domínio inteiro para o número de Biot é varrido, não é necessário indicar valores iniciais ou intervalos de pesquisa para determinação dos valores ótimos de  $D$  e  $Bi$  e, conseqüentemente, para o coeficiente de transferência convectivo da massa  $h$ .

Para um paralelepípedo, a expressão para o número de Biot foi definida pela Equação (3.11a). Para números de Biot entre 0 e 10, somente 16 raízes da Equação (3.12) foram usadas e, para valores maiores que 10, foram utilizadas 25 raízes nos cálculos efetuados. Para números de Biot expressos pelas Equações (3.11b) e (3.11c), as raízes da equação característica foram calculadas por interpolação linear, usando valores disponíveis.

## **3.2 Solução numérica para o paralelepípedo**

### **3.2.1 Solução numérica tridimensional em coordenadas cartesianas**

Para a discretização da equação da difusão em coordenadas cartesianas, foi utilizado o método dos volumes finitos, que se baseia no balanço de fluxos da grandeza de interesse, em um determinado volume de controle e intervalo de tempo.

O método dos volumes finitos foi utilizado através da formulação totalmente implícita. O princípio deste método está na integração da equação de difusão, no espaço e no tempo, sendo que nas derivadas espaciais, a variável de interesse  $\Phi$  foi substituída no instante atual. Esta formulação foi escolhida porque não apresenta problemas de instabilidade ou de convergência.

Conforme mencionado no Capítulo 2, a equação de transporte se reduziu a equação de difusão, que foi escrita do seguinte modo:



$$\frac{\partial(\lambda\Phi)}{\partial t} = \nabla \cdot (\Gamma^\Phi \nabla \Phi) + S. \quad (3.16)$$

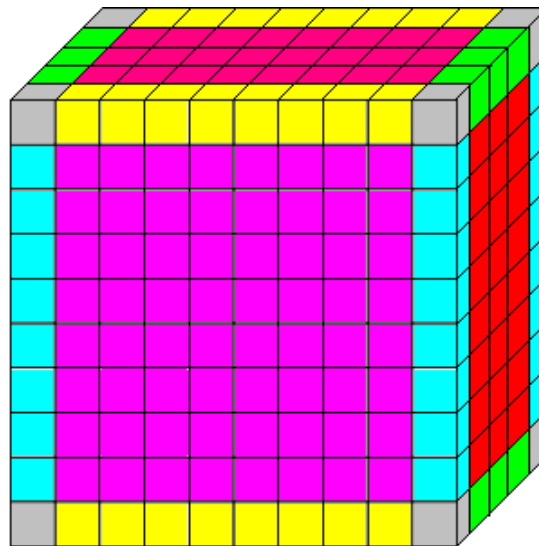
A Equação (3.16) pode ser escrita em coordenadas cartesianas do seguinte modo:

$$\frac{\partial(\lambda\Phi)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + S. \quad (3.17)$$

Essa equação é uma generalização da Equação (3.2) para uma grandeza qualquer.

Para resolver numericamente a Equação (3.17), é necessário definir os volumes de controle em que o balanço dos fluxos é expresso.

Partindo do domínio contínuo, obtém-se o domínio discreto dividido numa malha com vinte e sete tipos distintos de volume de controle, quanto à localização na malha, conforme se observa na Figura 3.3.



**Figura 3.3** - Malha tridimensional com 27 tipos distintos de volumes de controle.

É possível concluir, através de uma observação da Figura 3.3 que, para um problema tridimensional, um volume de controle interno, identificado pelo ponto nodal

P está ligado a 6 volumes de controle vizinhos, gerando, portanto, uma matriz com estrutura de sete diagonais, conforme será visto ao longo do texto.

Integrando-se a Equação (3.17) no espaço ( $\Delta x \Delta y \Delta z$ ) e no tempo ( $\Delta t$ ), obtém-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_v \frac{\partial(\lambda\Phi)}{\partial t} dx dy dz dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_v \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right) + S \right] dx dy dz dt, \quad (3.18a)$$

ou ainda:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_v \frac{\lambda_p \Phi_p - \lambda_p^0 \Phi_p^0}{\Delta t} dx dy dz dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_v \left[ \left( \frac{\Gamma_e^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial x} \Big|_e - \Gamma_w^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial x} \Big|_w}{\Delta x} \right) + \left( \frac{\Gamma_n^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial y} \Big|_n - \Gamma_s^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial y} \Big|_s}{\Delta y} \right) + \left( \frac{\Gamma_f^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial z} \Big|_f - \Gamma_b^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial z} \Big|_b}{\Delta z} \right) + S \right] dx dy dz dt. \quad (3.18b)$$

Logo:

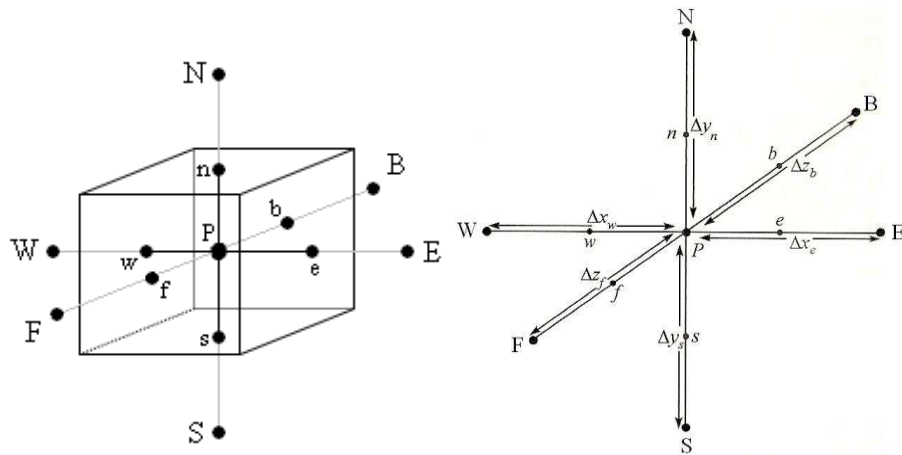
$$\frac{\lambda_p \Phi_p - \lambda_p^0 \Phi_p^0}{\Delta t} \Delta x \Delta y \Delta z = \left[ \Gamma_e^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial x} \Big|_e - \Gamma_w^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial x} \Big|_w \right] \Delta y \Delta z + \left[ \Gamma_n^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial y} \Big|_n - \Gamma_s^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial y} \Big|_s \right] \Delta x \Delta z + \left[ \Gamma_f^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial z} \Big|_f - \Gamma_b^\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial z} \Big|_b \right] \Delta x \Delta y + S \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t, \quad (3.18c)$$

em que o sobrescrito zero significa que o termo deve ser avaliado no tempo anterior ao tempo de interesse, enquanto os termos sem sobrescrito são avaliados no tempo de interesse.

Faz-se necessário discretizar a equação de difusão para os vinte e sete tipos de volumes de controle (volumes de controle internos e externos), como visto na Figura 3.3.

### 3.2.2 Discretização para volumes de controle internos

Tomando-se, por exemplo, o volume de controle interno esquematizado na Figura 3.4, observa-se que o mesmo possui vizinhos a leste (E), a oeste (W), ao norte (N), ao sul (S), na frente (F) e atrás (B).



**Figura 3.4** - Volume de controle interno de ponto nodal P e seus vizinhos.

A partir da Equação (3.18c), com o termo fonte S linearizado, para uma formulação totalmente implícita, obtém-se:

$$\begin{aligned}
 (\lambda_p \Phi_p - \lambda_p^0 \Phi_p^0) \Delta x \Delta y \Delta z &= \Gamma_e^\phi \frac{\Phi_E - \Phi_P}{\Delta x_e} \Delta z \Delta y \Delta t - \Gamma_w^\phi \frac{\Phi_P - \Phi_W}{\Delta x_w} \Delta z \Delta y \Delta t \\
 &+ \Gamma_n^\phi \frac{\Phi_N - \Phi_P}{\Delta y_n} \Delta z \Delta x \Delta t - \Gamma_s^\phi \frac{\Phi_P - \Phi_S}{\Delta y_s} \Delta z \Delta x \Delta t \\
 &+ \Gamma_f^\phi \frac{\Phi_F - \Phi_P}{\Delta z_f} \Delta y \Delta x \Delta t - \Gamma_b^\phi \frac{\Phi_P - \Phi_B}{\Delta z_b} \Delta y \Delta x \Delta t + (S_c + S_p \Phi_p) \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t.
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

Dividindo-se a Equação (3.19) por  $\Delta t$  e reorganizando-se os termos, obtém-se a forma algébrica da equação de difusão tridimensional para os volumes de controle internos:

$$A_p \Phi_p = A_w \Phi_w + A_e \Phi_e + A_s \Phi_s + A_n \Phi_n + A_b \Phi_b + A_f \Phi_f + B, \quad (3.20)$$

onde  $A_p$ ,  $A_w$ ,  $A_e$ ,  $A_s$ ,  $A_n$ ,  $A_b$ ,  $A_f$  e  $B$  são dados por:

$$A_p = \lambda_p \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} + \frac{\Gamma_e^\Phi}{\Delta x_e} \Delta y \Delta z + \frac{\Gamma_w^\Phi}{\Delta x_w} \Delta y \Delta z + \frac{\Gamma_n^\Phi}{\Delta y_n} \Delta x \Delta z + \frac{\Gamma_s^\Phi}{\Delta y_s} \Delta x \Delta z + \frac{\Gamma_b^\Phi}{\Delta z_b} \Delta y \Delta x + \frac{\Gamma_f^\Phi}{\Delta z_f} \Delta y \Delta x - S_p \Delta x \Delta y \Delta z, \quad (3.21)$$

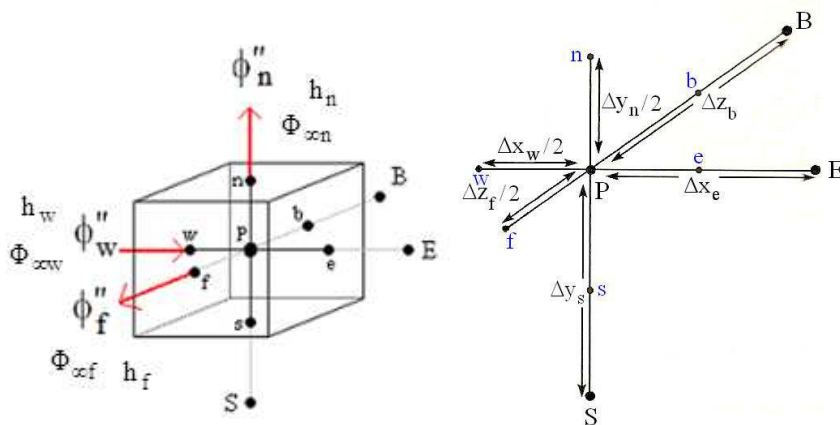
onde:

$$A_w = \frac{\Gamma_w^\Phi}{\Delta x_w} \Delta y \Delta z, \quad A_e = \frac{\Gamma_e^\Phi}{\Delta x_e} \Delta y \Delta z, \quad A_s = \frac{\Gamma_s^\Phi}{\Delta y_s} \Delta x \Delta z, \quad A_n = \frac{\Gamma_n^\Phi}{\Delta y_n} \Delta x \Delta z,$$

$$A_b = \frac{\Gamma_b^\Phi}{\Delta z_b} \Delta y \Delta x, \quad A_f = \frac{\Gamma_f^\Phi}{\Delta z_f} \Delta y \Delta x, \quad B = \frac{\lambda_p^0 \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} \Phi_p^0 + S_c \Delta x \Delta y \Delta z. \quad (3.22)$$

### 3.2.3 Discretização para um volume de controle externo: oeste-norte-frente

Os volumes de controle externos, como por exemplo, o apresentado na Figura 3.5, apresenta fronteiras com o meio externo, a oeste (W), a norte (N) e a frente (F).



**Figura 3.5** - Volume de controle oeste (W) - norte (N) - frente (F).

- **Condição de contorno oeste**

As expressões para os fluxos difusivo e convectivo são dadas pelas seguintes equações:

$$\text{Fluxo difusivo a oeste:} \quad \phi_w'' = -\Gamma_w^\phi \frac{\Phi_P - \Phi_w}{\Delta x_w / 2}, \quad (3.23)$$

$$\text{Fluxo convectivo a oeste:} \quad \phi_w'' = h_w (\Phi_{\infty w} - \Phi_w). \quad (3.24)$$

Igualando-se a Equação (3.23) com a Equação (3.24) obtém-se:

$$\Phi_w = \frac{\Phi_{\infty w} + \frac{2\Gamma_w^\phi \Phi_P}{h_w \Delta x_w}}{1 + \frac{2\Gamma_w^\phi}{h_w \Delta x_w}}. \quad (3.25)$$

Substituindo a Equação (3.25) na Eq. (3.24), obtém-se:

$$\phi_w'' = \frac{\Phi_{\infty w} - \Phi_P}{\frac{\Delta x_w}{2\Gamma_w^\phi} + \frac{1}{h_w}} \quad (3.26)$$

- **Condição de contorno norte**

Procedendo do mesmo modo que para a condição de contorno oeste, obtém-se, para a condição de contorno norte:

$$\phi_n'' = \frac{\Phi_P - \Phi_{\infty n}}{\frac{\Delta y_n}{2\Gamma_n^\phi} + \frac{1}{h_n}}. \quad (3.27)$$

- **Condição de contorno frente**

Utilizando o mesmo raciocínio empregado para as condições de contorno anteriores, obtém-se:

$$\phi_f'' = \frac{\Phi_P - \Phi_{\infty f}}{\frac{\Delta z_f}{2\Gamma_f^\Phi} + \frac{1}{h_f}}. \quad (3.28)$$

Assim, para esse volume de controle, a equação discretizada, usando a formulação totalmente implícita, pode ser escrita, a partir da Equação (3.18c), do seguinte modo:

$$\begin{aligned} (\lambda_p \Phi_P - \lambda_p^0 \Phi_P^0) \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} = \phi_w'' \Delta y \Delta z + \Gamma_e^\Phi \frac{\Phi_E - \Phi_P}{\Delta x_e} \Delta y \Delta z - \phi_n'' \Delta x \Delta z \\ - \Gamma_s^\Phi \frac{\Phi_P - \Phi_S}{\Delta y_s} \Delta x \Delta z - \phi_f'' \Delta x \Delta y - \Gamma_b^\Phi \frac{\Phi_P - \Phi_B}{\Delta z_b} \Delta x \Delta y + (S_c + S_p \Phi_P) \Delta x \Delta y \Delta z. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Levando-se em consideração as expressões para o fluxo dadas pelas Equações (3.26), (3.27) e (3.28), a Equação (3.29) resulta em:

$$\begin{aligned} (\lambda_p \Phi_P - \lambda_p^0 \Phi_P^0) \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} = \frac{\Phi_{\infty w} - \Phi_P}{\frac{\Delta x_w}{2\Gamma_w^\Phi} + \frac{1}{h_w}} \Delta y \Delta z + \Gamma_e^\Phi \frac{\Phi_E - \Phi_P}{\Delta x_e} \Delta y \Delta z + \frac{(-\Phi_P + \Phi_{\infty n})}{\frac{\Delta y_n}{2\Gamma_n^\Phi} + \frac{1}{h_n}} \Delta z \Delta x \\ - \Gamma_s^\Phi \frac{\Phi_P - \Phi_S}{\Delta y_s} \Delta x \Delta z + \frac{(-\Phi_P + \Phi_{\infty f})}{\frac{\Delta z_f}{2\Gamma_f^\Phi} + \frac{1}{h_f}} \Delta y \Delta x - \Gamma_b^\Phi \frac{\Phi_P - \Phi_B}{\Delta z_b} \Delta x \Delta y + (S_c + S_p \Phi_P) \Delta x \Delta y \Delta z. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Desta forma, obtém-se a equação de difusão discretizada para o volume de controle em estudo:

$$A_p \Phi_P = A_e \Phi_E + A_s \Phi_S + A_b \Phi_B + B, \quad (3.31)$$

onde:

$$\begin{aligned}
A_p = & \lambda_p \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} + \frac{\Gamma_e^\Phi}{\Delta x_e} \Delta y \Delta z + \frac{\Gamma_s^\Phi}{\Delta y_s} \Delta x \Delta z + \frac{\Gamma_b^\Phi}{\Delta z_b} \Delta x \Delta y - S_P \Delta x \Delta y \Delta z + \\
& + \frac{\Delta y \Delta z}{\frac{1}{h_w} + \frac{\Delta x_w}{2\Gamma_w^\Phi}} + \frac{\Delta x \Delta z}{\frac{1}{h_n} + \frac{\Delta y_n}{2\Gamma_n^\Phi}} + \frac{\Delta x \Delta y}{\frac{1}{h_f} + \frac{\Delta z_f}{2\Gamma_f^\Phi}}, \tag{3.32}
\end{aligned}$$

$$A_e = \frac{\Gamma_e^\Phi}{\Delta x_e} \Delta y \Delta z, \quad A_s = \frac{\Gamma_s^\Phi}{\Delta y_s} \Delta x \Delta z, \quad A_b = \frac{\Gamma_b^\Phi}{\Delta z_b} \Delta x \Delta y,$$

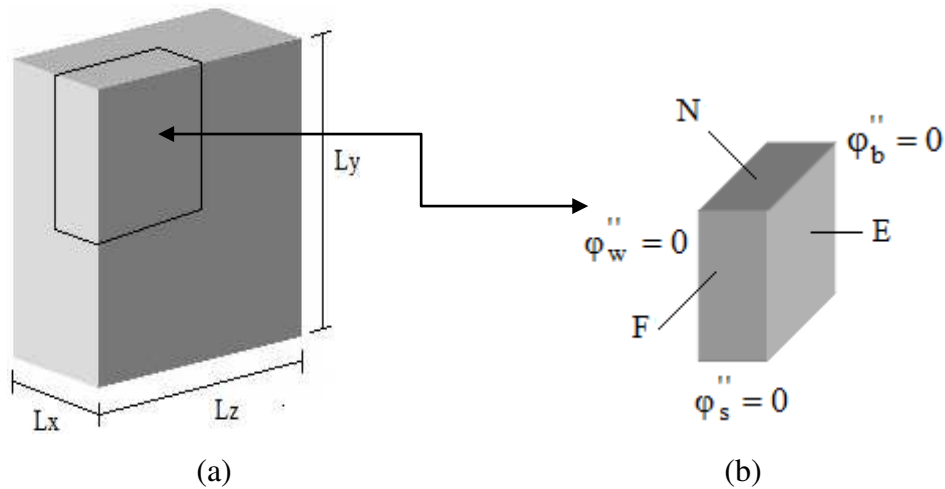
e

$$\begin{aligned}
B = & \frac{\lambda_p^0 \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} \Phi_p^0 + \frac{\Phi_{\infty w}}{\frac{\Delta x_w}{2\Gamma_w^\Phi} + \frac{1}{h_w}} \Delta y \Delta z + \frac{\Phi_{\infty n}}{\frac{\Delta y_n}{2\Gamma_n^\Phi} + \frac{1}{h_n}} \Delta x \Delta z + \\
& + \frac{\Phi_{\infty f}}{\frac{\Delta z_f}{2\Gamma_f^\Phi} + \frac{1}{h_f}} \Delta x \Delta y + S_C \Delta x \Delta y \Delta z. \tag{3.34}
\end{aligned}$$

Utilizando-se a mesma metodologia, podem-se determinar as equações discretizadas, na forma algébrica, para os volumes de controle restantes.

### 3.3 Utilização de simetria

Devido à forma geométrica do paralelepípedo ser regular, pode-se tirar proveito da condição de simetria e resolver numericamente o problema difusivo apenas para uma parte simétrica da malha, como, por exemplo, para 1/8 do sólido, conforme é mostrado na Figura 3.6.



**Figura 3.6** - Esquema utilizado para explorar a condição de simetria inerente ao paralelepípedo: (a) destaque para 1/8 do paralelepípedo; (b) parte destacada do paralelepípedo.

Neste caso de simetria, para a parte destacada na Figura 3.6 (a), por exemplo, basta impor a condição de fluxo zero para todos os volumes de controle das fronteiras oeste, sul e atrás, de acordo com o que está mostrado na Figura 3.6 (b). Para a discretização proposta, com condição de contorno do terceiro tipo, basta impor, para o pedaço mostrado na Figura 3.6,  $h_w = h_s = h_b = 0$ .

### 3.4 Determinação do valor médio contínuo para uma solução analítica

Conforme foi mencionado anteriormente, deve-se ressaltar que a variável de interesse  $\Phi$  é obtida para uma posição qualquer no interior do corpo. Em muitas situações, no entanto, há a necessidade de se obter o valor da grandeza para o corpo inteiro, o que deve ser obtido pela expressão geral:

$$\bar{\Phi} = \frac{\int \Phi(\vec{r}) dV}{\int dV}, \quad (3.35)$$

onde  $\Phi(\vec{r})$  é o valor da grandeza no volume infinitesimal  $dV$ , na posição definida pelo vetor  $\vec{r}$ .



### 3.5 Determinação do valor médio para uma solução numérica

Para se calcular o valor médio da variável de interesse, a partir da solução numérica  $e$ , portanto, no domínio computacional, torna-se necessário discretizar a Equação (3.35). O resultado da discretização é dado por:

$$\bar{\Phi} = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{N_i} \sum_{j=1}^{N_j} \sum_{k=1}^{N_k} \Phi_{ijk} \Delta V'_{ijk}, \quad (3.36)$$

com

$$V = \sum_{i=1}^{N_i} \sum_{j=1}^{N_j} \sum_{k=1}^{N_k} \Delta V'_{ijk}, \quad (3.37)$$

onde  $V$  é o volume do sólido,  $i$ ,  $j$  e  $k$  definem a posição do ponto nodal do volume de controle,  $\Delta V'_{ijk}$  é o valor do volume deste volume elementar,  $N_i$ ,  $N_j$  e  $N_k$  definem o número de volumes de controle ao longo das arestas  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente. Por outro lado, para uma malha uniforme, tem-se:

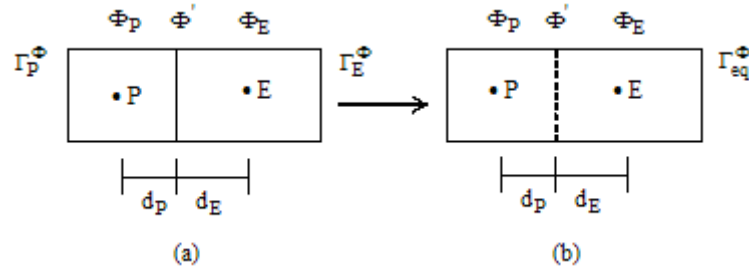
$$\Delta V'_{ijk} = \Delta x \Delta y \Delta z. \quad (3.38)$$

### 3.6 Avaliação de $\Gamma^\Phi$ nas faces dos volumes de controle

A discretização da equação de difusão requer o conhecimento dos valores de  $\Gamma^\Phi$  não no ponto nodal, mas nas faces leste, oeste, norte, sul, frente e atrás de cada volume de controle, conforme pode ser verificado através da Equação (3.19). Obviamente que, se  $\Gamma^\Phi$  for constante em todo domínio, este é o valor para todas as faces do volume de controle. Entretanto, se este parâmetro for variável, deve ser determinado para todas as faces de cada volume de controle.

Se  $\Gamma^\Phi$  for variável no domínio, a estimativa de seu valor em uma face comum a dois volumes de controle pode ser feita tomando como base a Figura 3.7. A parte (a) dessa figura apresenta um volume de controle  $P$  e o seu vizinho a leste ( $E$ ), e cada um

dos dois tem um valor específico para o coeficiente de transporte:  $\Gamma_P^\Phi$  e  $\Gamma_E^\Phi$ , respectivamente. A parte (b) da Figura 3.7 apresenta um domínio equivalente, com coeficiente de transporte constante e igual a  $\Gamma_{eq}^\Phi$  para os dois volumes de controle.



**Figura 3.7** - Dois volumes de controle com coeficientes de transporte iguais a: (a)  $\Gamma_P^\Phi$  e  $\Gamma_E^\Phi$ ; (b)  $\Gamma_{eq}^\Phi$ . Para ambas as situações, o nó P dista  $d_P$  da face comum e o nó E,  $d_E$ .

O valor de  $\Gamma_{eq}^\Phi$ , é o valor equivalente da propriedade em todo o domínio da Figura 3.7 (b) e que, portanto, é o valor de  $\Gamma^\Phi$  na face comum entre P e E. Tal valor é dado por:

$$\Gamma_{eq}^\Phi = \frac{\Gamma_P^\Phi \Gamma_E^\Phi}{(1 - f_d) \Gamma_P^\Phi + f_d \Gamma_E^\Phi}, \quad (3.39)$$

onde:

$$f_d = \frac{d_P}{d_P + d_E}, \quad (3.40)$$

em que  $d_P$  e  $d_E$  são as distâncias da interface “e” aos pontos nodais P e E, respectivamente. Nos pontos nodais,  $\Gamma^\Phi$  deve ser calculado por uma função adequada que relacione a variável de interesse  $\Phi$  em cada ponto nodal. Detalhes desta dedução podem ser vistos em Silva (2007), Silva, W. (2009) e Farias (2011).

Para o caso de a malha ser uniforme, a Equação (3.40) resulta em  $f_d = 1/2$ , já que nesse caso  $d_E = d_P$ . Consequentemente, a Equação (3.39) passa a ser dada por:

$$\Gamma_{eq}^{\Phi} = \frac{2\Gamma_P^{\Phi}\Gamma_E^{\Phi}}{\Gamma_P^{\Phi} + \Gamma_E^{\Phi}}. \quad (3.41)$$

### 3.7 Volume variável do sólido

Em um processo difusivo, tanto nos casos de aquecimento e resfriamento quanto nos casos de absorção e dessorção, em geral é observada uma variação no volume do sólido, em que tal processo ocorre ao longo do tempo. Lima (1999) e Carmo (2004) levaram em consideração esta variação ao estudar o fenômeno da difusão transiente em sólidos esferoidais prolatos e oblatos, respectivamente. Nestes trabalhos, em que foram usadas coordenadas generalizadas, a equação de difusão no domínio transformado foi discretizada para uma malha fixa, mas a consideração de variações volumétricas foi feita através da atualização da malha fixa ao longo do tempo. Como foram reportados bons resultados, a mesma consideração foi adotada no presente trabalho: a malha foi considerada fixa e, a cada passo de tempo, ela foi recalculada com base na modificação do volume, o que possibilitou calcular novos coeficientes  $A_P$ ,  $A_E$ ,  $A_W$ ,  $A_N$ ,  $A_S$ ,  $A_F$ ,  $A_B$  e  $B$  em cada instante, ao longo do processo.

Visando incluir a variação do volume nos sólidos de interesse, é necessário determinar uma expressão que descreva de forma satisfatória a relação entre o volume e o valor médio da grandeza,  $\bar{\Phi}$ . Para tal, foi considerado que a variação volumétrica pode ocorrer diferentemente nas três direções, mas sem mudar a forma geométrica do corpo. Portanto, foi necessário determinar expressões para cada uma das dimensões do sólido (NASCIMENTO, 2002; FARIAS, 2011), as quais são dadas por:

$$L_x = f_x(\bar{\Phi}), \quad (3.42a)$$

$$L_y = f_y(\bar{\Phi}), \quad (3.42b)$$

e

$$L_z = f_z(\bar{\Phi}). \quad (3.42c)$$

As funções  $f(\bar{\Phi})$  devem ser conhecidas e, em geral, são obtidas por ajuste de curvas a partir de dados experimentais.

Assim, a partir dos valores medidos experimentalmente ao longo do processo, para as dimensões do sólido, foi possível determinar as funções  $f(\bar{\Phi})$  da Equação (3.42a-c). Naturalmente, o volume do paralelepípedo, em cada atualização, foi calculado pelo produto:

$$V = L_x L_y L_z. \quad (3.43)$$

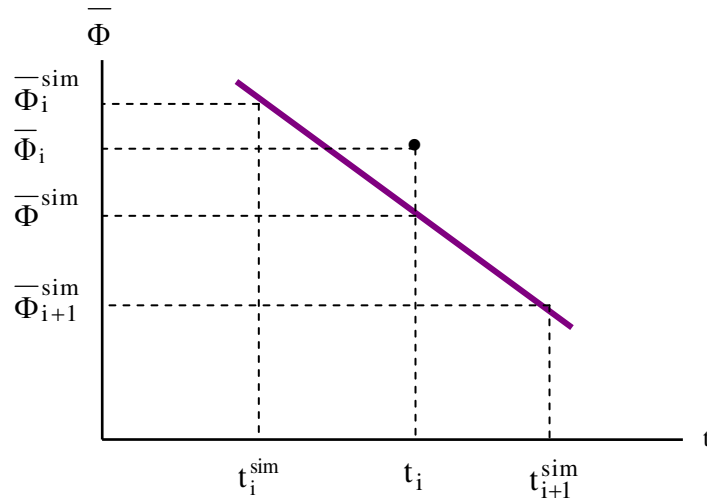
### 3.8 Cálculo do desvio padrão relativo a uma simulação numérica

Uma vez realizada uma simulação para a qual existam dados experimentais disponíveis, o desvio padrão inerente à simulação pode ser calculado como segue. Para o  $i$ -ésimo ponto experimental  $(t_i, \bar{\Phi}_i)$ , inicialmente deve ser identificado se existe um ponto da simulação com a mesma abscissa  $t_i$ . Nesse caso, o desvio  $\delta\Phi_i$  deve ser calculado diretamente da expressão (SILVA e SILVA, 1998):

$$\delta\Phi_i = \bar{\Phi}_i - \bar{\Phi}^{\text{sim}}, \quad (3.44)$$

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

Caso a abscissa  $t_i$  do ponto experimental tenha um valor que esteja entre dois valores simulados,  $t_i^{\text{sim}}$  e  $t_{i+1}^{\text{sim}}$ , a situação pode ser representada conforme o esquema apresentado na Figura 3.8.



**Figura 3.8** - Esquema para o cálculo de  $\bar{\Phi}^{\text{sim}}$  por interpolação linear.

Para a situação representada na Figura 3.8, o valor de  $\bar{\Phi}^{\text{sim}}$  pode ser calculado por interpolação linear,

$$\bar{\Phi}^{\text{sim}} = \frac{\bar{\Phi}_i^{\text{sim}} - \bar{\Phi}_{i+1}^{\text{sim}}}{t_{i+1}^{\text{sim}} - t_i^{\text{sim}}} (t_{i+1}^{\text{sim}} - t_i) + \bar{\Phi}_{i+1}^{\text{sim}}, \quad (3.45)$$

o que possibilitou a utilização da Equação (3.44) para o cálculo do desvio referente ao  $i$ -ésimo ponto experimental. Dessa forma, todos os elementos necessários para o cálculo do desvio padrão tornam-se conhecidos, desde que se estabeleça que pontos experimentais antes do primeiro ponto simulado, e também depois do último sejam, obviamente, desconsiderados em tal cálculo. Assim, supondo que todos os pontos experimentais tenham o mesmo peso estatístico, o desvio padrão foi calculado através da expressão (SILVA e SILVA, 1998)

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{(N_p - p)} \sum_{i=1}^{N_p} (\delta\Phi_i)^2}, \quad (3.46)$$

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

### 3.9 Determinação de parâmetros via otimização: Solução numérica

Além da simulação de problemas cujos parâmetros de processo são conhecidos, este trabalho tem o objetivo de possibilitar, também, a determinação de tais parâmetros a partir de dados experimentais, através do recurso da minimização de uma função objetivo. A razão disso é que em muitos problemas de secagem há a necessidade da determinação não só de uma expressão para a difusividade, mas também do valor da constante de transferência convectiva de massa em um domínio cuja cinética de secagem seja conhecida, através da medição de dados experimentais. Para tal, um algoritmo de otimização foi desenvolvido a partir dos seguintes requisitos (SILVA, 2007):

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

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 (SILVA e SILVA, 1998):

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N_p} (\delta\Phi_i)^2 \frac{1}{\sigma_i^2}, \quad (3.47)$$

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  $\sigma_i$  é o desvio padrão do valor médio de  $\Phi_i$ . Obviamente, o qui-quadrado depende de  $\bar{\Phi}^{\text{sim}}$  que, por sua vez, depende dos parâmetros de processo  $\Gamma^\Phi$  e  $h$ . Em geral,  $\Gamma^\Phi$  pode ser expresso por uma função  $f(\Phi, a, b)$  em que  $a$  e  $b$  são constantes que, juntamente com  $h$ , podem ser determinados via minimização da função objetivo.

Com relação ao algoritmo de Levenberg-Marquardt, os fatores multiplicativos para as correções dos parâmetros foram feitos iguais a 1/2 no caso da necessidade de diminuição das correções ao longo do processo iterativo, e a 2 no caso de aumento. Vale salientar que o processo iterativo ocorre até que a tolerância estipulada para as correções dos parâmetros seja atingida. Por outro lado, a sequência dos cálculos obedece à ordem definida a seguir:

Passo 1) Informe o valor inicial dos parâmetros “a”, “b” e “h”. Resolva a equação da difusão e determine o qui-quadrado;

Passo 2) Informe o valor para a correção de “h”;

Passo 3) Corrija o parâmetro “h”, mantendo os valores dos parâmetros “a” e “b” constantes. Resolva a equação da difusão e calcule o novo qui-quadrado;

Passo 4) Compare o último valor calculado para o qui-quadrado com o anterior. Se o último valor for menor, retorne ao passo 2. Caso contrário, diminua a última correção do valor de “h” e avance para o passo 5;

Passo 5) Informe o valor para a correção de “a”;

Passo 6) Corrija o parâmetro “a”, mantendo os valores dos parâmetros “b” e “h” constantes. Resolva a equação da difusão e calcule o novo qui-quadrado;

Passo 7) Compare o último valor calculado do qui-quadrado com o anterior. Se o último valor for menor, retorne ao passo 5. Caso contrário, diminua a última correção do valor de “a” e avance para o passo 8;

Passo 8) Informe o valor para a correção de “b”;

Passo 9) Corrija o parâmetro “b”, mantendo os valores dos parâmetros “a” e “h” constantes. Resolva a equação da difusão e calcule o novo qui-quadrado;

Passo 10) Compare o último valor calculado do qui-quadrado com o anterior. Se o último valor for menor, retorne ao passo 8. Caso contrário, diminua a última correção do valor de “b” e avance para o passo 11;

Passo 11) Comece um novo ciclo, voltando ao passo 2, até atingir a convergência para os parâmetros “a”, “b” e “h”.

Em cada ciclo, o valor da correção de cada parâmetro pode ser inicialmente modesto, compatível com a tolerância de convergência imposta ao problema. Então, para um determinado ciclo, em cada retorno aos passos 2, 5 ou 8, o valor da nova correção pode ser multiplicado pelo fator 2. Se a correção inicialmente informada não minimizar a função objetivo, tal valor deve ser multiplicado pelo fator -1. Note que, se a difusividade for constante, os passos 8, 9 e 10 não são necessários. Por outro lado, caso a condição de contorno não seja convectiva, o primeiro passo deixa de existir na ordem pré-estabelecida. Os valores iniciais dos parâmetros podem ser estimados através de valores obtidos para produtos similares, disponíveis na literatura, ou através de correlações empíricas.

Deve ser observado 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; SILVA, C., 2010).

### **3.10 Modelagem Computacional**

Nesta seção, foram apresentadas as metodologias para o desenvolvimento e testes, na plataforma Windows, dos componentes do *software*. Para o paralelepípedo, foi desenvolvido um *software*, incluindo a interface gráfica com o usuário. Basicamente, o *software* pode ser usado em duas situações: 1) simulação de um problema difusivo, quando os parâmetros termofísicos são conhecidos e 2) determinação dos parâmetros por otimização, quando um conjunto de dados experimentais é conhecido.



Seguindo as razões de Silva (2007), na concepção do *software* foi prevista a sua utilização por usuários iniciantes e, portanto, toda a interface do pacote computacional com o usuário deve ser simples e de fácil uso. A plataforma escolhida para o desenvolvimento do *software* foi a Windows, embora ele possa ser executado na plataforma Linux através de programas como o Winehq. A linguagem de programação utilizada foi o Fortran (CHAPMAN, 1998; LAURENCE, 2002) e a opção de programação escolhida foi a QuickWin Application (LAURENCE, 2002; SILVA et al., acessado em maio/2010). Esta é uma das opções em Fortran para o desenvolvimento de *softwares* com interface gráfica para a plataforma Windows.

Foi criado um único programa para a solução numérica, e tal programa controla todas as etapas para a solução ou otimização de problemas de difusão.

Os resultados obtidos são apresentados em forma de tabelas, gráficos e figuras, detalhando a evolução temporal da grandeza estudada.

A modelagem computacional foi implementada a partir de um conjunto de definições que possibilitaram a solução completa do problema de difusão. O primeiro requisito foi a definição da malha. Para a sua geração, se fez necessário informar as dimensões do paralelepípedo e o número de volume de controles a serem estabelecidos para cada aresta. Conhecida a malha, os parâmetros físicos, e as condições iniciais e de contorno, o problema pode, então, ser resolvido.

Devido ao fato do *software* desenvolvido simular problemas difusivos com propriedades termofísicas tanto constantes quanto variáveis, há a necessidade da informação de expressões matemáticas, por parte do usuário, indicando como um parâmetro varia em função de outros. As expressões são lidas através de caixas de diálogo como variáveis literais e depois devem ser convertidas em funções matemáticas para poderem ser avaliadas. Entretanto, os estúdios de programação em Fortran não disponibilizam a ferramenta conversora de variáveis literais em funções matemáticas. Por isso, foi feita uma pesquisa na Internet, em busca de avaliadores de expressões (*function parser*) para a linguagem de programação Fortran, pois tal linguagem foi utilizada em todo o pacote computacional desenvolvido.

### 3.10.1 Avaliadores de expressões e a linguagem Fortran

Conforme foi mencionado, em *softwares* com interface gráfica há a necessidade de que uma variável literal 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*. Conforme Silva et al. (2005) observam, repetidas buscas na Internet indicaram que apenas três avaliadores de expressões, também denominados genericamente por *function parser*, foram desenvolvidos, em código aberto, para a linguagem Fortran. Um desses avaliadores foi desenvolvido na Austrália por Midgley (2002). Mas o *parser* australiano, embora seja facilmente incorporado a um programa desenvolvido em Fortran, e útil em muitas aplicações, no entanto é lento para o propósito requerido: solução transiente da equação de difusão. Como a simulação da secagem de um corpo poroso requer um grande esforço computacional, o código para a avaliação de parâmetros variáveis deve ser eficiente e otimizado, devido à rapidez requerida. O segundo *parser* em código aberto disponível na Internet foi desenvolvido na Alemanha por Schmehl (2003). Embora tal código seja mais rápido que o primeiro, também não foi, a priori, considerado adequado para o *software* a ser desenvolvido. O terceiro *parser* foi desenvolvido no Brasil, por Silva et al. (2005).

### 3.10.2 Análise comparativa

Foi feita uma análise comparativa entre o *parser* desenvolvido por Silva et al. (2005) e os dois outros em código aberto, disponíveis na Internet (MIDGLEY, 2002; SCHMEHL, 2003). O resultado completo dos testes realizados está disponível no link <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/functionparser.htm>, e também no próprio artigo de Silva et al. (2005). Os testes consistiram na realização de cinco milhões de iterações para vinte e cinco expressões distintas, com a medição do tempo que cada avaliador gastou para realizar tal tarefa. Os testes foram realizados num computador Intel™ Pentium III, 128 Mb de memória RAM. A compilação foi feita no estúdio Compaq Visual Fortran (CVF) 6.6, utilizando-se a opção de programação QuickWin Application. O tempo gasto para o cálculo de cada expressão devidamente compilada também foi medido, para que se tenha uma noção do quão lento é um *parser* em Fortran, em comparação com o menor tempo possível, que é o da expressão compilada. A diferenciação na performance dos avaliadores foi baseada unicamente no tempo gasto para a execução

das tarefas porque, como esperado, os resultados numéricos de todos eles foram equivalentes, e compatíveis com o resultado numérico da expressão compilada.

Após os testes para a escolha do *parser*, o código desenvolvido por Silva et al. (2005) foi acoplado ao código fonte do *software* em desenvolvimento para a equação de difusão referente ao paralelepípedo.

### 3.10.3 Interface gráfica

Para que um número maior de usuários possa usar o *software* desenvolvido, a comunicação deverá ser feita em Inglês. Tal comunicação deverá ser estabelecida através dos seguintes menus: “Parallelepiped”, “General”, “Information” e “Exit”. O primeiro menu contém os seguintes itens: “New Dataset”, “Open Dataset”, “Simulate”/”Optimize e “Results”. Já o segundo menu oferece outras opções para o usuário, e contém os seguintes itens: “Graph 2D”, “Graph 3D”, “Calculator of the Windows” e “Calculator of this software”. O terceiro menu contém os itens: “Help”, “Home page”, “Send E-mail” e “About”. Por último, o menu “Exit” possibilita o encerramento do *software*. Deve ser mencionado que foi criada uma subrotina que detecta erros matemáticos, em substituição à subrotina *default*, “Matherrq”, posto que esta última, apesar de informar um erro matemático, quando ele é detectado, encerra o aplicativo, o que não é desejado para o *software* desenvolvido, já que ele deve ser executado em laço infinito e apenas deve ser encerrado pelo usuário.

### 3.10.4 Validação do *solver* desenvolvido para o paralelepípedo

Para validar o *software* desenvolvido, foram feitas análises de consistência e de coerência de resultados. Numa segunda etapa, foram realizadas simulações para as quais uma solução, analítica ou numérica, seja conhecida. Em seguida foi feita a comparação de resultados.

Os parâmetros de processo de algumas das situações físicas analisadas são fictícios, e foram estabelecidos com o único propósito de comparar os resultados obtidos neste trabalho com os resultados obtidos através de soluções analíticas ou por outros *softwares*. Outros parâmetros de processo foram extraídos da literatura e os

resultados lá obtidos foram comparados com aqueles obtidos no presente trabalho. Em todos os testes, as unidades dos valores de parâmetros utilizados são pertencentes ao Sistema Internacional (SI), a menos de uma indicação ao contrário. Para a solução numérica proposta, os sistemas de equações provenientes da discretização da equação de difusão foram resolvidos via Gauss-Seidel, sendo imposta uma tolerância de  $1 \times 10^{-8}$  para a variável genérica calculada em cada volume de controle.

Gráficos de contorno devem ser utilizados para dar uma indicação visual dos resultados obtidos. Para tal, foi utilizado um programa denominado Contour Plot, desenvolvido por Silva (2010), e disponível no seguinte endereço eletrônico (<http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/Contour.zip>), que pode ser utilizado para uma geometria bidimensional qualquer, cuja malha seja conhecida. Já gráficos 2D, representando os transientes de soluções analíticas e numéricas ao longo do tempo, foram traçados com a utilização do LAB Fit Curve Fitting Software (SILVA e SILVA, 2009c).

### **3.11 Aplicação do *software* desenvolvido na secagem de sólidos**

As possibilidades de aplicação do *software* desenvolvido são bastante diversificadas, podendo ser utilizado em qualquer situação que envolva o transporte da grandeza por meio da difusão em sólidos na forma de paralelepípedo. Como exemplo de aplicações possíveis podem ser citados a transferência de massa, a condução de calor, secagem de sólidos porosos, aquecimento e resfriamento, dentre outros. No entanto, com o intuito de testar os modelos propostos, são analisados, neste trabalho, dois conjuntos de dados experimentais referentes à secagem:

- a) dados experimentais obtidos por Mellado (2007) referentes à secagem de madeira serrada (*Pinus elliottii* Engelm.);
- b) dados experimentais referentes à secagem de peças cerâmicas na forma de placas que podem ser utilizadas em revestimento de alvenaria.

### **3.11.1 Secagem de madeira**

#### **3.11.1.1 Dados experimentais da cinética de secagem de madeiras extraídos da literatura**

Em seu estudo, Mellado (2007) usou madeira serrada com 20 anos de idade, obtida através de corte tangencial. A densidade da matéria seca foi de  $405 \text{ kg m}^{-3}$ . A amostra da madeira, com dimensões  $36 \text{ mm} \times 100 \text{ mm} \times 745 \text{ mm}$ , foi colocada em uma câmara com ar forçado à temperatura de  $40,0^\circ \text{ C}$ , com umidade relativa do ar ambiente de 40% e com velocidade de  $3 \text{ m s}^{-1}$ . Os valores do teor de umidade médio inicial e de equilíbrio são 1,213 e 0,070, respectivamente.

No experimento, Mellado (2007) não determinou as incertezas experimentais dos teores de umidade médios, e, por isso, foi atribuído o valor 1 para essas incertezas. Por outro lado, os pares  $(t, \bar{M})$  para todos os pontos da cinética de secagem foram obtidos pela digitalização do gráfico que representa esta cinética.

Para as condições de secagem empregadas no experimento, o modelo de difusão líquida parece ser razoável, apesar de uma possível anisotropia e heterogeneidade do meio. Neste trabalho, admite-se que essas características ocorrem em uma escala pequena e pode, portanto, ser descartada, bem como o encolhimento (LIU e SIMPSON 1996; DINCER, 1998; BARONAS et al., 1999; LIU e SIMPSON, 1999; BARONAS et al., 2001; KULASIRI e WOODHEAD, 2005; RICARDEZ et al., 2005; OLEK e WERES, 2007).

#### **3.11.1.2 Modelos para a descrição da cinética de secagem de madeira**

Visando à simulação da cinética de secagem de madeira a partir de dados experimentais conhecidos, os seguintes modelos (sem considerar encolhimento) foram analisados neste trabalho:

- Modelo 1: modelo unidimensional com condição de contorno do primeiro tipo;

- Modelo 2: modelo unidimensional com condição de contorno do terceiro tipo;
- Modelo 3: modelo bidimensional com condição de contorno do terceiro tipo;
- Modelo 4: modelo tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo.

Deve-se salientar que o Modelo 4, proposto é o mais próximo da situação física a ser investigada, dentre os quatro modelos estudados.

Para a descrição da secagem através de soluções analíticas, todos os parâmetros envolvidos devem ser constantes. Usando soluções numéricas, tal imposição não é necessária.

### **3.11.2 Secagem de materiais cerâmicos**

#### **3.11.2.1 Dados experimentais da cinética de secagem de materiais cerâmicos**

Foi feito um estudo de caso usando resultados experimentais da secagem de peças cerâmicas previamente moldadas em placas que podem ser usadas como revestimento de alvenaria. Vale salientar que a aplicação do *software* desenvolvido na análise destes dados se constitui em uma contribuição original do presente trabalho.

#### **3.11.2.2 Matéria-prima**

Para a fabricação das placas de revestimento, a matéria-prima utilizada foi uma argila vermelha, oriunda do município de Parelhas, localizada no interior do estado do Rio Grande do Norte, Brasil. Inicialmente, a amostra foi seca em estufa a uma temperatura de 110 °C, desintegrada em moinho de bolas, peneirada em malha nº 80 (180 µm) e caracterizada, em termos de composição química e distribuição de tamanho das partículas. Uma porção da amostra de argila utilizada é apresentada na Figura 3.9.



**Figura 3.9** - Matéria prima: Amostra de argila vermelha oriunda do município de Parelhas/RN.

Os ensaios foram realizados no Laboratório de Caracterização de Materiais, da Unidade Acadêmica de Engenharia de Materiais do Centro de Ciências e Tecnologia da Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, Brasil.

A Tabela 3.3 apresenta os componentes químicos da argila com seus respectivos percentuais de composição.

**Tabela 3.3** - Composição química da argila.

Componentes	SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	MgO	K <sub>2</sub> O	CaO	TiO <sub>2</sub>	P.F.*	Outros
Composição química (%)	41,80	22,09	10,43	3,79	2,69	1,25	1,00	16,32	0,63

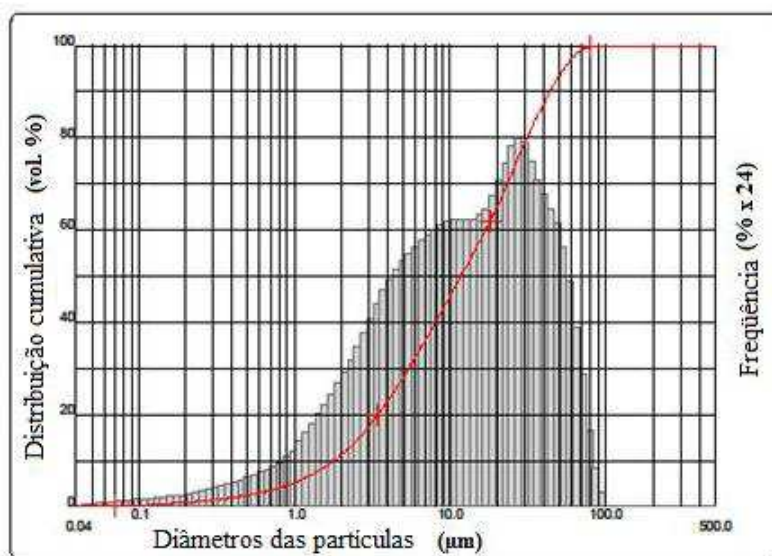
\*Perda ao Fogo

Através de uma inspeção da Tabela 3.3, observa-se que o material argiloso apresenta uma composição típica, sendo constituída principalmente de sílica (41,80%) e alumínio (22,09%), possuindo outros constituintes com percentuais menores como, por exemplo, K<sub>2</sub>O (2,69%). A quantidade de Cálcio e Magnésio presentes na argila são 1,25 e 3,79%, respectivamente. O teor de Óxido de Ferro (Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) presente na matéria prima apresenta um percentual de 10,43%, o que é uma composição típica para classificar a amostra como argila vermelha.

Para realização da caracterização granulométrica, foi realizado o ensaio por difração a laser de acordo com as instruções operacionais do granulômetro Cilas 1064

LD (2007). Uma descrição detalhada da metodologia utilizada pode ser encontrada em Silva, J. (2009) e Almeida (2009).

A distribuição granulométrica da argila vermelha pode ser observada no gráfico da Figura 3.10, indicando que a matéria prima constituinte do material apresenta uma faixa de distribuição granulométrica variando de 0,1 a 100  $\mu\text{m}$ , com  $D_{10}$  de 1,78  $\mu\text{m}$ ,  $D_{50}$  de 11,69  $\mu\text{m}$ ,  $D_{90}$  de 44,04  $\mu\text{m}$ , e um diâmetro médio de 17,90  $\mu\text{m}$ .



**Figura 3.10** - Distribuição granulométrica da argila e curva cumulativa.

Os ensaios para a obtenção dos dados experimentais foram realizados no Laboratório de Análises Mineraias da Unidade Acadêmica de Engenharia de Materiais da Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, Brasil.

### 3.11.2.3 Conformação e secagem das placas de revestimento

A metodologia experimental empregada nesta pesquisa foi baseada nas experiências realizadas por Almeida (2009), Silva, J. (2009) e Farias (2011) e foi dividida em dois estágios:

- a) a conformação da massa plástica em placas de revestimento;
- b) a secagem desse material para várias temperaturas distintas.



### 3.11.2.3.1 Preparação e conformação da massa

O primeiro estágio foi desenvolvido no Laboratório de Beneficiamento e Processamento de Materiais (LBPM) da Unidade Acadêmica de Engenharia de Materiais da Universidade Federal de Campina Grande. O pó de cerâmica foi umidificado uniformemente com uma quantidade de água aproximada de 20%, suficiente para adequar a mistura ao processo de extrusão, conforme Figura 3.11.



**Figura 3.11** - Umidificação da amostra de argila.

No intuito de melhorar a plasticidade da amostra, ela foi colocada em um saco plástico devidamente fechado e deixada em repouso por um período de 24 horas, conforme Figura 3.12.



**Figura 3.12** - Massa umidificada em descanso.

Decorrido esse prazo, a massa foi retirada do saco (Figura 3.13) e colocada para conformação numa extrusora de laboratório, da marca Verdés, referência 051, série 0023, ano de fabricação 1999 na cidade de Itu, São Paulo.



**Figura 3.13** - Massa pronta para ser colocada na extrusora.

Na Figura 3.14 é apresentada a vista lateral da extrusora usada na fabricação das placas cerâmicas de revestimento.



**Figura 3.14** - Vista lateral da extrusora usada na conformação das placas cerâmicas de revestimento.

Após a extrusão, o produto foi cortado manualmente em diversos corpos de prova, com dimensões previamente definidas. Uma amostra da placa de revestimento, imediatamente após o corte e secagem, é mostrada na Figura 3.15.



**Figura 3.15** - Amostra do corpo de prova na forma de placa cerâmica para revestimento de alvenarias, após a secagem e antes da sinterização.

Devido ao fato do foco principal deste estudo ser a secagem, em si, não houve muito rigor quanto às especificações de características geométricas relativas à precisão das dimensões das peças, de forma a proporcionarem encaixes perfeitos entre si. Mesmo assim, houve a realização de uma inspeção para eliminação das peças defeituosas, e cada corpo de prova foi individualmente embalado em sacos plásticos vedados. O procedimento foi necessário para evitar perda de umidade. Em seguida, as amostras foram submetidas ao processo de secagem.

#### **3.11.2.3.2 Secagem das placas de revestimento**

A etapa da secagem foi realizada no Laboratório Experimental de Térmica e Fluidos (LETF), da Unidade Acadêmica de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Campina Grande.

O instrumento utilizado para acompanhar as medidas da temperatura e da umidade relativa do ar ambiente foi um higrômetro digital da ICEL, modelo HT 208, série 3126, apresentado na Figura 3.16. Essas medidas foram efetuadas em vários instantes de tempo, desde o início até o final de todo processo de secagem.



**Figura 3.16** - Higrômetro digital.

Os valores obtidos para a temperatura e para a umidade relativa do ar ambiente foram respectivamente 26,0 °C e 75%, em média.

Imediatamente antes de colocar os corpos de prova na estufa, foram medidas as massas e as dimensões (comprimento, largura e espessura) de cada amostra. Para a medida das dimensões foi utilizado um paquímetro digital TDS marca Digimess, modelo 100.174L, com uma resolução de 0,01 mm e fundo de escala 150 mm, conforme a Figura 3.17.



**Figura 3.17** - Paquímetro digital.

A pesagem da massa da amostra foi obtida através de uma balança digital da marca Marte, modelo AL 500C, série 283618 e ano de fabricação 2004, com uma resolução de 0,001 g e capacidade máxima de 500 g. A Figura 3.18 ilustra a balança digital usada durante a pesagem dos corpos de prova.



**Figura 3.18** - Balança digital utilizada nos experimentos.

Após o procedimento inicial de medidas, as placas cerâmicas foram finalmente colocadas em uma estufa com circulação mecânica de ar e controlador digital de temperatura, modelo 320E da FANEM, fabricada em São Paulo, Brasil. Conforme a Figura 3.19.



**Figura 3.19** - Estufa de circulação mecânica de ar.

As secagens foram realizadas para diferentes temperaturas de 50,0, 60,0, 70,0, 80,0 e 90,0 °C. A partir do momento em que as amostras foram colocadas na estufa, as massas foram pesadas e obtidas suas dimensões em intervalos de tempo que variaram de 4 a 5 minutos no início da secagem até cerca de 1 ou 2 h no final do processo. As variações no intervalo de tempo foram diferentes para cada temperatura de secagem. Este procedimento aconteceu até que a massa atingisse o seu valor de equilíbrio. Ao final de cada secagem, a temperatura da estufa foi regulada em 105 °C e os corpos de prova lá permaneceram por 24 h, possibilitando a determinação da massa seca. Convém ressaltar que não foram observadas trincas ou outros defeitos nas placas de revestimento em nenhuma temperatura de secagem.

No Capítulo 4 foram realizados os seguintes testes para validação do programa desenvolvido: Solução numérica para o paralelepípedo: testes de consistência; Solução numérica para o paralelepípedo: simetria; Teste de coerência; Validação do *solver* usando solução analítica da equação de difusão; Validação do *solver* desenvolvido via soluções numéricas: distribuição espacial em uma parede infinita; Validação do *solver* considerando dimensões e difusividade variáveis.

## CAPÍTULO 4

### RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foram realizados estudos experimentais e teóricos (analíticos e numéricos), relativos ao processo da difusão transiente em sólidos na forma de paralelepípedos. Além de descrever problemas de difusão usando soluções analíticas, os estudos teóricos contidos neste trabalho resultaram no desenvolvimento de um *software* para resolver numericamente a equação de difusão tridimensional, em coordenadas cartesianas, usando a condição de contorno de Cauchy. Para a validação do *solver* desenvolvido, os resultados obtidos foram comparados com resultados oriundos de outras soluções disponíveis na literatura para a equação de difusão, tanto analíticas quanto numéricas.

Como aplicações, os resultados dos estudos desenvolvidos foram utilizados para analisar o comportamento da secagem de madeira serrada (*Pinus elliottii* Engelm), através de dados extraídos da literatura (MELLADO, 2007).

Foram realizados experimentos sobre a secagem de materiais cerâmicos moldados na forma de placas que podem ser utilizadas em revestimento de alvenaria. Para este estudo, foram coletados dados experimentais da cinética de secagem das placas em várias temperaturas distintas. As ferramentas desenvolvidas neste trabalho também são usadas na descrição do processo de secagem das placas cerâmicas.

#### 4.1 Secagem de madeira usando soluções analíticas

As informações sobre as condições de secagem de madeira (*Pinus elliottii* Engelm) estão disponíveis, em detalhes, em Mellado (2007). Os dados da cinética de secagem são apresentados na Tabela 4.1.

**Tabela 4.1** - Dados experimentais relativos à cinética de secagem da madeira para

T = 40 °C.

t (h)	$\bar{M}$ (bs)
0,000	1,213
8,257	0,9645
15,96	0,8080
24,22	0,6549
40,18	0,4235
48,17	0,3519
63,85	0,2666
71,83	0,2392
88,07	0,1945
95,78	0,1773
111,7	0,1565
120,0	0,1427

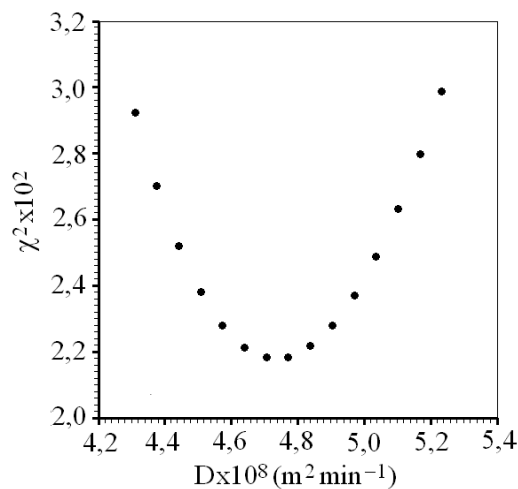
Para comparar os quatro modelos descritos no subitem 3.11.1.2, cada um deles foi usado para descrever os dados experimentais da cinética de secagem de madeira serrada.

Os resultados obtidos são apresentados a seguir.



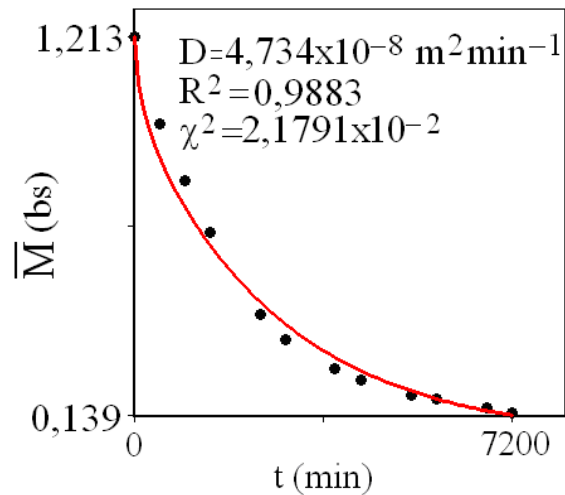
#### 4.1.1 Modelo 1: unidimensional com condição de contorno do primeiro tipo

A condição de contorno do primeiro tipo, muitas vezes, é encontrada na literatura para descrever a cinética de secagem de madeira (KULASIRI e WOODHEAD 2005; RICARDEZ et al., 2005). No entanto, essa condição de contorno é menos usual do que a condição de contorno convectiva para este tipo de produto. Para um conjunto de dados experimentais de secagem de madeira serrada ( $L_x = 0,036$  m de espessura), utilizando o algoritmo de otimização descrito no subitem 3.1.3, juntamente com a Equação (2.6), pode-se estabelecer a relação entre o qui-quadrado e a difusividade, conforme pode ser observado na Figura 4.1, nas vizinhanças do ponto ótimo.



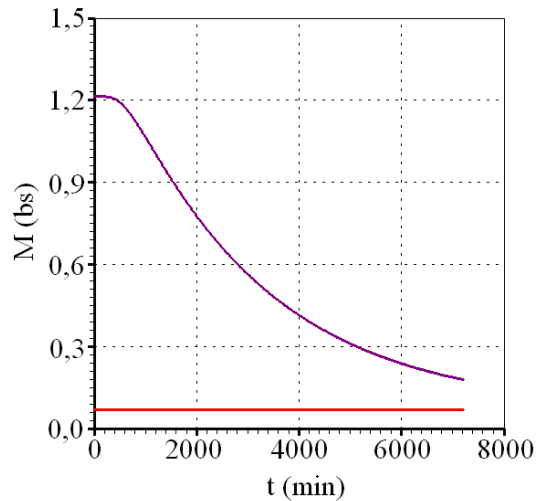
**Figura 4.1** - Modelo 1: qui-quadrado versus difusividade nas vizinhanças do ponto ótimo.

O valor para a difusividade, determinado pelo algoritmo de otimização, foi  $D = 7,890 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  ( $D = 4,734 \times 10^{-8} \text{ m}^2 \text{ min}^{-1}$ ), e os indicadores estatísticos foram:  $R^2 = 0,9883$  e  $\chi^2 = 2,1791 \times 10^{-2}$ . Usando a Equação (2.6) e o valor determinado para a difusividade, a cinética de secagem pode ser simulada, junto com os pontos experimentais, e tal cinética é apresentada na Figura 4.2. A inspeção visual dessa figura, bem como os indicadores estatísticos, permitem afirmar que os resultados obtidos para o Modelo 1 não são muito bons.



**Figura 4.2** - Cinética de secagem obtida através do Modelo 1 (unidimensional com condição de contorno de primeiro tipo).

Usando a Equação (2.3) e o valor obtido para a difusividade, pode-se determinar o teor de umidade no centro da parede infinita como função do tempo, e isso pode ser observado na Figura 4.3, que mostra também o teor de umidade nos contornos.



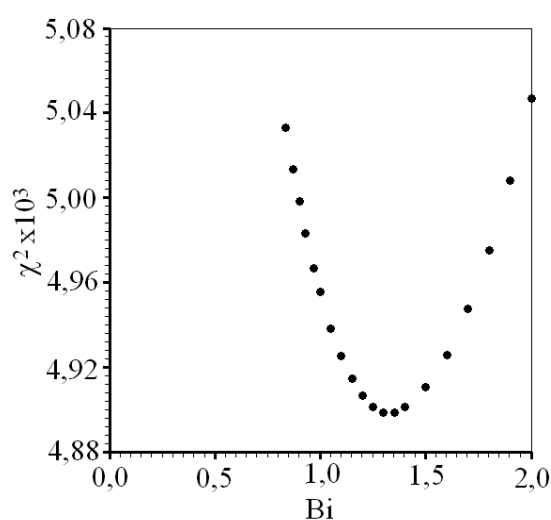
**Figura 4.3** - Evolução temporal do teor de umidade: no centro (linha superior) e nos contornos (linha inferior) para condição de contorno do primeiro tipo.

Para o Modelo 1, a maior diferença entre os teores de umidade no centro e na fronteira ocorre no início do processo de secagem ( $t = 0$ ) e é igual a  $(M_0 - M_{eq})$ .

Observa-se que esse modelo é muito simplificado e, para a secagem investigada, apenas o fluxo radial foi computado.

#### 4.1.2 Modelo 2: unidimensional com condição de contorno do terceiro tipo

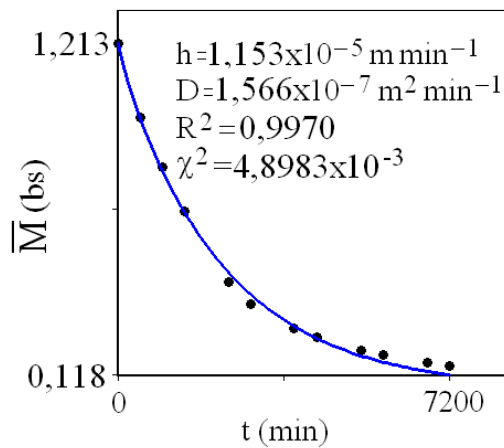
Para uma parede infinita com condição de contorno do terceiro tipo, a utilização do algoritmo de otimização descrito no subitem 3.1.4, juntamente com a Equação (2.12), permite determinar a relação entre o qui-quadrado e o número de Biot (Bi), como pode ser observado na Figura 4.4, nas vizinhanças do ponto ótimo.



**Figura 4.4** - Modelo 2: qui-quadrado versus número de Biot nas vizinhanças do ponto ótimo.

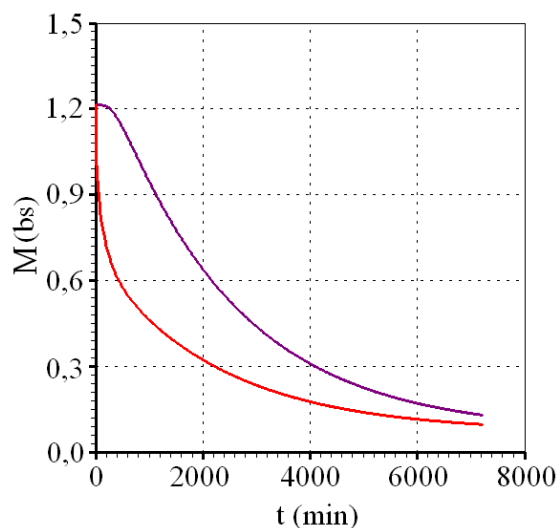
Para o Modelo 2, os valores para a difusividade efetiva da água e para o coeficiente de transferência convectivo de massa, determinados pelo algoritmo de otimização foram, respectivamente,  $D = 2,610 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  ( $D = 1,566 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ min}^{-1}$ ), e  $h = 1,922 \times 10^{-7} \text{ m s}^{-1}$  ( $h = 1,153 \times 10^{-5} \text{ m min}^{-1}$ ). O número de Biot foi 1,3250 e os indicadores estatísticos foram:  $R^2 = 0,9970$  e  $\chi^2 = 4,8983 \times 10^{-3}$ .

Usando a Equação (2.12) e os valores determinados para D e h, a cinética de secagem pode ser simulada, como ilustra a Figura 4.5.



**Figura 4.5** - Cinética de secagem obtida com o Modelo 2 (unidimensional com condição de contorno de terceiro tipo).

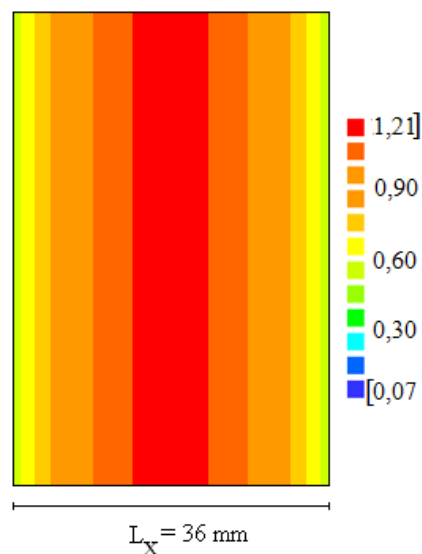
De acordo com os resultados obtidos observa-se que, para o Modelo 2, os indicadores estatísticos são muito melhores do que aqueles obtidos para Modelo 1. Particularmente, o qui-quadrado do Modelo 2 foi reduzido em mais de quatro vezes em comparação com o qui-quadrado referente ao Modelo 1. Por outro lado, com a Equação (2.9) pode-se determinar o teor de umidade nos contornos e no centro da parede infinita em função do tempo, como se observa na Figura 4.6.



**Figura 4.6** - Evolução temporal do teor de umidade no centro (linha superior) e nos contornos (linha inferior) para condição de contorno do terceiro tipo.

Através de uma inspeção da curva inferior na Figura 4.6 é possível afirmar que nos instantes iniciais da secagem, o teor de umidade cai muito rapidamente nos contornos, mas se observa que há uma resistência ao fluxo de água. Depois dos instantes iniciais, a redução do teor de umidade na fronteira é mais lento do que no início. A partir dessas observações e dos resultados obtidos, parece claro que a condição de contorno adequada para o processo de secagem é a condição de contorno convectiva (LIU e SIMPSON, 1996; DINCER, 1998; LIU e SIMPSON, 1999; BARONAS et al., 1999; BARONAS et al., 2001; OLEK e WERES, 2007).

O conhecimento da diferença entre o teor de umidade no centro e nos contornos da parede infinita é importante, porque essa diferença causa tensões que podem danificar a madeira. A maior diferença, que é igual a 0,560 bs (1,146 bs no centro e 0,586 bs nos contornos), aparece em  $t = 472$  min. Nesse instante, usando a Equação (2.9) e os valores obtidos para D e h, a distribuição de umidade na parede infinita pode ser observada na Figura 4.7.



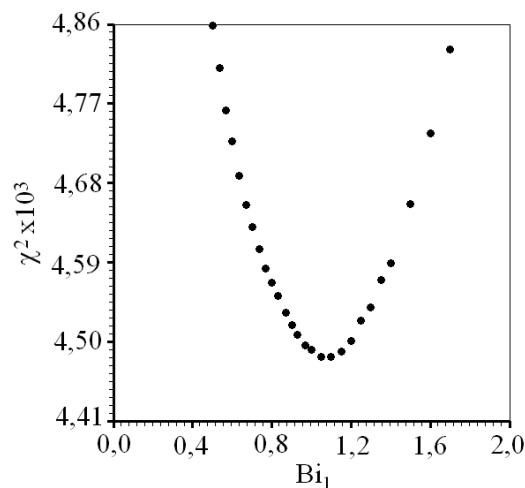
**Figura 4.7** - Distribuição do teor de umidade em  $t = 472$  min determinada através do Modelo 2 (unidimensional com condição de contorno do terceiro tipo).

Obviamente, a distribuição do teor de umidade no interior da parede infinita pode ser diferente daquela apresentada na Figura 4.7, se as hipóteses estabelecidas no item 3.1 não forem totalmente satisfeitas. Mas, pelo menos, a distribuição apresentada

serve como uma primeira ideia em relação ao processo investigado. Por outro lado, deve-se observar, mais uma vez, que apenas o fluxo radial foi computado.

#### 4.1.3 Modelo 3: bidimensional com condição de contorno do terceiro tipo

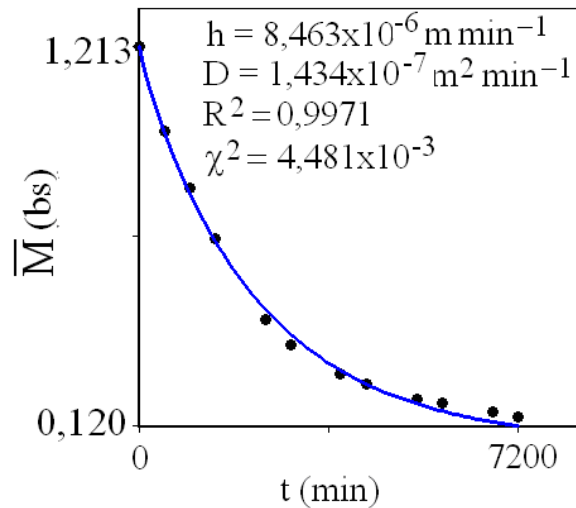
A fim de analisar o efeito geométrico, foi considerado um modelo bidimensional, com  $L_x = 0,036$  m e  $L_y = 0,100$  m. Neste caso, o algoritmo de otimização descrito no subitem 3.1.4, juntamente com a Equação (2.15), permite determinar a relação entre o qui-quadrado e o número de Biot ( $Bi_1$ ), como pode ser observado na Figura 4.8, nas vizinhanças do ponto ótimo.



**Figura 4.8** - Modelo 3: qui-quadrado versus número de Biot nas vizinhanças do ponto ótimo.

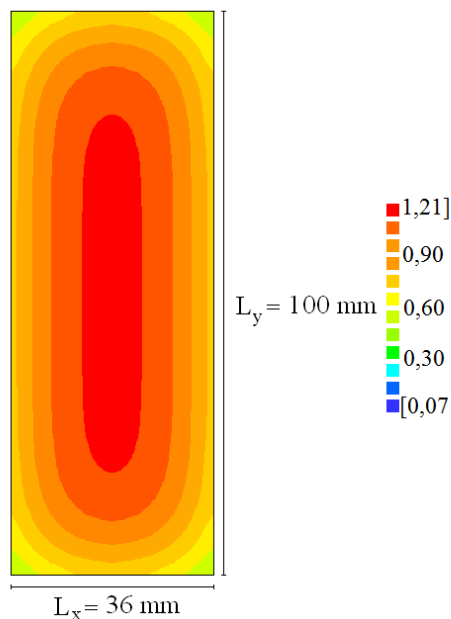
Utilizando o Modelo 3, os valores determinados por otimização para a difusividade efetiva de água e para o coeficiente de transferência convectivo de massa, foram, respectivamente,  $D = 2,390 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  ( $D = 1,434 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ min}^{-1}$ ) e  $h = 1,410 \times 10^{-7} \text{ m s}^{-1}$  ( $h = 8,463 \times 10^{-6} \text{ m min}^{-1}$ ). O número de Biot foi 1,0625 e os indicadores estatísticos foram:  $R^2 = 0,9971$  e  $\chi^2 = 4,4814 \times 10^{-3}$ .

Usando a Equação (2.15) e os valores determinados para a difusividade efetiva de massa  $D$  e para o coeficiente de transferência convectivo de massa  $h$ , a cinética de secagem pode ser simulada, conforme se observa na Figura 4.9.



**Figura 4.9** – Cinética de secagem determinada usando o Modelo 3 (bidimensional com condição de contorno de terceiro tipo).

Usando a Equação (2.14) para determinar a distribuição do teor de umidade no interior do retângulo, em  $t = 472 \text{ min}$ , tem-se a distribuição apresentada na Figura 4.10.

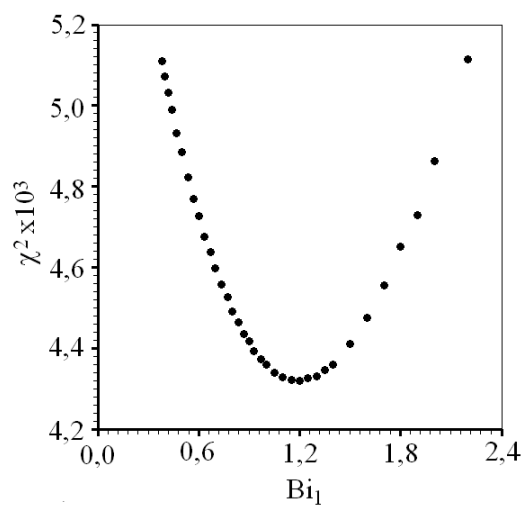


**Figura 4.10** - Distribuição do teor de umidade em  $t = 472 \text{ min}$  determinada pelo Modelo 3 (bidimensional com condição de contorno do terceiro tipo).

Analisando a Figura 4.10, é possível concluir que o processo de secagem ocorre mais rapidamente nos cantos do que na parte central do retângulo. Por outro lado, para o caso bidimensional, observa-se que os fluxos radial e tangencial foram computados.

#### 4.1.4 Modelo 4: tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo

Um modelo tridimensional dado por um paralelepípedo com lados  $L_x = 0,036$  m,  $L_y = 0,100$  m e  $L_z = 0,745$  m foi considerado, a fim de prosseguir com a análise do efeito geométrico. Isto significa que a dimensão na direção longitudinal, isto é, ao longo das fibras, foi agora incluída. Neste caso, o algoritmo de otimização descrito no subitem 3.1.4 acoplado à Equação (3.9) permite determinar a relação entre o qui-quadrado e número de Biot ( $Bi_1$ ), como pode ser observado na Figura 4.11, nas vizinhanças do ponto ótimo.

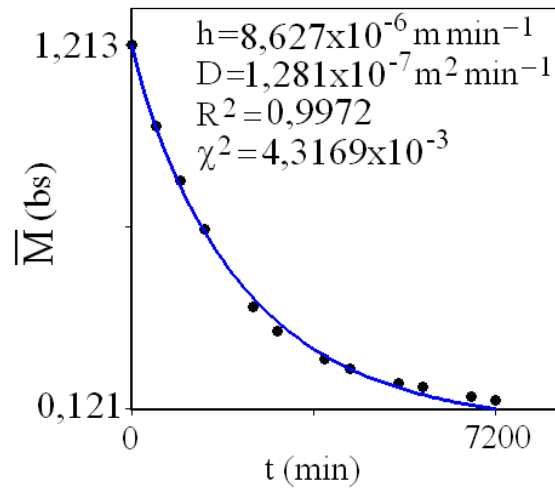


**Figura 4.11** - Modelo 4: qui-quadrado versus número de Biot nas vizinhanças do ponto ótimo.

Para o Modelo 4, os valores para a difusividade efetiva de água e do coeficiente de transferência convectivo de massa, determinados por otimização foram, respectivamente,  $D = 2,135 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  ( $D = 1,281 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ min}^{-1}$ ) e  $h = 1,438 \times 10^{-7} \text{ m s}^{-1}$  ( $h = 8,627 \times 10^{-6} \text{ m min}^{-1}$ ). O número de Biot foi 1,2125 e os indicadores estatísticos foram:  $R^2 = 0,9972$  e  $\chi^2 = 4,3169 \times 10^{-3}$ .

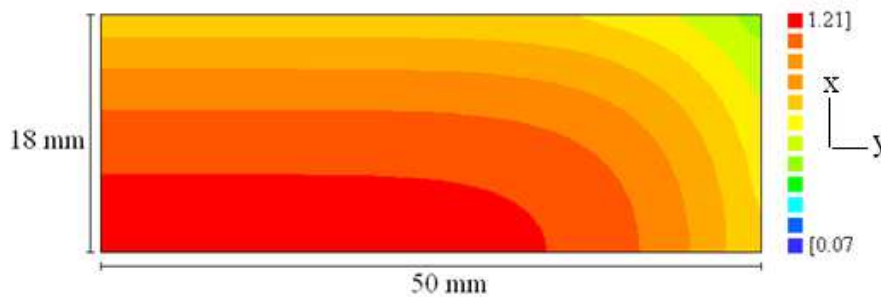
Usando a Equação (3.9) e os valores determinados para  $D$  e  $h$ , a cinética de secagem pode ser simulada, como é mostrada na Figura 4.12.





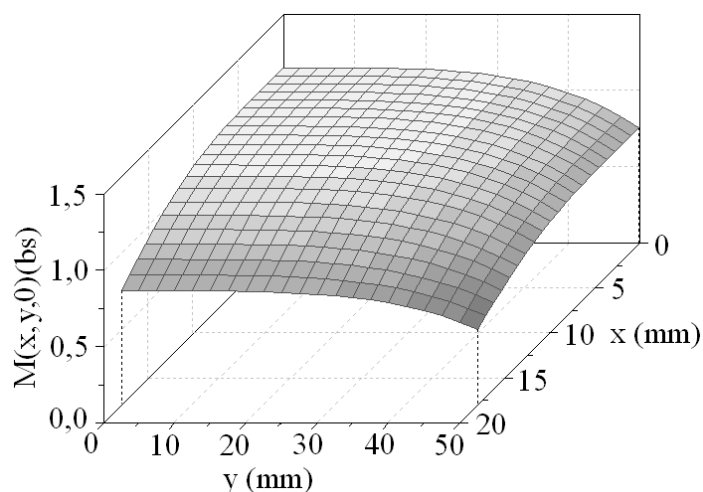
**Figura 4.12** - Cinética de secagem determinada pelo Modelo 4 (tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo).

Usando a Equação (3.4) para determinar  $M(x,y,z,t)$  no interior do paralelepípedo em  $t = 472$  min, a distribuição de umidade em um plano vertical localizado em  $z = 0$  (ver Figura 3.1) pode ser observada pelo gráfico de contorno da Figura 4.13.



**Figura 4.13** - Distribuição do teor de umidade em  $t = 472$  min determinado pelo Modelo 4 (tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo) no plano vertical destacado na Figura 3.1.

Para o Modelo 4, um gráfico 3D referente à distribuição de umidade em  $t = 472$  min, no plano vertical em destaque na Figura 3.1, é dado na Figura 4.14. Por se tratar de um modelo tridimensional, os fluxos radial e tangencial, bem como o fluxo longitudinal (no sentido das fibras de madeira) foram computados.



**Figure 4.14** - Gráfico 3D do teor de umidade em  $t = 472$  min, no plano vertical, com  $z = 0$ , determinado pelo Modelo 4.

#### 4.1.5 Análise dos modelos utilizados

A análise a seguir pressupõe que as hipóteses estabelecidas no item 3.1 para o modelo difusivo são aceitáveis para o processo de secagem em investigação. Neste caso, os resultados obtidos podem ser resumidos na Tabela 4.2.

**Tabela 4.2** - Resultados para os parâmetros determinados pelos quatro modelos.

Modelo	$D$ ( $m^2 s^{-1}$ )	$h$ ( $m s^{-1}$ )	$R^2$	$\chi^2$
1	$7,890 \times 10^{-10}$	-	0,9883	$2,1791 \times 10^{-2}$
2	$2,610 \times 10^{-9}$	$1,922 \times 10^{-7}$	0,9970	$4,8983 \times 10^{-3}$
3	$2,390 \times 10^{-9}$	$1,410 \times 10^{-7}$	0,9971	$4,4814 \times 10^{-3}$
4	$2,135 \times 10^{-9}$	$1,438 \times 10^{-7}$	0,9972	$4,3169 \times 10^{-3}$

Uma inspeção da Tabela 4.2 indica que o Modelo 1 é muito pobre e pode ser desconsiderado na descrição do processo de secagem de madeira serrada. Uma comparação entre os indicadores estatísticos dos Modelos 2 e 3 indica que o Modelo 3 é melhor que o Modelo 2, como era esperado. Além disso, o Modelo 4 é melhor do que o Modelo 3, como também era esperado. Neste aspecto, quanto mais a geometria

considerada está próxima da geometria real, melhores são os resultados. Mas todos os resultados realmente indicam que o fator mais significativo na descrição do processo de secagem de madeira é a escolha correta da condição de contorno, que deve ser do terceiro tipo. Para alguns minutos após o instante 472 minutos, por exemplo, em  $t = 504$  min, cada modelo permite calcular o teor de umidade médio, e os resultados estão apresentados na Tabela. 4.3.

**Tabela 4.3** - Resultados para  $\bar{M}$  (504 min) obtido através dos quatro modelos.

Modelo	$\bar{M}(504 \text{ min})$
1	0,8630
2	0,9537
3	0,9536
4	0,9541

Observando-se a Tabela 4.3 verifica-se que os valores do teor de umidade médio determinados pelos Modelos 2, 3 e 4 são equivalentes (igual a 0,954), e significativamente diferente do teor de umidade médio determinado através do Modelo 1 (igual a 0,863).

Através de uma inspeção nas Figuras 4.5 (Modelo 2), 4.9 (Modelo 3) e 4.12 (Modelo 4) pode-se afirmar que nos instantes finais do processo de secagem, ou seja, quando o teor de umidade é menor, o valor da difusividade efetiva da água deve ser um pouco menor do que os valores obtidos. Esta observação indica que, se uma solução numérica for utilizada para descrever o processo de secagem, uma expressão adequada para a difusividade efetiva da água, que diminui quando o teor de umidade diminui, pode produzir resultados melhores do que os resultados obtidos utilizando as soluções analíticas.

Devido a certa heterogeneidade e anisotropia, o processo de difusão em uma determinada direção pode ser um pouco diferente da difusão em outras direções, como foi demonstrado por Olek e Weres (2007). Então, os valores dos parâmetros

determinados por otimização e utilizados na simulação das cinéticas de secagem devem ser interpretados como valores efetivos referentes aos modelos propostos.

## 4.2 Secagem de materiais cerâmicos

As informações sobre a metodologia experimental da secagem do material cerâmico foram apresentadas no Capítulo 3, no subitem 3.11.2. Os dados experimentais da cinética de secagem foram apresentados a seguir. As temperaturas utilizadas para o ar de secagem foram  $T = 50,0; 60,0; 70,0; 80,0$  e  $90,0$  °C.

### 4.2.1 Dados experimentais

Informações sobre as condições de secagem das placas cerâmicas para as cinco temperaturas distintas estão disponíveis na Tabela 4.4, a qual apresenta, para cada temperatura de secagem, as dimensões iniciais das placas, o teor de umidade inicial e o teor de umidade de equilíbrio, ambos calculados em base seca.

**Tabela 4.4** - Temperatura de secagem (T), teor de umidade inicial ( $M_0$ ), teor de umidade equilíbrio ( $M_{eq}$ ) e dimensões iniciais das placas cerâmicas de revestimento.

T (°C)	$M_0$ (bs)	$M_{eq}$ (bs)	Espessura (m)	Largura (m)	Comprimento (m)
50,0	0,2272	0,0162	$6,05 \times 10^{-3}$	$29,38 \times 10^{-3}$	$77,50 \times 10^{-3}$
60,0	0,2286	0,0105	$6,02 \times 10^{-3}$	$24,38 \times 10^{-3}$	$73,75 \times 10^{-3}$
70,0	0,2330	0,0077	$5,96 \times 10^{-3}$	$26,24 \times 10^{-3}$	$77,13 \times 10^{-3}$
80,0	0,2232	0,0048	$6,13 \times 10^{-3}$	$28,70 \times 10^{-3}$	$81,66 \times 10^{-3}$
90,0	0,2316	0,0024	$5,92 \times 10^{-3}$	$26,94 \times 10^{-3}$	$77,86 \times 10^{-3}$

Os dados experimentais relativos à cinética de secagem para a temperatura de  $50,0$  °C estão dispostos na Tabela 4.5.

Na Tabela 4.5, as grandezas C, L e E representam, respectivamente, o comprimento, a largura e a espessura da placa cerâmica. Para esta temperatura, a medida da massa inicial da placa foi de  $m_i = 25,076$  g, a massa de equilíbrio, medida em  $t = 1925$  minutos, foi  $m_{eq} = 20,765$  g, enquanto que a massa seca foi  $m_s = 20,433$  g. A Tabela 4.5 contém, ainda, as massas e as dimensões das placas cerâmicas medidas ao

longo do tempo, o teor de umidade médio ( $\bar{M}$ ) e a razão de umidade média ( $M^*$ ), definida como:

$$M^* = \frac{\bar{M}(t) - M_{eq}}{M_0 - M_{eq}} \quad (4.1)$$

**Tabela 4.5** - Dados da secagem das placas cerâmicas de revestimento para  $T = 50,0 \text{ }^\circ\text{C}$ .

t (min)	m (g)	C ( $10^{-3}$ m)	L ( $10^{-3}$ m)	E ( $10^{-3}$ m)	$\bar{M}$ (bs)	$M^*$ (bs)
0	25,076	77,50	29,38	6,05	0,2272	1,0000
2	24,978	77,44	29,0	6,03	0,2224	0,9773
4	24,885	77,32	29,05	5,85	0,2179	0,9559
6	24,790	77,34	28,68	5,89	0,2132	0,9336
8	24,688	76,91	28,71	5,82	0,2082	0,9100
10	24,599	76,91	28,70	5,74	0,2039	0,8896
12	24,500	76,68	28,76	5,73	0,1990	0,8664
15	24,341	76,65	28,64	5,69	0,1913	0,8299
18	24,201	76,37	28,45	5,70	0,1844	0,7972
21	24,048	76,17	28,43	5,58	0,1769	0,7616
24	23,895	75,88	28,24	5,50	0,1694	0,7261
27	23,757	75,69	28,21	5,64	0,1627	0,6943
30	23,586	75,45	28,26	5,63	0,1543	0,6545
33	23,447	75,42	28,19	5,55	0,1475	0,6223
36	23,320	75,32	27,94	5,51	0,1413	0,5929
40	23,141	75,19	28,13	5,55	0,1325	0,5512
45	22,921	74,82	28,06	5,47	0,1218	0,5005
50	22,714	74,77	28,01	5,47	0,1116	0,4521
55	22,532	74,59	28,08	5,47	0,1027	0,4100
60	22,368	74,64	27,98	5,49	0,0947	0,3720
70	22,080	74,40	28,09	5,55	0,0806	0,3052
80	21,868	74,47	28,00	5,44	0,0702	0,2559
85	21,783	74,54	28,04	5,47	0,0661	0,2365
95	21,632	74,44	28,15	5,45	0,0587	0,2014
105	21,517	74,53	28,09	5,40	0,0531	0,1749
115	21,430	74,30	27,09	5,45	0,0488	0,1545
125	21,356	74,43	27,80	5,47	0,0452	0,1374
155	21,193	74,45	27,96	5,48	0,0372	0,0995
185	21,089	74,56	27,79	5,49	0,0321	0,0754
215	21,017	74,51	28,04	5,46	0,0286	0,0588
275	20,928	74,39	27,99	5,45	0,0242	0,0379
335	20,887	74,30	27,09	5,45	0,0222	0,0284
485	20,826	74,42	27,84	5,45	0,0192	0,0142

Inicialmente, os dados (t,  $\bar{M}$ ) foram utilizados para a determinação dos parâmetros de processo para esta temperatura de secagem. Como as incertezas dos pontos experimentais não foram determinadas, todos os pesos estatísticos foram

considerados iguais a 1, o que significa  $\sigma = 1$ . Isto corresponde a minimizar o resíduo na Equação (3.15).

Para  $T = 60,0 \text{ }^\circ\text{C}$ , os dados experimentais são apresentados na Tabela 4.6. A medida da massa inicial da placa foi de 19,474 g a medida da massa de equilíbrio, realizada no instante de tempo de 1913 minutos, foi 16,036 g, enquanto que o valor medido para a massa seca foi 15,850 g.

**Tabela 4.6** - Dados da secagem das placas cerâmicas de revestimento para  $T = 60,0 \text{ }^\circ\text{C}$ .

t (min)	m (g)	C ( $10^{-3}$ m)	L ( $10^{-3}$ m)	E ( $10^{-3}$ m)	$\bar{M}$ (bs)	$M^*$ (bs)
0	19,474	73,75	24,38	6,02	0,2286	1,0000
2	19,342	73,52	24,25	5,83	0,2203	0,9619
4	19,244	73,38	24,17	5,83	0,2141	0,9335
6	19,131	73,22	23,99	5,75	0,2070	0,9010
8	19,011	73,05	23,90	5,72	0,1994	0,8661
10	18,903	72,83	23,20	5,40	0,1926	0,8349
12	18,785	72,71	23,72	5,38	0,1852	0,8010
15	18,615	72,41	23,63	5,50	0,1744	0,7515
18	14,440	72,07	23,66	5,59	0,1634	0,7011
21	18,273	72,04	23,60	5,33	0,1529	0,6529
24	18,120	72,20	23,52	5,28	0,1432	0,6084
27	17,962	71,59	23,44	5,28	0,1332	0,5626
30	17,822	71,58	23,40	5,21	0,1244	0,5222
33	17,690	71,00	23,39	5,36	0,1161	0,4842
36	17,572	71,35	23,50	5,21	0,1086	0,4498
39	17,450	71,15	23,51	5,36	0,1009	0,4145
43	17,325	71,21	23,38	5,37	0,0931	0,3787
48	17,175	71,22	23,43	5,35	0,0836	0,3352
53	17,045	71,22	23,35	5,18	0,0754	0,2976
58	16,947	71,15	23,48	5,13	0,0692	0,2691
63	16,858	70,95	23,45	5,12	0,0636	0,2435
73	16,721	70,99	23,33	5,17	0,0543	0,2008
83	16,602	71,01	23,43	5,08	0,0474	0,1692
93	16,526	72,00	23,39	5,35	0,0426	0,1472
123	16,352	70,58	22,92	5,20	0,0317	0,0972
153	16,263	71,15	23,50	5,50	0,0261	0,0715
213	16,157	71,00	23,41	5,20	0,0194	0,0408
343	16,080	71,01	23,29	5,28	0,0145	0,0183
473	16,054	71,06	23,34	5,19	0,0129	0,0110

Os dados experimentais relativos à cinética de secagem para a temperatura de  $70,0 \text{ }^\circ\text{C}$  podem ser visualizados na Tabela 4.7. Para esta temperatura de secagem, a medida da massa inicial da placa foi de 23,014 g, enquanto que o valor medido para a

massa de equilíbrio foi de 18,809 g, medido em  $t = 2004$  minutos. Para a massa seca, a medida foi de 18,665 g.

**Tabela 4.7** - Dados da secagem das placas cerâmicas de revestimento para  $T = 70,0$  °C.

t (min)	m (g)	C ( $10^{-3}$ m)	L ( $10^{-3}$ m)	E ( $10^{-3}$ m)	$\bar{M}$ (bs)	$M^*$ (bs)
0	23,014	77,13	26,24	5,96	0,2330	1,0000
2	22,848	76,67	25,78	5,97	0,2241	0,9605
4	22,686	76,32	25,86	5,69	0,2154	0,9219
6	22,522	76,08	25,72	5,71	0,2066	0,8828
8	22,329	75,87	25,97	5,72	0,1963	0,8371
10	22,170	75,59	25,85	5,61	0,1878	0,7994
12	22,012	75,38	25,35	5,54	0,1793	0,7617
14	21,845	75,20	25,75	5,69	0,1704	0,7221
16	22,644	75,09	25,53	5,55	0,1596	0,6742
18	21,465	74,94	25,55	5,48	0,1500	0,6316
20	21,322	74,66	25,50	5,44	0,1424	0,5979
22	21,184	74,36	25,34	5,42	0,1350	0,5650
24	21,058	74,57	25,40	5,47	0,1282	0,5348
29	20,700	74,75	24,96	5,39	0,1090	0,4496
34	20,438	74,35	24,97	5,40	0,0950	0,3875
39	20,216	74,34	25,34	5,39	0,0831	0,3347
44	20,045	74,25	25,20	5,39	0,0739	0,2938
49	19,900	74,42	25,40	5,35	0,0662	0,2597
54	19,721	74,40	25,33	5,33	0,0566	0,2170
59	19,673	74,22	25,24	5,44	0,0540	0,2055
74	19,461	74,35	25,10	5,38	0,0426	0,1549
84	19,353	74,35	25,15	5,48	0,0369	0,1296
114	19,153	74,50	24,76	5,47	0,0315	0,1056
144	19,042	74,14	25,18	5,38	0,0202	0,0555
204	18,136	74,30	25,37	5,37	0,0145	0,0302
384	18,846	74,48	25,20	5,31	0,0097	0,0089
564	18,829	74,44	25,27	5,38	0,0088	0,0049

Para a temperatura de 80,0 °C, os dados experimentais relativos à cinética de secagem são mostrados na Tabela 4.8. Para esta temperatura, a massa inicial da placa foi de 25,574 g, enquanto que o valor medido para a massa de equilíbrio foi de 21,008 g, medida em  $t = 1950$  min. Para a massa seca, a realização da medida forneceu um valor de 20,907 g.

**Tabela 4.8** - Dados da secagem das placas cerâmicas de revestimento para  $T = 80,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

t (min)	m (g)	C ( $10^{-3}$ m)	L ( $10^{-3}$ m)	E ( $10^{-3}$ m)	$\bar{M}$ (bs)	$M^*$ (bs)
0	25,574	81,66	28,70	6,13	0,2232	1,0000
4	25,054	80,49	27,95	5,58	0,1984	0,8862
10	24,389	79,86	27,46	5,29	0,1665	0,7406
14	23,994	80,31	27,67	5,24	0,1477	0,6541
18	23,637	79,56	27,55	5,12	0,1306	0,5759
22	23,268	79,62	27,33	5,11	0,1129	0,4951
26	22,990	79,48	27,46	5,20	0,0996	0,4342
30	22,750	79,25	27,48	5,21	0,0882	0,3816
34	22,575	80,95	27,45	5,24	0,0798	0,3433
40	22,315	79,51	27,44	5,26	0,0673	0,2864
46	22,122	79,27	27,58	5,11	0,0581	0,2441
52	21,971	79,50	27,29	5,29	0,0509	0,2110
60	21,802	79,69	27,40	5,53	0,0428	0,1740
95	21,572	79,58	27,40	5,17	0,0318	0,1237
110	21,447	78,99	27,46	5,54	0,0258	0,0963
140	21,279	78,89	27,44	5,44	0,0178	0,0595
170	21,192	78,82	27,38	5,34	0,0136	0,0404
230	21,108	78,79	27,32	5,16	0,0096	0,0220
410	21,041	78,96	27,19	5,21	0,0064	0,0074

A última temperatura a ter os dados experimentais coletados foi a de  $90,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Para esta temperatura, a massa inicial da placa foi de 23,970 g, enquanto que um valor de 19,509 g foi medido para a massa de equilíbrio. Esta medição foi realizada no instante  $t = 1705$  min. Para a massa seca, a medida realizada forneceu um valor de 19,462 g.

Os dados experimentais relativos à cinética de secagem para esta temperatura encontram-se listados na Tabela 4.9.

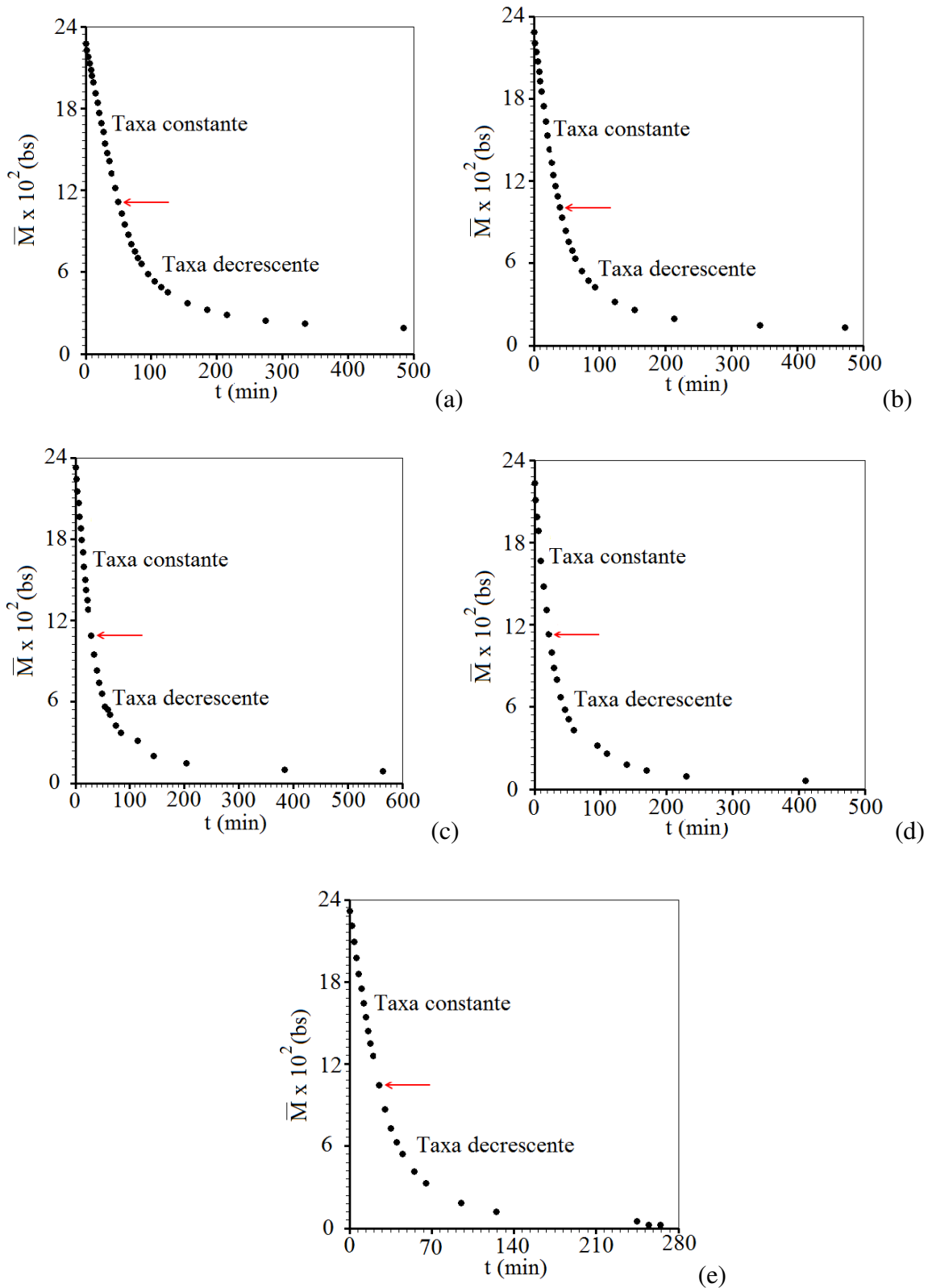


**Tabela 4.9** - Dados da secagem das placas cerâmicas de revestimento para  $T = 90,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

t (min)	m (g)	C ( $10^{-3}$ m)	L ( $10^{-3}$ m)	E ( $10^{-3}$ m)	$\bar{M}$ (bs)	$M^*$ (bs)
0	23,970	77,86	26,94	5,92	0,2316	1,0000
2	23,760	77,64	26,27	5,88	0,2208	0,9531
4	23,536	77,32	26,48	5,76	0,2093	0,9028
6	23,306	77,07	26,20	5,62	0,1975	0,8513
8	23,077	76,60	26,24	5,50	0,1857	0,7999
10	22,868	77,00	26,04	5,51	0,1750	0,7531
12	22,662	76,48	26,00	5,43	0,1644	0,7069
14	22,467	76,67	25,93	5,43	0,1544	0,6632
16	22,265	76,23	25,93	5,46	0,1440	0,6179
18	22,085	76,07	25,74	5,51	0,1348	0,5776
20	21,911	75,57	25,84	5,44	0,1258	0,5385
25	21,497	75,00	25,92	5,40	0,1046	0,4457
30	21,152	75,77	25,98	5,50	0,0868	0,3684
35	20,884	74,85	25,83	5,34	0,0731	0,3083
40	20,680	75,52	25,82	5,52	0,0626	0,2626
45	20,522	75,71	25,82	5,44	0,0545	0,2272
55	20,269	75,49	25,71	5,36	0,0415	0,1704
65	20,103	75,45	20,77	5,55	0,0329	0,1332
95	19,816	75,79	25,92	5,38	0,0182	0,0689
125	19,695	75,35	25,71	5,38	0,0120	0,0418
245	19,561	75,19	25,70	5,32	0,0051	0,0117
255	19,509	75,11	25,91	5,40	0,0024	0,0001

Gráficos mostrando o comportamento da cinética de secagem a partir dos dados experimentais, para as cinco temperaturas estudadas são apresentados na Figura 4.15, a qual destaca o instante em que o processo deixa de acontecer a uma taxa de secagem constante, passando a ocorrer a uma taxa de secagem decrescente. Na Figura 4.15, observa-se que o instante em que ocorre a mudança de taxa constante para taxa decrescente é diferente para cada temperatura. No entanto, o valor do teor de umidade para o referido instante é aproximadamente o mesmo para todas as temperaturas, oscilando em torno de 0,11.

Como os dados experimentais revelam que o processo apresenta duas fases distintas de secagem: a primeira em que a secagem acontece a uma taxa constante, e a segunda, no restante do processo, em que a taxa é decrescente, parece razoável que o uso da equação de difusão para descrever o processo deve ser feito a partir do instante em que o processo acontece a taxa decrescente.

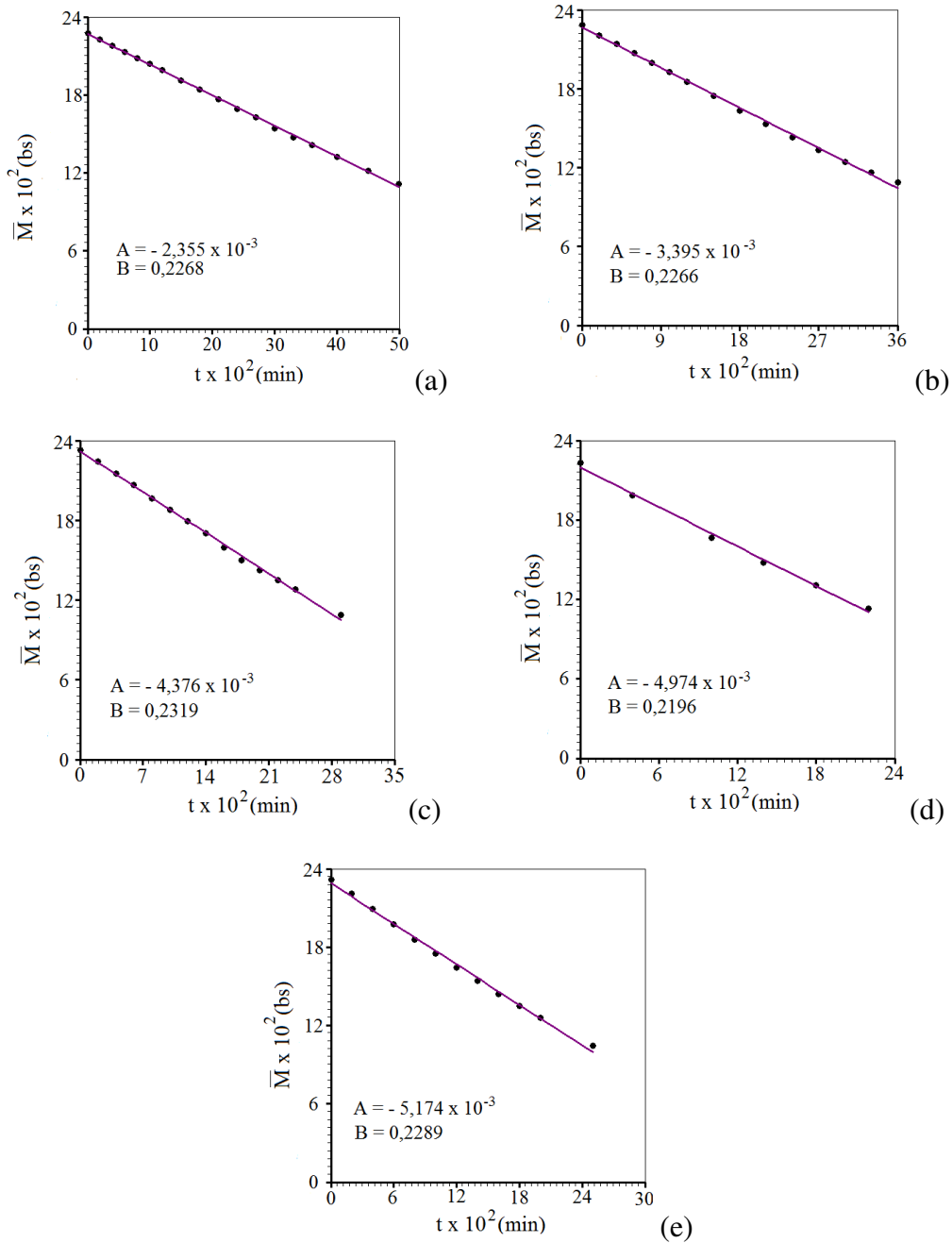


**Figura 4.15** - Dados experimentais da cinética de secagem para as temperaturas investigadas: (a)  $T = 50,0 \text{ } ^\circ\text{C}$ , (b)  $T = 60,0 \text{ } ^\circ\text{C}$ , (c)  $T = 70,0 \text{ } ^\circ\text{C}$ , (d)  $T = 80,0 \text{ } ^\circ\text{C}$  e (e)  $T = 90,0 \text{ } ^\circ\text{C}$

### 4.2.2 Taxa constante de secagem

Usando a Equação (4.2) para fazer os ajustes de curvas a partir do teor de umidade máximo até aproximadamente 0,11 (ver a Fig. 4.15), obtém-se a Figura 4.16.

$$\bar{M} = At + B \quad (4.2)$$



**Figura 4.16** - Dados experimentais da cinética de secagem, no período de taxa de secagem constante, para as temperaturas: (a)  $T = 50,0 \text{ } ^\circ\text{C}$ , (b)  $T = 60,0 \text{ } ^\circ\text{C}$ , (c)  $T = 70,0 \text{ } ^\circ\text{C}$ , (d)  $T = 80,0 \text{ } ^\circ\text{C}$  e (e)  $T = 90,0 \text{ } ^\circ\text{C}$ .

Observando-se a Figura 4.16 verificam-se que as cinéticas de secagem realmente apresentam comportamento com taxa constante.

Os parâmetros de ajuste, bem como os indicadores estatísticos são apresentados na Tabela 4.10.

**Tabela 4.10** - Dados dos ajustes relativos às cinéticas de secagem das placas cerâmicas de revestimento, relativos ao período de taxa constante.

T (°C)	A	B	R <sup>2</sup>	χ <sup>2</sup>
50,0	-2,355 x 10 <sup>-3</sup>	0,2268	0,9992	1,668 x 10 <sup>-5</sup>
60,0	-3,395 x 10 <sup>-3</sup>	0,2266	0,9980	4,519 x 10 <sup>-5</sup>
70,0	-4,376 x 10 <sup>-3</sup>	0,2319	0,9978	4,169 x 10 <sup>-5</sup>
<b>80,0</b>	<b>-4,974 x 10<sup>-3</sup></b>	<b>0,2196</b>	<b>0,9955</b>	<b>3,880 x 10<sup>-5</sup></b>
90,0	-5,174 x 10 <sup>-3</sup>	0,2289	0,9964	6,273 x 10 <sup>-5</sup>

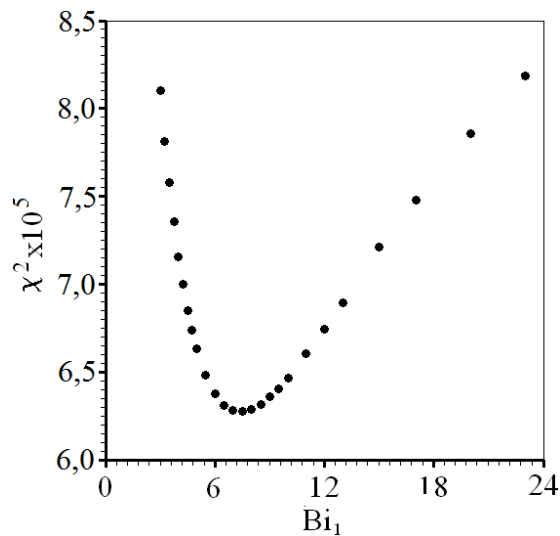
No presente estudo, o instante em que começa o processo com taxa decrescente foi tomado como o instante inicial do processo difusivo e a distribuição de umidade foi considerada uniforme nesse instante. Esta consideração é razoável, porque durante o intervalo de tempo em que o processo acontece a uma taxa constante, pode-se considerar que, a exemplo da lei de resfriamento de Newton, a distribuição da grandeza de interesse é uniforme em todos pontos no interior do sólido.

#### 4.2.3 Secagem de material cerâmico usando soluções analíticas

Durante a descrição da secagem de madeiras usando soluções analíticas, foi verificado que todos os resultados realmente indicam que o fator mais significativo na descrição do processo é a escolha correta da condição de contorno, que deve ser do terceiro tipo. Assim, para a análise da secagem de materiais cerâmicos será considerado apenas o modelo tridimensional envolvendo a condição de contorno de terceiro tipo.

#### 4.2.3.1 Modelo tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo: Difusividade constante.

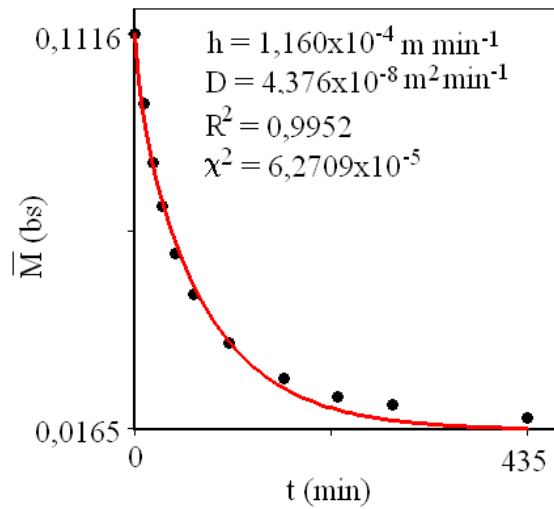
Para  $T = 50,0 \text{ }^\circ\text{C}$ , o algoritmo de otimização descrito no subitem 3.1.4 acoplado à Equação (3.9) permite determinar a relação entre o qui-quadrado e número de Biot ( $Bi_1$ ), como pode ser observado na Figura 4.17, nas vizinhanças do ponto ótimo.



**Figura 4.17** - Qui-quadrado versus número de Biot nas vizinhanças do ponto ótimo, para  $T = 50,0 \text{ }^\circ\text{C}$ .

Os valores para a difusividade efetiva de água e do coeficiente de transferência convectivo de massa, determinados por otimização foram, respectivamente,  $D = 7,293 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  ( $D = 4,376 \times 10^{-8} \text{ m}^2 \text{ min}^{-1}$ ) e  $h = 1,933 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  ( $h = 1,160 \times 10^{-4} \text{ m min}^{-1}$ ). O número de Biot foi 7,250 e os indicadores estatísticos foram: Coeficiente de determinação  $R^2 = 0,9952$  e qui-quadrado  $\chi^2 = 6,2709 \times 10^{-5}$ .

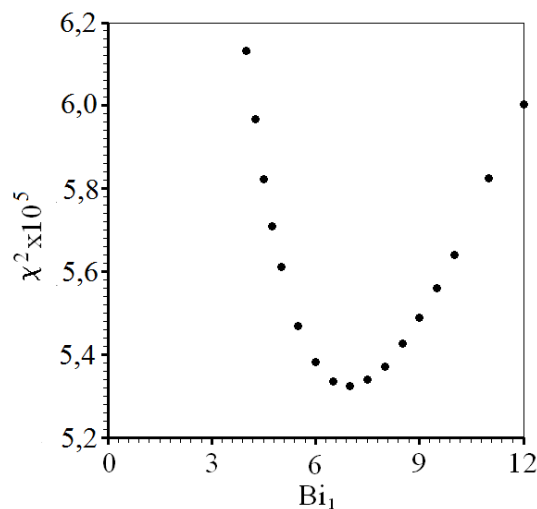
Usando a Equação (3.9) e os valores determinados para  $D$  e  $h$ , a cinética de secagem pode ser simulada, como é mostrado na Figura 4.18.



**Figura 4.18** - Cinética de secagem para  $T = 50,0 \text{ }^\circ\text{C}$  (Modelo tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo).

Uma inspeção na Figura 4.18, possibilita concluir que existe uma boa concordância entre os dados experimentais e a simulação nos instantes iniciais até cerca de 100 min. A partir deste instante, percebe-se certa discrepância, indicando que a difusividade efetiva neste intervalo de tempo deveria ter um valor menor do que nos instantes iniciais.

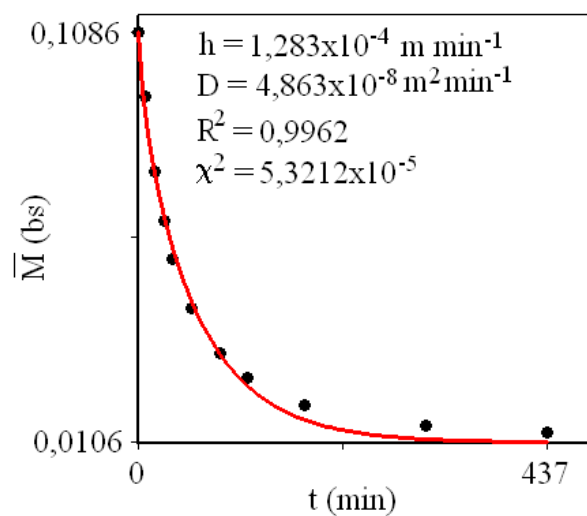
Para  $T = 60,0 \text{ }^\circ\text{C}$ , o algoritmo de otimização descrito no subitem 3.1.4 acoplado à Equação (3.9) permite determinar a relação entre o qui-quadrado e número de Biot ( $Bi_1$ ), como pode ser observado na Figura 4.19, nas vizinhanças do ponto ótimo.



**Figura 4.19** - Qui-quadrado versus número de Biot nas vizinhanças do ponto ótimo, para  $T = 60,0 \text{ }^\circ\text{C}$ .

Os valores para a difusividade efetiva de água e do coeficiente de transferência convectivo de massa, determinados por otimização foram, respectivamente,  $D = 8,105 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  ( $D = 4,863 \times 10^{-8} \text{ m}^2 \text{ min}^{-1}$ ) e  $h = 2,138 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  ( $h = 1,283 \times 10^{-4} \text{ m min}^{-1}$ ). O número de Biot foi 6,875 e os indicadores estatísticos foram:  $R^2 = 0,9962$  e  $\chi^2 = 5,3212 \times 10^{-5}$ .

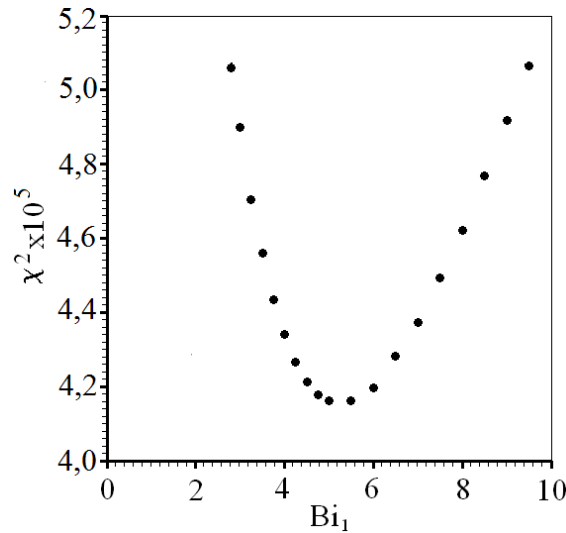
Usando a Equação (3.9) e os valores determinados para D e h, a cinética de secagem pode ser simulada, como é mostrado na Figura 4.20.



**Figura 4.20** - Cinética de secagem para  $T = 60,0 \text{ }^\circ\text{C}$  (Modelo tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo).

Para esta temperatura de secagem, também é percebido uma discrepância entre os resultados simulados e os dados experimentais nos instantes finais do processo, indicando que a difusividade efetiva neste intervalo de tempo deveria ter um valor menor do que nos instantes iniciais.

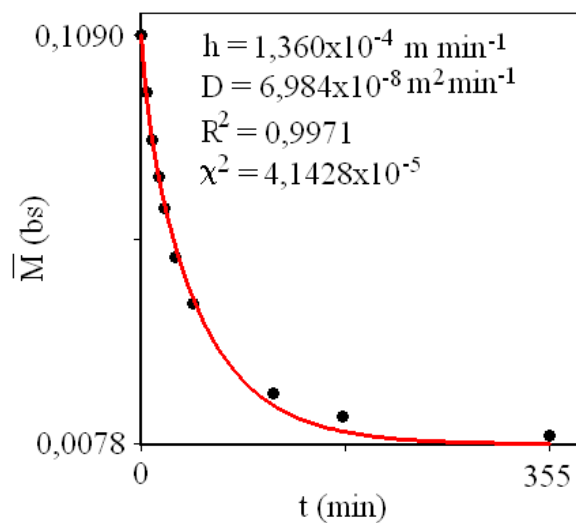
Para  $T = 70,0 \text{ }^\circ\text{C}$ , o algoritmo de otimização descrito no subitem 3.1.4 acoplado à Equação (3.9) permite determinar a relação entre o qui-quadrado e número de Biot ( $Bi_1$ ), como pode ser observado na Figura 4.21, nas vizinhanças do ponto ótimo.



**Figura 4.21** - Qui-quadrado versus número de Biot nas vizinhanças do ponto ótimo, para  $T = 70,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

Os valores para a difusividade efetiva de água e o coeficiente de transferência convectivo de massa, determinados por otimização foram, respectivamente dados por,  $D = 1,164 \times 10^{-9}\text{ m}^2\text{ s}^{-1}$  ( $D = 6,984 \times 10^{-8}\text{ m}^2\text{ min}^{-1}$ ) e  $h = 2,267 \times 10^{-6}\text{ m}^2\text{ s}^{-1}$  ( $h = 1,360 \times 10^{-4}\text{ m min}^{-1}$ ). O número de Biot foi 5,250 e os indicadores estatísticos foram:  $R^2 = 0,9971$  e  $\chi^2 = 4,1428 \times 10^{-5}$ .

Usando a Equação (3.9) e os valores determinados para  $D$  e  $h$ , a cinética de secagem pode ser simulada, como é mostrado na Figura 4.22.

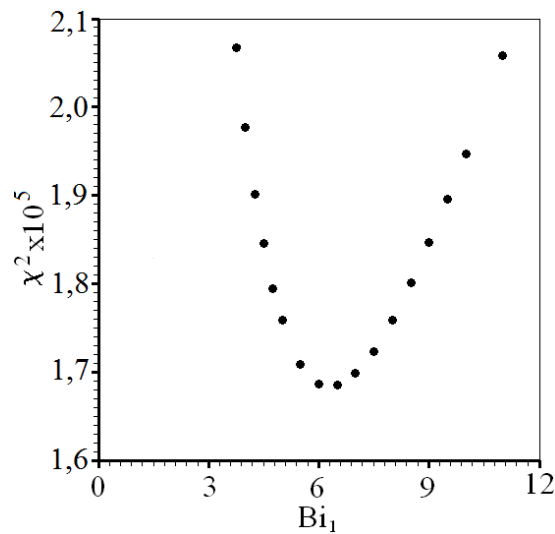


**Figura 4.22** - Cinética de secagem para  $T = 70,0\text{ }^{\circ}\text{C}$  (Modelo tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo).



Mais uma vez é percebida a discrepância entre os resultados simulados e os dados experimentais nos instantes finais do processo apesar da boa concordância verificada nos instantes iniciais.

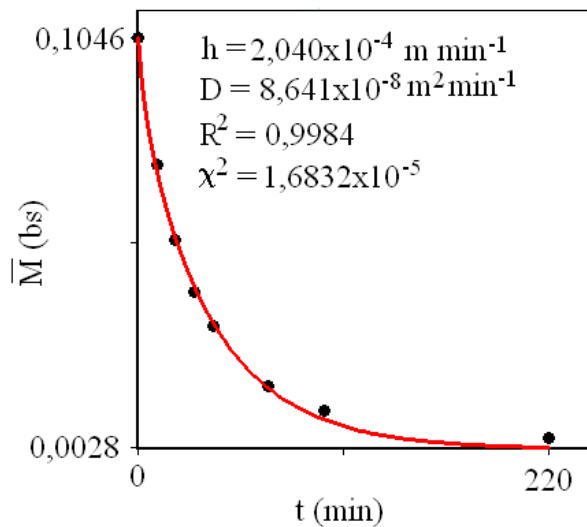
Para  $T = 90,0 \text{ }^\circ\text{C}$ , o algoritmo de otimização descrito no subitem 3.1.4 acoplado à Equação (3.9) permite determinar a relação entre o qui-quadrado e número de Biot ( $Bi_1$ ), como pode ser observado na Figura 4.23, nas vizinhanças do ponto ótimo.



**Figura 4.23** - Qui-quadrado versus número de Biot nas vizinhanças do ponto ótimo, para  $T = 90,0 \text{ }^\circ\text{C}$ .

Os valores para a difusividade efetiva de água e do coeficiente de transferência convectivo de massa, determinados por otimização foram, respectivamente dados por,  $D = 1,440 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  ( $D = 8,641 \times 10^{-8} \text{ m}^2 \text{ min}^{-1}$ ) e  $h = 3,400 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  ( $h = 2,040 \times 10^{-4} \text{ m min}^{-1}$ ). O número de Biot foi 6,375 e os indicadores estatísticos foram:  $R^2 = 0,9984$  e  $\chi^2 = 1,6832 \times 10^{-5}$ .

Usando a Equação (3.9) e os valores determinados para  $D$  e  $h$ , a cinética de secagem pode ser simulada, como é mostrado na Figura 4.24, através da qual se observa também que, apesar de uma boa concordância entre os dados experimentais e os dados simulados no início do processo, verifica-se certa divergência nos instantes finais do processo, indicando que a difusividade efetiva neste intervalo de tempo deveria ter um valor menor do que nos instantes iniciais.



**Figura 4.24** - Cinética de secagem para  $T = 90,0 \text{ } ^\circ\text{C}$  (Modelo tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo).

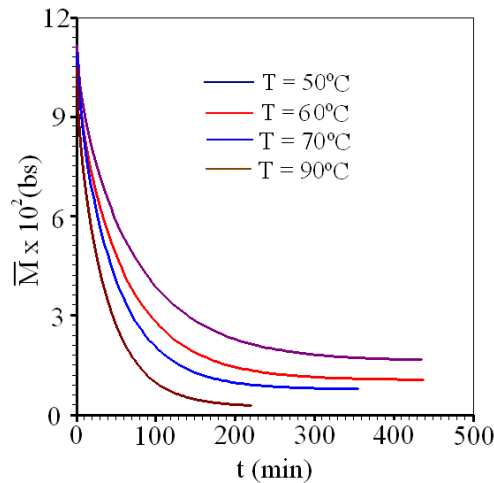
Neste ponto, vale salientar que os dados experimentais obtidos para a temperatura  $T = 80,0 \text{ } ^\circ\text{C}$  não foram utilizados no processo de otimização para determinação dos parâmetros de transporte. Ao invés disso, eles foram usados para testar as expressões a serem determinadas para a difusividade efetiva de massa  $D$ , e para o coeficiente de transferência convectivo  $h$ . Para tal, a equação de Arrhenius foi ajustada aos valores obtidos por otimização para as outras temperaturas e em seguida utilizada para determinar os parâmetros de transporte e, conseqüentemente simular a cinética de secagem para esta temperatura.

Na Tabela 4.11 estão resumidos os principais resultados para os parâmetros ótimos e indicadores estatísticos obtidos para as quatro temperaturas usadas no processo de otimização, ao se considerar constantes o volume das placas cerâmicas de revestimento e os parâmetros de transporte.

**Tabela 4.11** – Resultados para os parâmetros determinados para quatro temperaturas.

Temperatura ( $^\circ\text{C}$ )	$D \text{ (m}^2 \text{ s}^{-1}\text{)}$	$h \text{ (m s}^{-1}\text{)}$	$R^2$	$\chi^2$
50	$7,293 \times 10^{-10}$	$1,933 \times 10^{-6}$	0,9952	$6,2709 \times 10^{-5}$
60	$8,105 \times 10^{-10}$	$2,138 \times 10^{-6}$	0,9962	$5,3212 \times 10^{-5}$
70	$11,64 \times 10^{-10}$	$2,267 \times 10^{-6}$	0,9971	$4,1428 \times 10^{-5}$
90	$14,40 \times 10^{-10}$	$3,400 \times 10^{-6}$	0,9984	$1,6832 \times 10^{-5}$

Uma vez que os parâmetros D e h já foram determinados por otimização, o teor de umidade médio para cada instante pode ser calculado pela Equação (3.36), para cada temperatura. A superposição das curvas que representam as cinéticas de secagem para as quatro temperaturas investigadas pode ser observada através da Figura 4.25.



**Figura 4.25** - Superposição das cinéticas de secagem para as quatro temperaturas.

Analisando os resultados, através de uma inspeção das Figuras 4.18, 4.20, 4.22 e 4.24, e da Tabela 4.11, é possível afirmar que o modelo empregado para descrever a cinética de secagem de placas cerâmicas, considerando volume e parâmetros de transporte constantes, pode ser considerado razoável desde o início da secagem até aproximadamente o tempo de 100 min. Já para tempos de secagem maiores percebe-se certa discrepância, indicando que a difusividade efetiva neste intervalo de tempo deveria ter um valor menor do que nos instantes iniciais. No entanto, pode-se tentar melhorar ainda mais os resultados, levando-se em consideração a variação dimensional das placas, o que deve afetar o valor da difusividade efetiva de massa. Esta análise deverá ser feita através de soluções numéricas.

A equação de Arrhenius foi utilizada para determinar expressões para a difusividade efetiva de massa D e para o coeficiente de transferência convectivo h, como função da temperatura:

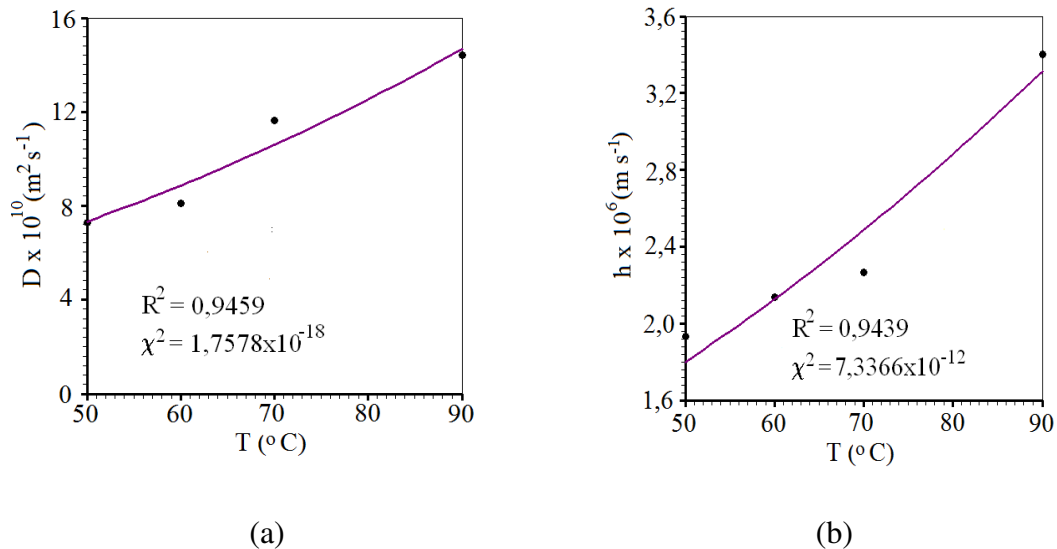
$$D = D_0 \exp \left[ - \frac{E_a}{R(T + 273,15)} \right], \quad (4.3)$$

e

$$h = A \exp\left[-\frac{B}{(T + 273,15)}\right], \quad (4.4)$$

onde  $D_0$  ( $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ) é o fator pré-exponencial;  $E_a$  é a energia de ativação ( $\text{J mol}^{-1}$ );  $R$  é a constante universal dos gases ( $8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ),  $T$  é a temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ) e  $A$  e  $B$  são parâmetros de ajuste da Equação 4.4.

Realizando-se os ajustes das Equações (4.3) e (4.4) aos dados da Tabela 4.11, os gráficos obtidos para representar a difusividade  $D$  e o coeficiente de transferência convectivo  $h$  em função da temperatura, são mostrados na Figura 4.26.



**Figura 4.26** - Equação de Arrhenius: (a) Difusividade efetiva em função da temperatura; (b) Coeficiente de transferência convectivo em função da temperatura.

Assim, os ajustes das Equações (4.3) e (4.4) resultam nas Equações (4.5) e (4.6):

$$D = 3,963 \times 10^{-7} \exp\left[-\frac{2033}{(T + 273,15)}\right] \quad (4.5)$$

e

$$h = 4,595 \times 10^{-4} \exp\left[-\frac{1791}{(T + 273,15)}\right] \quad (4.6)$$

Uma comparação entre as Equações (4.3) e (4.5) resulta nos seguintes valores para os parâmetros de ajuste:  $D_0 = 3,963 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  e  $E_a = 16,90 \text{ kJ mol}^{-1}$ . Do mesmo modo, comparando-se as equações (4.4) e (4.6) resulta em  $A = 4,595 \times 10^{-4}$  e  $B = 1791$ .

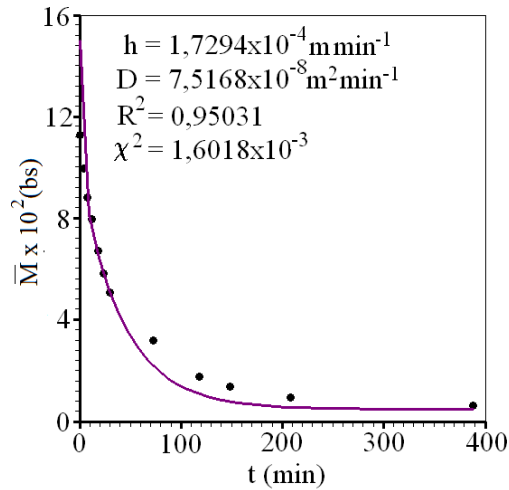
Usando-se as Equações (4.5) e (4.6), a Tabela 4.12 pode ser apresentada, com os valores de D e h calculados por essas equações, para as quatro temperaturas de secagem.

**Tabela 4.12** - Parâmetros determinados pelas Equações (4.5) e (4.6) e os erros percentuais calculados em relação aos valores ótimos da Tabela 4.11.

Temperatura (°C)	D (m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	Erro (%)	h (m s <sup>-1</sup> )	Erro (%)
50,0	$7,3416 \times 10^{-10}$	0,666	$1,8000 \times 10^{-6}$	6,880
60,0	$8,8676 \times 10^{-10}$	9,409	$2,1259 \times 10^{-6}$	0,566
70,0	$11,059 \times 10^{-10}$	4,991	$2,4864 \times 10^{-6}$	9,678
90,0	$14,680 \times 10^{-10}$	1,944	$3,3145 \times 10^{-6}$	2,515

Uma inspeção na Tabela 4.12 torna possível observar que os erros entre os valores de D e h calculados pelas Equações (4.5) e (4.6) e os valores correspondentes obtidos por otimização são pequenos. Esta observação permite supor que, para temperaturas entre 50,0 e 90,0 °C, os parâmetros de processo podem ser calculados pelas Equações (4.5) e (4.6). Então, se esta suposição for correta, é possível simular a cinética de secagem em outras temperaturas, sem a necessidade de um novo processo de otimização.

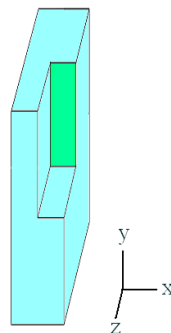
Assim, os parâmetros  $D = 1,2528 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  e  $h = 2,8824 \times 10^{-6} \text{ m s}^{-1}$  foram calculados através das Equações (4.5) e (4.6) para a temperatura de 80,0 °C e os seus valores foram usados para simular a cinética de secagem, que foi comparada com os resultados experimentais, de acordo com o que está apresentado na Figura 4.27.



**Figura 4.27** - Simulação da cinética de secagem para  $T = 80,0 \text{ }^\circ\text{C}$  com os parâmetros determinados pelas Equações (4.5) e (4.6) e os dados experimentais.

Uma comparação entre os dados experimentais e a curva simulada, e uma inspeção dos indicadores estatísticos apresentados na Figura 4.27, torna possível afirmar que a simulação realizada representa bem o processo de secagem a  $T = 80,0 \text{ }^\circ\text{C}$ . Então, é possível admitir que as Equações (4.5) e (4.6) podem substituir o processo de otimização na determinação dos parâmetros  $D$  e  $h$  para as temperaturas de secagem entre  $50,0$  e  $90,0 \text{ }^\circ\text{C}$ .

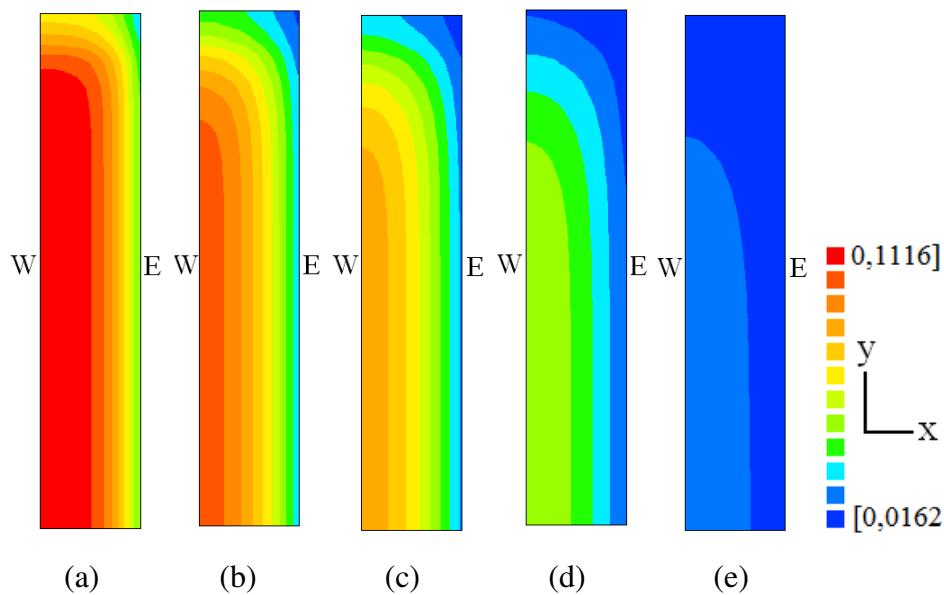
O conhecimento das diferenças entre o teor de umidade no contorno e no interior das placas é importante porque essas diferenças causam tensões que podem danificar o produto. Por isso, foram traçados gráficos de contorno mostrando a distribuição espacial do teor de umidade no plano vertical  $xy$  localizado no centro do paralelepípedo, conforme está destacado na Figura 4.28.



**Figura 4.28** - Destaque para o plano  $xy$ , passando pelo ponto central do paralelepípedo, onde a distribuição espacial do teor de umidade será examinada.

Na área em destaque foi criada uma malha com 1000 x 1000 elementos para a apresentação dos gráficos de distribuição de umidade.

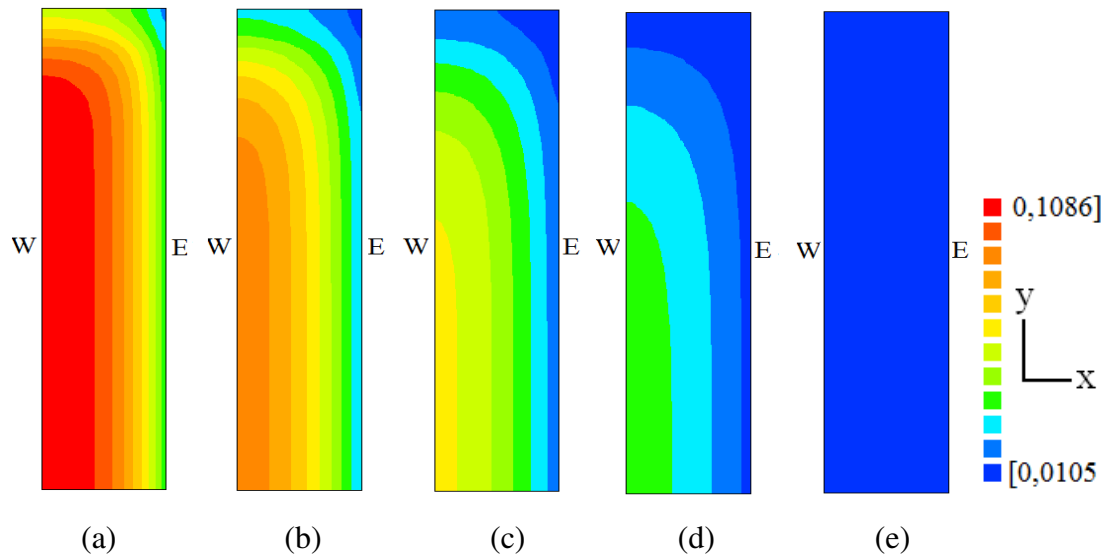
Para a temperatura de 50,0 °C, os gráficos de contorno detalhando a evolução do transporte de água no plano destacado da Figura 4.28, podem ser visualizados na Figura 4.29 para alguns instantes de tempo.



**Figura 4.29** - Distribuição espacial do teor de umidade para  $T = 50,0 \text{ }^\circ\text{C}$ , nos tempos: (a)  $t = 10,0 \text{ min}$ ; (b)  $t = 30,0 \text{ min}$ ; (c)  $t = 50,0 \text{ min}$ ; (d)  $t = 100,0 \text{ min}$ ; (e)  $t = 200,0 \text{ min}$ .

Através de uma inspeção na Figura 4.29, pode-se perceber a diferença entre as cinéticas de secagem dos elementos da malha localizados no interior do sólido daqueles situados nas fronteiras. Nota-se que os elementos localizados no canto superior direito são os que secam de forma mais rápida, já que são elementos que têm duas faces (norte e leste) em contato com o meio ambiente. A face mais interna (oeste) seca mais lentamente do que a face mais externa (leste). Os elementos da malha localizados no canto inferior esquerdo são os que demoram mais a secar, já que são os volumes mais internos do sólido. Para o instante 200,0 min, percebe-se que os elementos mais externos já atingiram o teor de umidade de equilíbrio, enquanto os elementos mais internos estão ligeiramente mais úmidos.

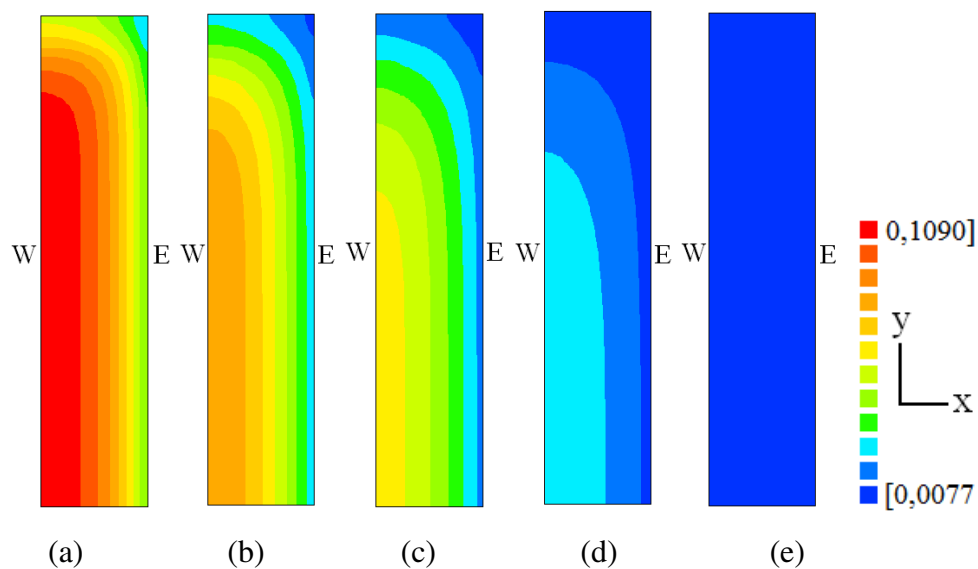
Para a temperatura de 60,0 °C, a distribuição espacial do teor de umidade está mostrada na Figura 4.30, para os mesmos instantes da temperatura de 50,0 °C.



**Figura 4.30** - Distribuição espacial do teor de umidade para  $T = 60,0 \text{ } ^\circ\text{C}$ , nos tempos: (a)  $t = 10,0 \text{ min}$ ; (b)  $t = 30,0 \text{ min}$ ; (c)  $t = 50,0 \text{ min}$ ; (d)  $t = 100,0 \text{ min}$ ; (e)  $t = 200,0 \text{ min}$ .

Para esta temperatura, verifica-se que no instante  $t = 200 \text{ min}$ , todos os volumes de controle apresentam o teor de umidade de equilíbrio.

Os gráficos de contorno mostrando o perfil da distribuição de umidade para a temperatura de 70,0 °C estão apresentados na Figura 4.31

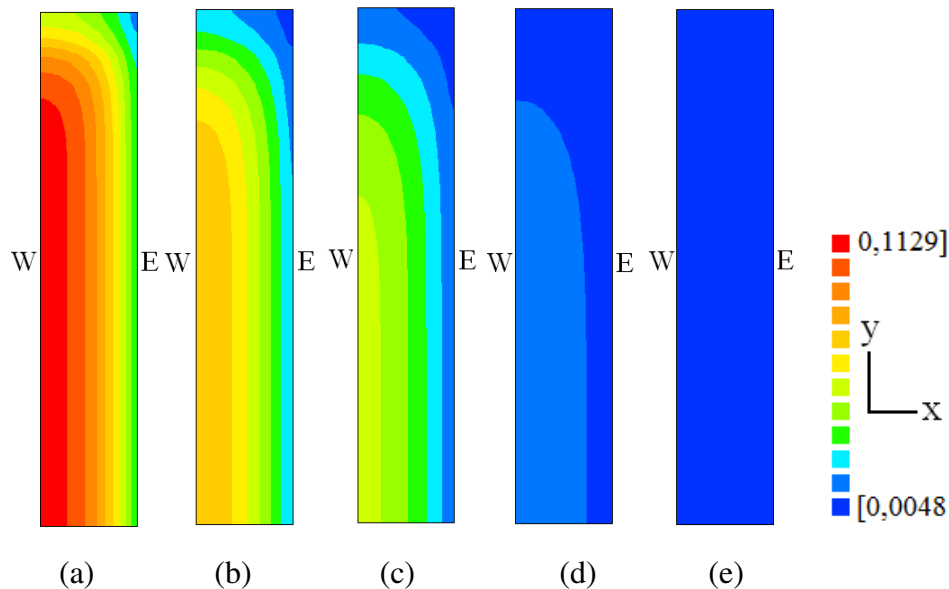


**Figura 4.31** - Distribuição espacial do teor de umidade para  $T = 70,0 \text{ } ^\circ\text{C}$ , nos tempos: (a)  $t = 10,0 \text{ min}$ ; (b)  $t = 30,0 \text{ min}$ ; (c)  $t = 50,0 \text{ min}$ ; (d)  $t = 100,0 \text{ min}$ ; (e)  $t = 200,0 \text{ min}$ .



Por meio de uma análise da Figura 4.31, é possível concluir que para esta temperatura, o plano central apresenta um perfil do teor de umidade semelhante ao da temperatura de 60,0 °C. Para o tempo  $t = 200$  min, todos os elementos já atingiram o teor de umidade de equilíbrio.

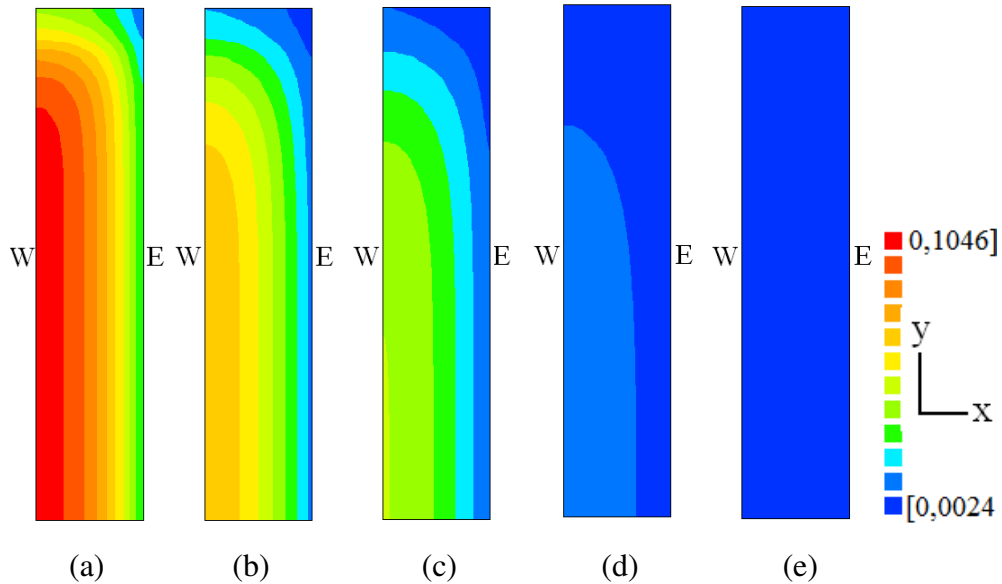
Para a temperatura de 80,0 °C deve-se lembrar de que os valores da difusividade efetiva e do coeficiente de transferência convectivo de massa não foram encontrados pelo processo de otimização. Assim, os gráficos de contorno foram traçados utilizando-se os resultados obtidos com os parâmetros de processo calculados através do ajuste da equação de Arrhenius. Os gráficos estão apresentados na Figura 4.32. Os instantes analisados são os mesmos que os das temperaturas anteriores.



**Figura 4.32** - Distribuição espacial do teor de umidade para  $T = 80,0$  °C, nos tempos: (a)  $t = 10,0$  min; (b)  $t = 30,0$  min; (c)  $t = 50,0$  min; (d)  $t = 100,0$  min; (e)  $t = 200,0$  min.

Observa-se coerência nos resultados apresentados na Figura 4.32, pois para cada instante analisado, percebe-se uma secagem mais rápida dos elementos da malha mais externos. Os que secam mais rápido são aqueles localizados no nordeste, em contato com o meio externo a norte e a leste, enquanto os que secam de forma mais lenta são os elementos internos localizados a sudoeste (centro das placas).

Informações sobre o perfil do teor de umidade no plano em estudo, para a temperatura de secagem de 90,0 °C podem se obtidas na Figura 4.33.

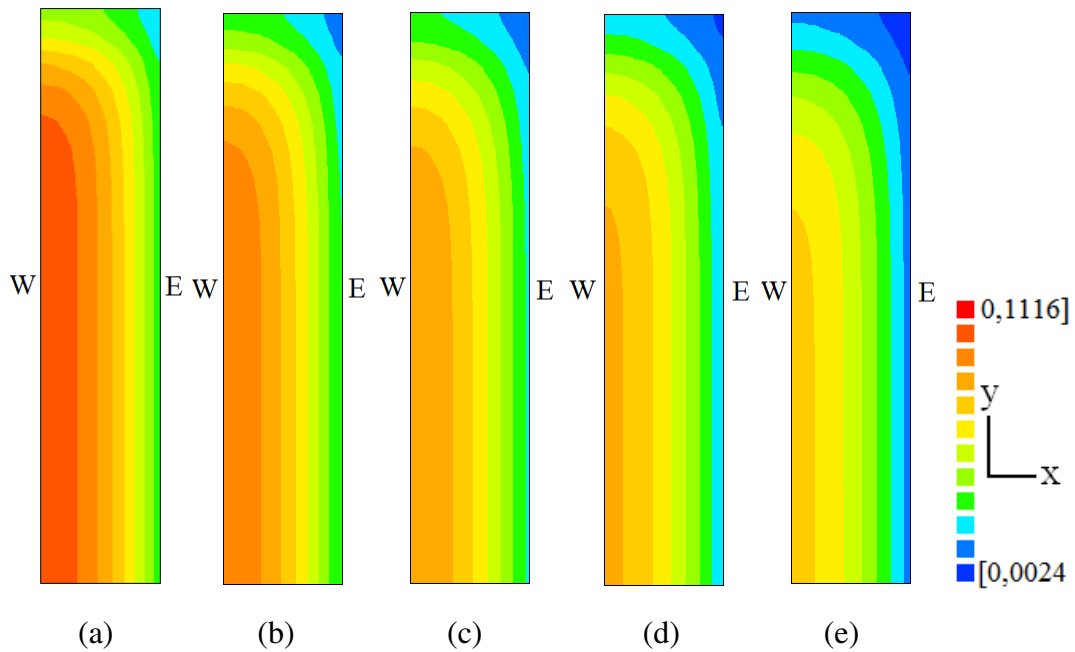


**Figura 4.33** - Distribuição espacial do teor de umidade para  $T = 90,0 \text{ }^\circ\text{C}$ , nos tempos: (a)  $t = 10,0 \text{ min}$ ; (b)  $t = 30,0 \text{ min}$ ; (c)  $t = 50,0 \text{ min}$ ; (d)  $t = 100,0 \text{ min}$ ; (e)  $t = 200,0 \text{ min}$ .

Através de uma observação da Figura 4.33, pode-se concluir que o transporte de água acontece de forma parecida com o das outras temperaturas, isto é, os elementos da malha mais externos secam de forma mais rápida que os elementos internos.

Gráficos de contorno mostrando a distribuição espacial do teor de umidade para todas as temperaturas do ar de secagem, em  $t = 30 \text{ min}$ , são mostrados na Figura 4. 34.

Através da Figura 4.34 pode-se concluir que, como esperado, as placas cerâmicas secam mais rapidamente à medida que a temperatura do ar de secagem cresce. Para  $T = 50,0 \text{ }^\circ\text{C}$ , por exemplo, nenhum elemento da malha atingiu o teor de umidade de equilíbrio em  $t = 30 \text{ min}$ , enquanto que para a temperatura de 90,0 °C, alguns elementos a nordeste já atingiram o valor de equilíbrio para o teor de umidade.

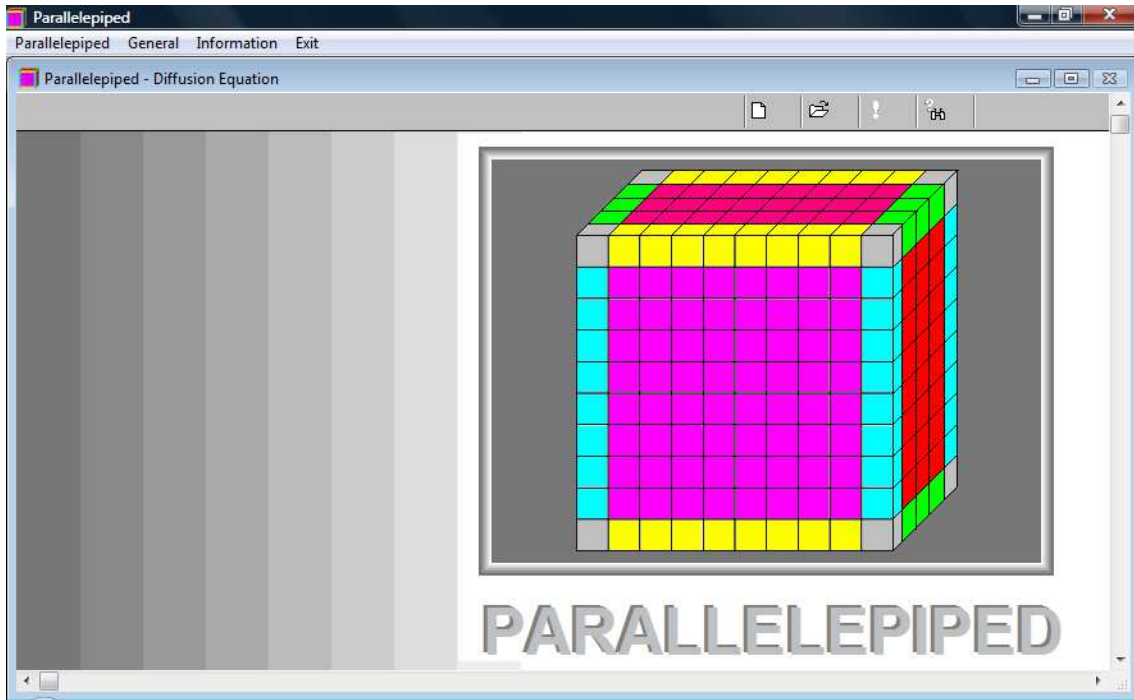


**Figura 4.34** - Distribuição espacial do teor de umidade no tempo  $t = 30$  min, para as seguintes temperaturas de secagem: (a)  $T = 50,0$  °C; (b)  $T = 60,0$  °C; (c)  $T = 70,0$  °C; (d)  $T = 80,0$  °C; (e)  $T = 90,0$  °C.

Para finalizar este subitem, pode-se dizer que em vários processos de secagem, pode acontecer que os parâmetros termofísicos sejam variáveis. Nestes casos, o modelo usado nesta secção não é o mais apropriado para descrever o processo de difusão, o qual pode ser descrito de forma mais precisa levando em consideração as variações dos parâmetros termofísicos das placas cerâmicas. Como as escalas de cores são diferentes não se esperar, por exemplo, que a Figura 4.34(a) seja estritamente igual à Figura 4.29(b).

### 4.3 Solução numérica: interface gráfica do *software* “Parallelepiped”

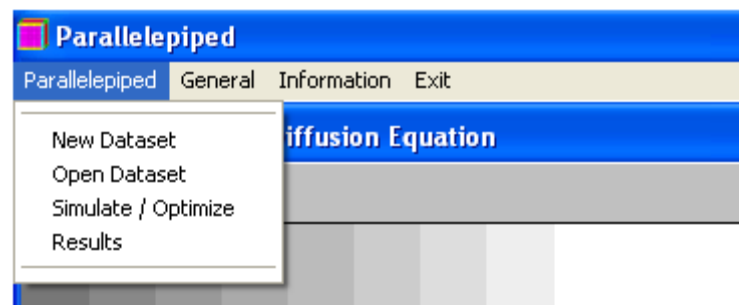
Os requisitos para a criação da interface gráfica do *solver* para a equação de difusão serão apresentados a seguir, e levam em consideração o pré-requisito de fácil comunicação *software*-usuário. O *software* desenvolvido recebeu a denominação de “Parallelepiped”, e a sua tela inicial tem a aparência mostrada na Figura 4.35. A sua comunicação com o usuário é estabelecida através dos seguintes menus: “Parallelepiped”, “General”, “Information” e “Exit”.



**Figura 4.35** - Tela principal do *software* desenvolvido.

### 4.3.1 O menu “Parallelepiped”

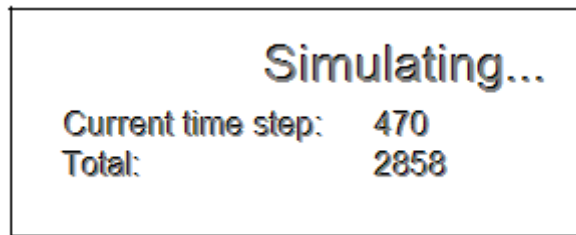
O primeiro menu é o “Parallelepiped” que, ao ser clicado, deve conter os seguintes itens: “New Dataset”, “Open Dataset”, “Simulate / Optimize” e “Results”, e é apresentado na Figura 4.36.



**Figura 4.36** - Detalhes do menu “Parallelepiped”.

Ao clicar na opção “New Dataset”, o usuário tem a opção de criar um novo arquivo de dados contendo todas as informações necessárias para resolver o problema

de difusão. Por outro lado, a opção “Open Dataset” abre um arquivo anteriormente salvo. Para iniciar uma simulação ou otimização, o item “Simulate”/”Optimize” deve ser clicado e uma das duas opções deve ser escolhida. Então, passa a aparecer uma mensagem contendo informações sobre o tempo de simulação ou otimização, conforme é apresentado na Figura 4.37. No caso de uma simulação, o termo “Current time step” dá o passo de tempo atual da simulação e “Total” fornece o número total de passos em que o tempo da simulação foi dividido.

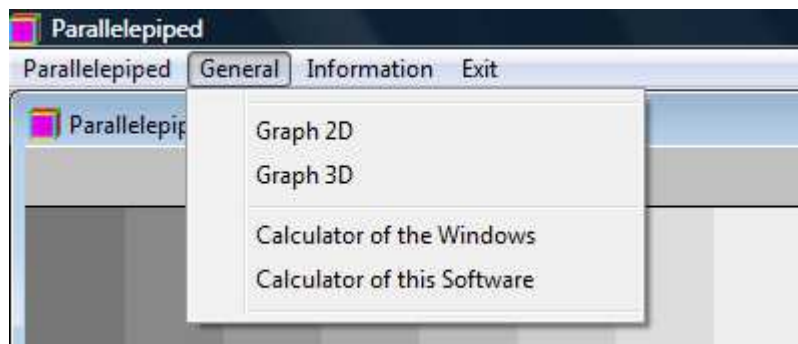


**Figura 4.37** - Informações sobre os passos de tempo da simulação.

O item “Results”, que é habilitado somente ao final de uma simulação ou otimização, apresenta todos os arquivos gerados pelo *software* desenvolvido.

### 4.3.2 O menu “General”

O menu “General” é apresentado na Figura 4.38.



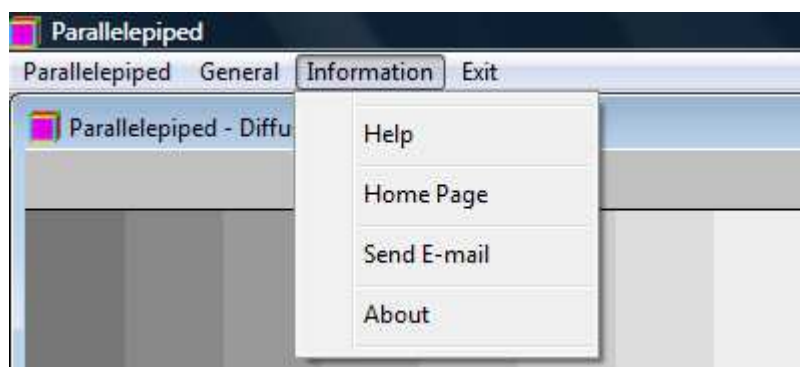
**Figura 4.38** - Detalhes do menu “General”.

Esse menu disponibiliza tanto a calculadora do Windows como também a calculadora desenvolvida no próprio *software*, o que é uma tarefa relativamente simples, uma vez que o código fonte do *parser* utilizado está incluído no *software* desenvolvido.

Além desses itens, o menu “General” disponibiliza também duas opções para traçar gráficos: bidimensional e tridimensional, através das opções “Graph 2D” e “Graph 3D”, respectivamente.

### 4.3.3 O menu “Information” e o menu “Exit”

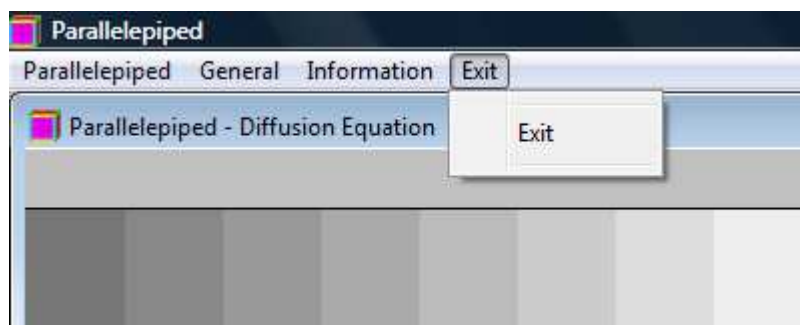
O menu “Information”, depois de clicado, abre 4 itens de forma sequencial, e é apresentado na Figura 4.39. Esse menu contém informações gerais através dos itens “Help”, “Home page”, “Send E-mail” e “About”.



**Figura 4.39** - Detalhes do menu “Information”.

No primeiro item deste menu são obtidas informações de ajuda sobre a utilização do *software*, enquanto que o segundo item fornece a opção para o usuário acessar o site do *software*. No terceiro item, existe a opção do usuário enviar e-mail para o autor e, no quarto e último item, o usuário obtém informações gerais sobre o *software*.

Por último, o menu “Exit” é apresentado na Figura 4.40 e possibilita encerrar o *software*.

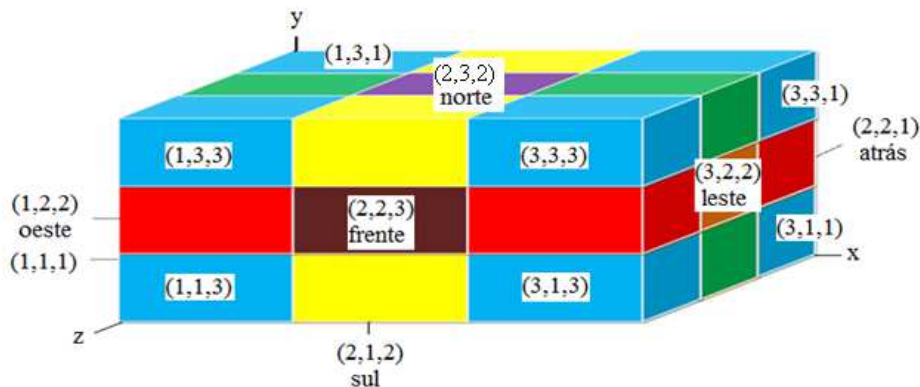


**Figura 4.40** - O menu “Exit”.

O *software* “Parallelepiped”, que possibilita simular ou otimizar a cinética de difusão em sólidos na forma de paralelepípedo e também determinar os parâmetros de transporte para essa geometria, é considerado uma das principais contribuições desse trabalho.

#### 4.4 Solução numérica para o paralelepípedo: testes de consistência

A situação física utilizada para avaliar a consistência do código computacional desenvolvido para a difusão em sólidos com a forma geométrica de um paralelepípedo, está esquematizada em detalhes na Figura 4.41, na qual se evidenciam os 27 tipos distintos de volumes de controle em estudo. O tempo total do processo difusivo foi estipulado em 432.000 s, e o número de passos de tempo foi de 5.000. Os parâmetros físicos usados para as simulações foram  $\Gamma^\Phi = 2,13 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  e  $h = 1,44 \times 10^{-7} \text{ m s}^{-1}$ . As dimensões e as condições inicial e de equilíbrio são as mesmas utilizadas no estudo do item 4.1.4.



**Figura 4.41** - Geometria (sem escala) em forma de paralelepípedo envolvendo uma malha 3 x 3 x 3 utilizada para testar a consistência do *solver* desenvolvido.

Para verificar a condição de simetria da situação física em questão, foi imposta a mesma condição de contorno para todas as faces do sólido, sendo analisados os transientes de volumes de controle simetricamente posicionados, de tal modo que o resultado esperado para  $\Phi$  fosse o mesmo. Portanto, foram escolhidos os volumes de controle nos oito vértices e nas seis faces do paralelepípedo.

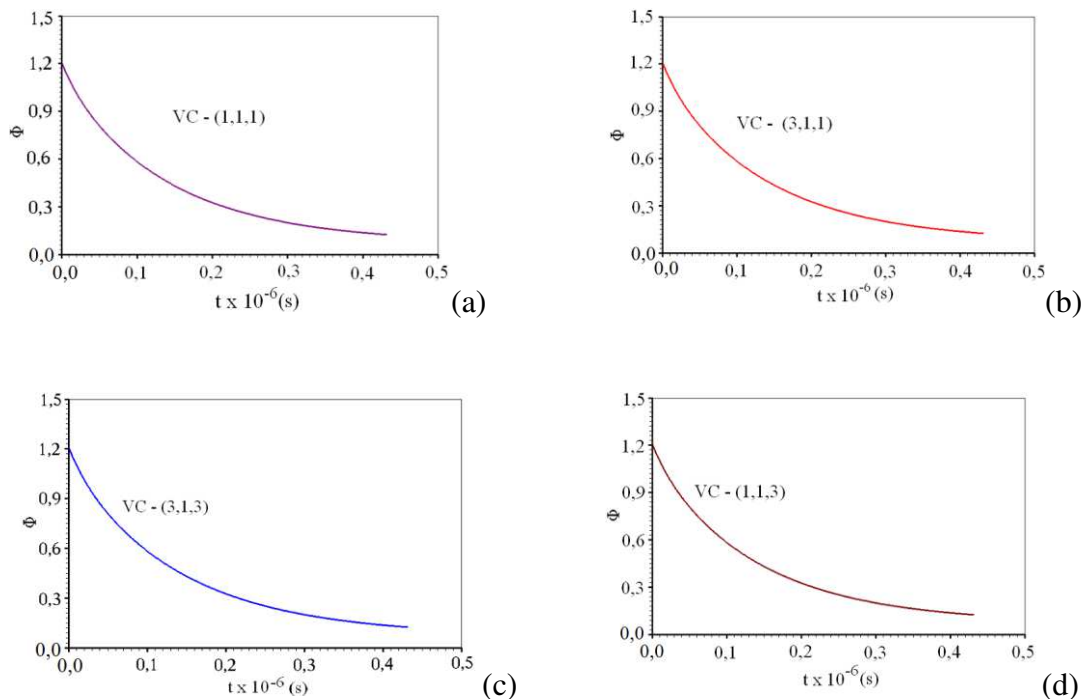
Para se obter os transientes referentes aos volumes de controle localizados nos vértices inferiores da geometria em forma de paralelepípedo foi feita, inicialmente, a

identificação dos quatro Volumes de Controle (VC), evidenciando-se as faces que se encontram em contato com o meio, conforme os dados da Tabela 4.13.

**Tabela 4.13** - Identificação dos volumes de controle localizados nos vértices inferiores da geometria em forma de paralelepípedo.

Faces	Volumes de controle
oeste, sul, atrás	VC - (1, 1, 1)
leste, sul, atrás	VC - (3, 1, 1)
leste, sul, frente	VC - (3, 1, 3)
oeste, sul, frente	VC - (1, 1, 3)

Usando-se o LAB Fit Curve Fitting *Software* V 7.2.46, desenvolvido por Silva e Silva (2009c) e disponível na internet em [www.labfit.net](http://www.labfit.net), os gráficos das soluções numéricas obtidas para  $\Phi$  em função do tempo foram gerados para cada um dos volumes de controle da Tabela 4.13. Os resultados obtidos são apresentados na Figura 4.42.

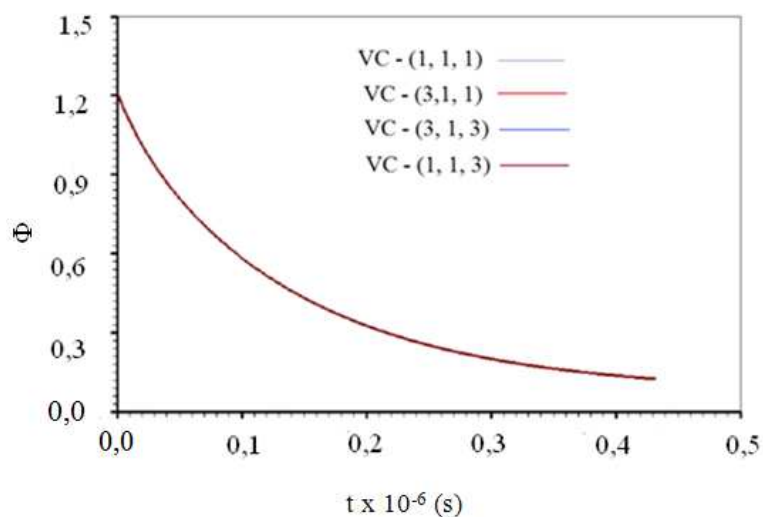


**Figura 4.42** - Transientes de  $\Phi$  para os volumes de controle listados na Tabela 4.13:

(a) oeste, sul, atrás; (b) leste, sul, atrás; (c) leste, sul, frente; (d) oeste, sul, frente.



Fazendo-se a superposição das cinéticas apresentadas nos gráficos da Figura 4.42, obtém-se o gráfico dado na Figura 4.43, através do qual se observa um excelente acordo entre as quatro curvas.



**Figura 4.43** - Superposição dos transientes de  $\Phi$  para volumes de controle localizados nos vértices inferiores do paralelepípedo.

Para se ter uma ideia quantitativa sobre os valores de  $\Phi$  para cada volume de controle, na Tabela 4.14 são apresentados dados para cinco instantes de tempo, previamente escolhidos. Os resultados mostrados evidenciam uma perfeita concordância entre os quatro volumes de controle destacados na Tabela 4.13.

**Tabela 4.14** - Valores de  $\Phi$  para os volumes de controle localizados nos vértices inferiores do paralelepípedo, para 5 instantes de tempo previamente escolhidos.

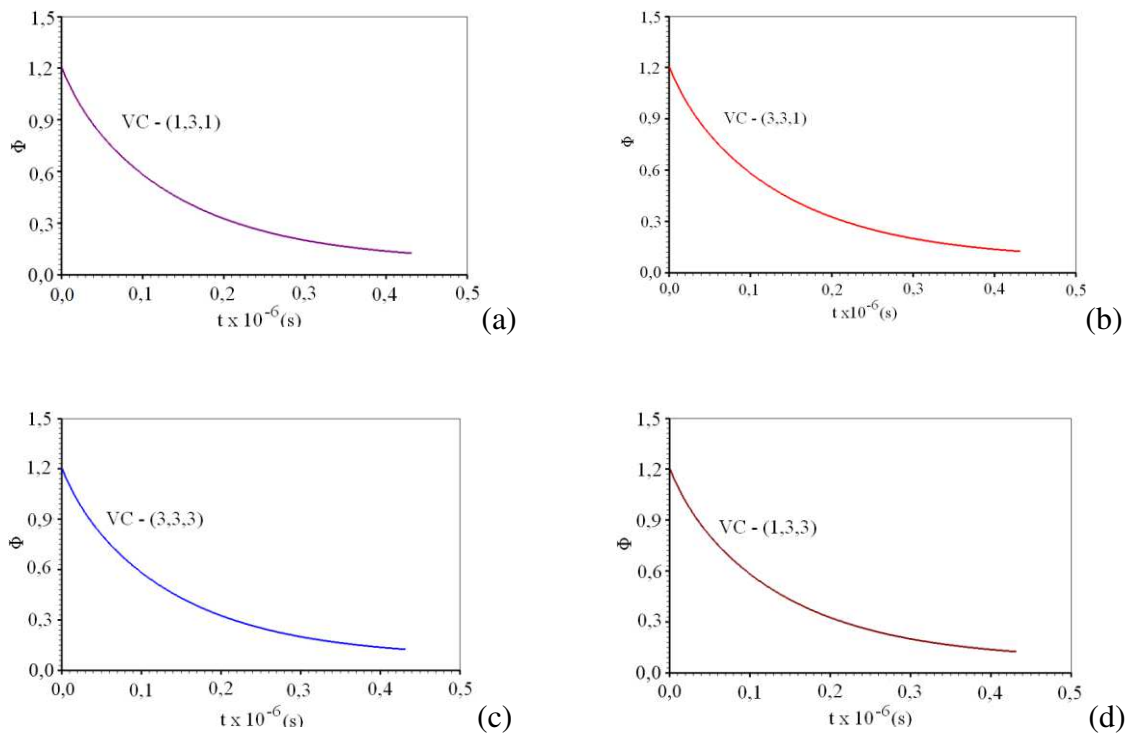
Tempo x 10 <sup>-6</sup> (s)	$\Phi_{VC - (1, 1, 1)}$	$\Phi_{VC - (3, 1, 1)}$	$\Phi_{VC - (3, 1, 3)}$	$\Phi_{VC - (1, 1, 3)}$
0,0	1,2130000	1,2130000	1,2130000	1,2130000
0,1	0,5830596	0,5830596	0,5830596	0,5830596
0,2	0,3255150	0,3255150	0,3255150	0,3255150
0,3	0,1994661	0,1994661	0,1994661	0,1994661
0,4	0,1363133	0,1363133	0,1363133	0,1363133

Com o mesmo procedimento, foram realizados testes de consistência para os volumes de controle dos vértices superiores do paralelepípedo, conforme listados na Tabela 4.15. Esses volumes de controle também estão simetricamente posicionados entre si.

**Tabela 4.15** - Identificação dos volumes de controle localizados nos vértices superiores da geometria em forma de paralelepípedo.

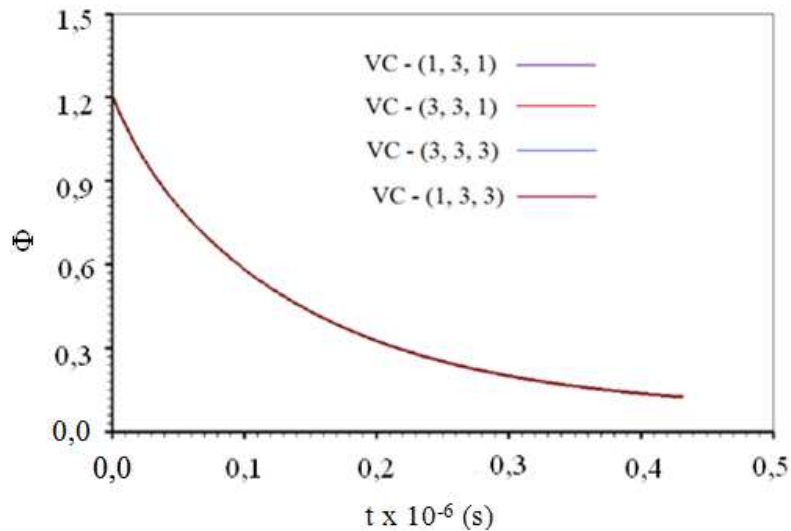
Faces	Volumes de controle
oeste, norte, atrás	VC - (1, 3, 1)
leste, norte, atrás	VC - (3, 3, 1)
leste, norte, frente	VC - (3, 3, 3)
oeste, norte, frente	VC - (1, 3, 3)

Os gráficos das soluções obtidas para  $\Phi$  em função do tempo foram gerados para cada um dos volumes de controle da Tabela 4.15, e são apresentados na Figura 4.44.



**Figura 4.44** - Transientes de  $\Phi$  para os volumes de controle listados na Tabela 4.15: (a) VC (1,3,1); (b) VC (3,3,1); (c) VC (3,3,3) e (d) VC (1,3,3).

Fazendo-se a superposição das cinéticas apresentadas nos gráficos da Figura 4.44, obtém-se o gráfico dado na Figura 4.45. Deve-se ressaltar que cada um dos volumes de controle em análise possui três faces em contato com o meio, e a condição de contorno é a convectiva.



**Figura 4.45** - Superposição dos transientes de  $\Phi$  para volumes de controle localizados nos vértices superiores do paralelepípedo.

Uma inspeção da Figura 4.45 possibilita afirmar que os últimos resultados obtidos também são consistentes, o que pode ser comprovado com os valores de  $\Phi$  apresentados na Tabela 4.16 para cinco instantes de tempo previamente escolhidos.

**Tabela 4.16** - Valores dos transientes de  $\Phi$  para os volumes de controle localizados nos vértices superiores do paralelepípedo, para 5 instantes de tempo previamente escolhidos.

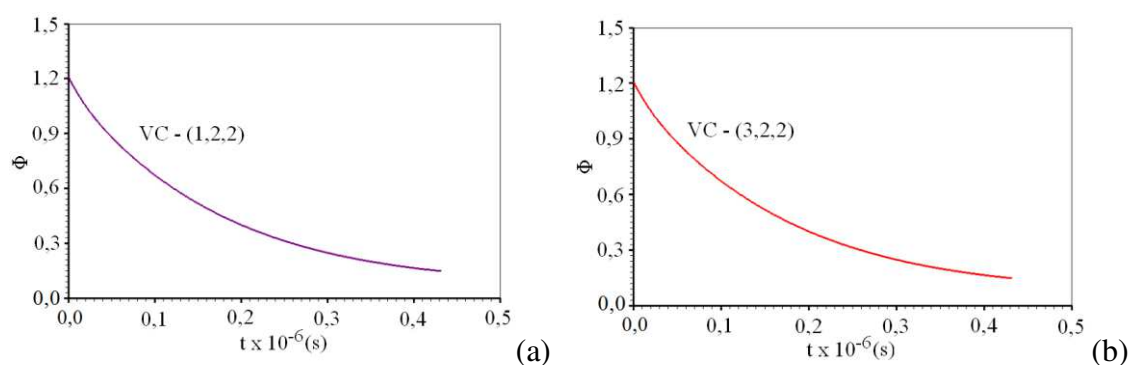
Tempo x 10 <sup>-6</sup> (s)	$\Phi_{VC - (1, 3, 1)}$	$\Phi_{VC - (3, 3, 1)}$	$\Phi_{VC - (3, 3, 3)}$	$\Phi_{VC - (1, 3, 3)}$
0,0	1,2130000	1,2130000	1,2130000	1,2130000
0,1	0,5830596	0,5830596	0,5830596	0,5830596
0,2	0,3255150	0,3255150	0,3255150	0,3255150
0,3	0,1994661	0,1994661	0,1994661	0,1994661
0,4	0,1363133	0,1363133	0,1363133	0,1363133

Continuando com os testes de consistência foram analisados os transientes referentes aos volumes de controle localizados no centro de cada face do paralelepípedo. Para tal, foi feita a identificação de cada um deles, conforme os dados da Tabela 4.17.

**Tabela 4.17** - Identificação dos volumes de controle localizados no centro de cada face do paralelepípedo.

Faces	Volumes de controle
leste	VC - (3, 2, 2)
oeste	VC - (1, 2, 2)
norte	VC - (2, 3, 2)
sul	VC - (2, 1, 2)
frente	VC - (2, 2, 3)
atrás	VC - (2, 2, 1)

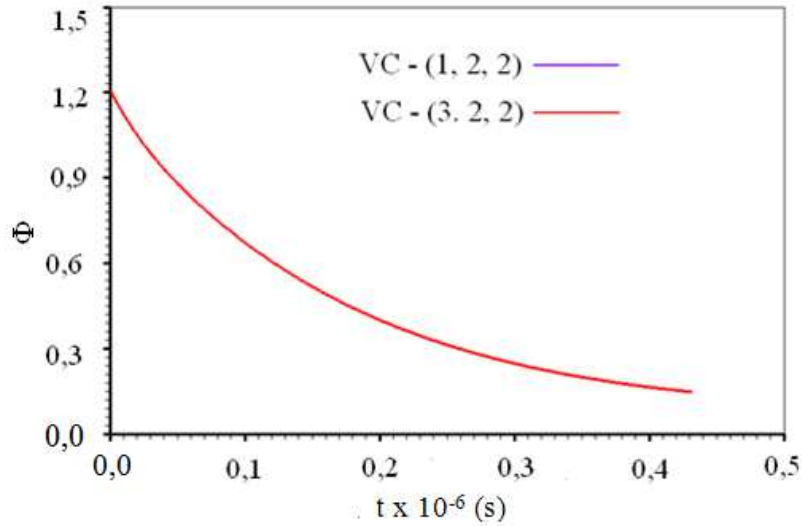
Procedendo-se da mesma forma utilizada para os volumes de controle nos vértices do paralelepípedo, foi realizado inicialmente o teste de consistência para os volumes de controle localizados nas faces leste e oeste. Espera-se que os mesmos apresentem resultados equivalentes para os seus transientes, já que estão simetricamente posicionados entre si. Os resultados são apresentados na Figura 4.46.



**Figura 4.46** - Transientes de  $\Phi$  para os volumes de controle nas fronteiras:

(a) leste; (b) oeste.

Fazendo-se a superposição das cinéticas apresentadas nos gráficos da Figura 4.46, obtém-se o gráfico dado na Figura 4.47.



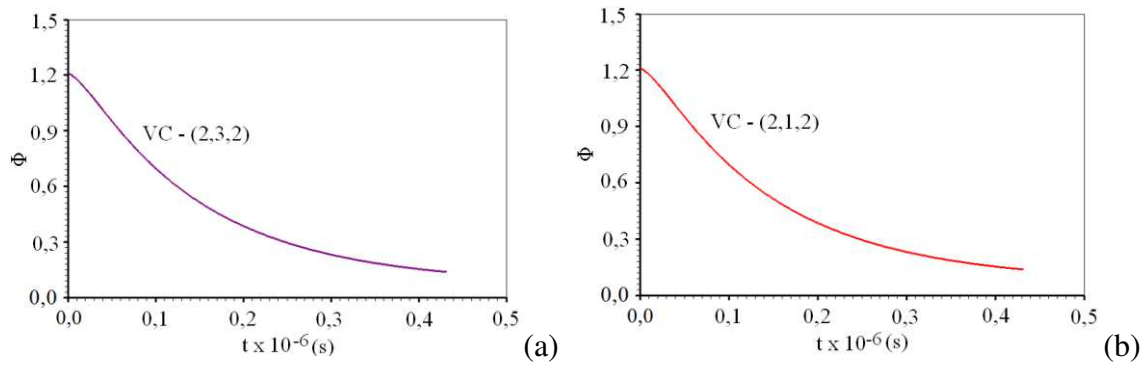
**Figura 4.47** - Superposição dos transientes de  $\Phi$  para volumes de controle identificados no centro das faces leste e oeste do paralelepípedo.

Na Tabela 4.18 são apresentados alguns valores de  $\Phi$  para os dois volumes de controle mencionados, em cinco instantes previamente estipulados. Estes resultados junto com os gráficos da Figura 4.47, enfatizam um perfeito acordo entre os transientes.

**Tabela 4.18** - Valores dos transientes de  $\Phi$  para os volumes de controle localizados no centro das faces leste e oeste do paralelepípedo, para cinco instantes de tempo.

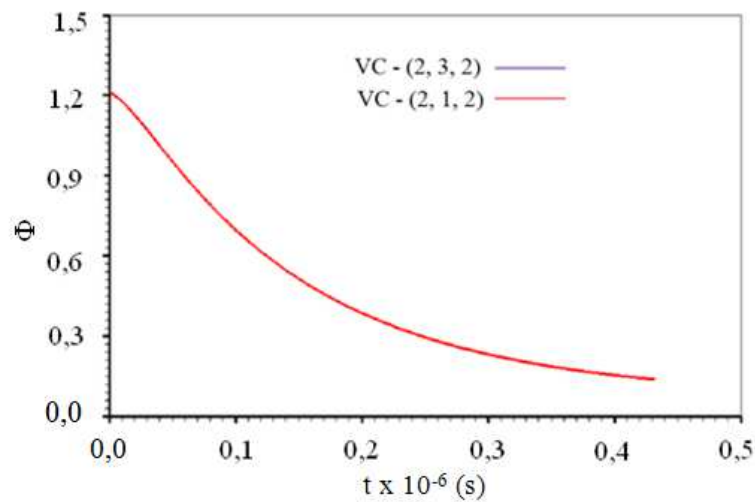
Tempo x $10^{-6}$ (s)	$\Phi_{VC - (3, 2, 2)}$	$\Phi_{VC - (1, 2, 2)}$
0,0	1,2130000	1,2130000
0,1	0,6728315	0,6728315
0,2	0,4001954	0,4001954
0,3	0,2472438	0,2472438
0,4	0,1641096	0,1641096

Na Figura 4.48 observam-se os transientes para os volumes de controle localizados no centro das faces norte e sul do paralelepípedo.



**Figura 4.48** - Transientes de  $\Phi$  para dois volumes de controle listados na Tabela 4.17  
(a) norte; (b) sul.

A fim de comparar os resultados obtidos para os dois volumes de controle mencionados, foi feita a superposição das curvas apresentadas nos gráficos da Figura 4.48, e o resultado é mostrado na Figura 4.49.



**Figura 4.49** - Superposição dos transientes de  $\Phi$  para volumes de controle localizados no centro das faces norte e sul do paralelepípedo para a condição de contorno convectiva.

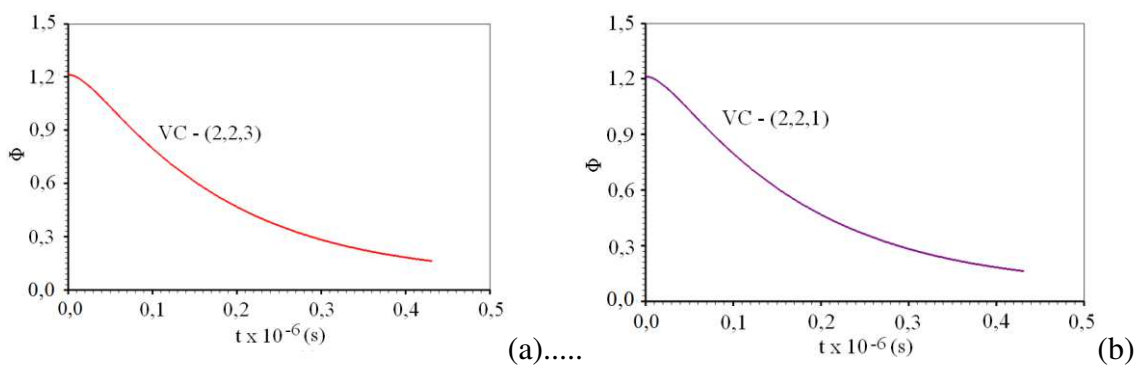
Os resultados observados na Tabela 4.19 foram obtidos para os volumes de controle simetricamente posicionados nas faces norte e sul, em cinco instantes de tempo escolhidos aleatoriamente.

**Tabela 4.19** - Valores dos transientes de  $\Phi$  para os volumes de controle localizados nas faces norte e sul do paralelepípedo, para cinco instantes de tempo quaisquer.

Tempo x $10^{-6}$ (s)	$\Phi_{VC - (2, 3, 2)}$	$\Phi_{VC - (2, 1, 2)}$
0,0	1,2130000	1,2130000
0,1	0,6972280	0,6972280
0,2	0,3851591	0,3851591
0,3	0,2306570	0,2306570
0,4	0,1527805	0,1527805

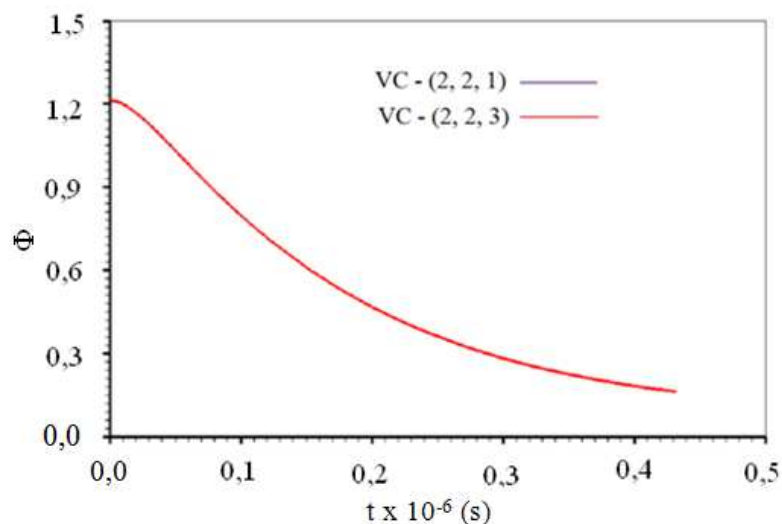
Uma inspeção dos valores mostrados na Tabela 4.19 e das curvas apresentadas na Figura 4.49 permite afirmar que houve uma excelente concordância entre os resultados obtidos para os dois volumes de controle em análise.

Para os volumes de controle posicionados simetricamente nas faces frente e atrás, os transientes são apresentados na Figura 4.50.



**Figura 4.50** - Transientes de  $\Phi$  para dois volumes de controle listados na Tabela 4.17: (a) frente; (b) atrás.

A superposição das cinéticas apresentadas nos gráficos da Figura 4.50 aparece na Figura 4.51, através da qual se verifica que não houve distinção entre as curvas.



**Figura 4.51** - Superposição dos transientes de  $\Phi$  para volumes de controle localizados no centro das faces frente e atrás do paralelepípedo para a condição de contorno convectiva.

Os resultados da Tabela 4.20 mostram alguns valores de  $\Phi$  para os volumes de controle acima referenciados, em cinco instantes de tempo escolhidos aleatoriamente.

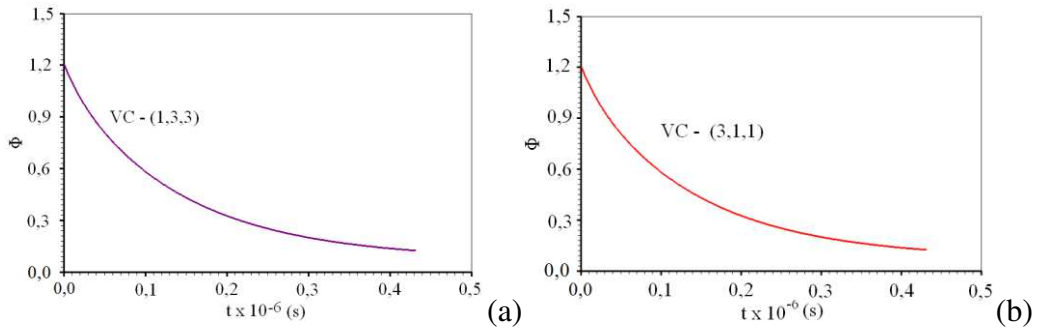
**Tabela 4.20** - Valores dos transientes de  $\Phi$  para os volumes de controle localizados nas faces frente e atrás do paralelepípedo, para cinco valores de tempo quaisquer.

Tempo x $10^{-6}$ (s)	$\Phi_{VC - (2, 2, 3)}$	$\Phi_{VC - (2,2,1)}$
0,0	1,2130000	1,2130000
0,1	0,7979820	0,7979820
0,2	0,4674450	0,4674450
0,3	0,2820717	0,2820717
0,4	0,1819342	0,1819342

Os últimos resultados apresentados na Figura 4.51 e na Tabela 4.20 possibilitam afirmar que houve uma concordância muito boa entre os transientes dos volumes de controle localizados nas faces atrás e frente do paralelepípedo. Esse é mais um resultado positivo para consolidar a consistência do *solver* desenvolvido neste trabalho.

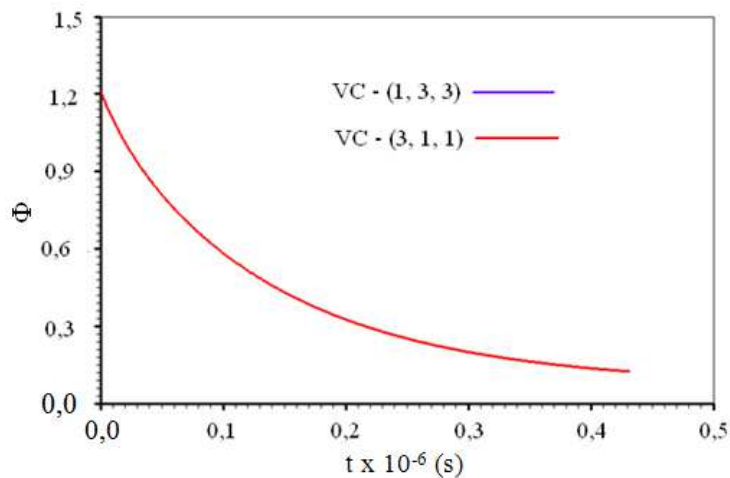


Para finalizar os testes de consistência, foram analisados mais dois volumes de controle simetricamente posicionados no paralelepípedo, e para os quais também se espera que os resultados sejam coincidentes. Assim sendo, foram escolhidos os volumes de controle (oeste-norte-frente) e (leste-sul-atrás) identificados, respectivamente, por VC (1, 3, 3) e VC (3, 1, 1). Os resultados para os transientes de cada um dos volumes de controle aparecem na Figura 4.52.



**Figura 4.52** - Transientes de  $\Phi$  para dois volumes de controle simetricamente posicionados no paralelepípedo: (a) VC (1, 3, 3); (b) VC (3, 1, 1).

Para verificar se os transientes realmente coincidem, foi feita a superposição das cinéticas apresentadas nos gráficos da Figura 4.52. O gráfico resultante é apresentado na Figura 4.53, através do qual pode-se verificar que houve uma perfeita justaposição nas curvas traçadas. É possível afirmar, portanto, que houve consistência nos resultados obtidos para os dois transientes.



**Figura 4.53** - Superposição dos transientes de  $\Phi$  para dois volumes de controle simetricamente posicionados para a condição de contorno convectiva.

Para confirmar os resultados apresentados na Figura 4.53, alguns valores do transiente de  $\Phi$  em cinco instantes de tempo previamente escolhidos, para os dois volumes de controle analisados, são apresentados na Tabela 4.21.

**Tabela 4.21** - Valores dos transientes de  $\Phi$  para dois volumes de controle do paralelepípedo da Figura 4.21, em cinco instantes de tempo quaisquer.

Tempo x $10^{-6}$ (s)	$\Phi_{VC - (1, 3, 3)}$	$\Phi_{VC - (3, 1, 1)}$
0,0	1,2130000	1,2130000
0,1	0,5830596	0,5830596
0,2	0,3255150	0,3255150
0,3	0,1994661	0,1994661
0,4	0,1363133	0,1363133

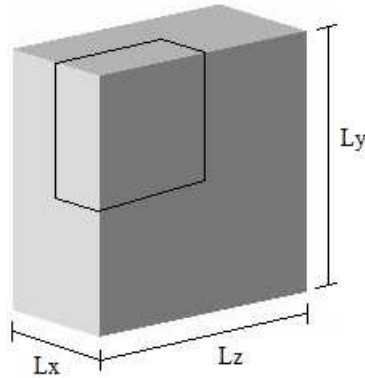
Observando a Tabela 4.21, verifica-se que houve uma total coincidência entre os valores de  $\Phi$  apresentados para os dois volumes de controle, a exemplo dos testes anteriores.

A partir dos resultados obtidos para os transientes, de acordo com o que foi mostrado nas Figuras de 4.42 a 4.53 e nas Tabelas de 4.13 a 4.21, verifica-se a completa concordância dos resultados obtidos para os transientes de  $\Phi$ . Logo, é possível confirmar a consistência do *solver* desenvolvido para a geometria em forma de paralelepípedo, já que a condição de simetria para os volumes de controle analisados foi verificada em todas as situações. Uma vez que a consistência da solução numérica foi verificada, é possível tirar proveito da geometria regular do paralelepípedo, explorando a condição de simetria, se existir, na tentativa de diminuir o esforço computacional, conforme será visto a seguir.

#### 4.5 Solução numérica para o paralelepípedo: simetria

A fim de explorar a condição de simetria verificada na seção anterior, foi realizada uma simulação, considerando um paralelepípedo com as seguintes dimensões:

$L_x = 6,5 \times 10^{-3}$  m;  $L_y = 45,5 \times 10^{-3}$  m e  $L_z = 82,1 \times 10^{-3}$  m. Para tirar proveito da simetria deve-se usar, então, 1/8 do paralelepípedo, conforme a situação física esquematizada na Figura 4.54.



**Figura 4.54** - Esquema utilizado para explorar a condição de simetria: destaque para a parte do sólido que será analisada: 1/8 do paralelepípedo (fora de escala).

O intervalo de tempo do processo difusivo foi de 0,2725 s, enquanto que o número de passos no tempo foi de 2000. Os parâmetros físicos usados para simular esta situação foram  $\Gamma^{\phi} = 5,31159 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  e  $h = 4,98472 \times 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$ , em todas as faces do paralelepípedo. A malha uniforme para o paralelepípedo inteiro foi 20 x 20 x 20 volumes de controle. Os valores do teor de umidade inicial e de equilíbrio são respectivamente 1 e 0.

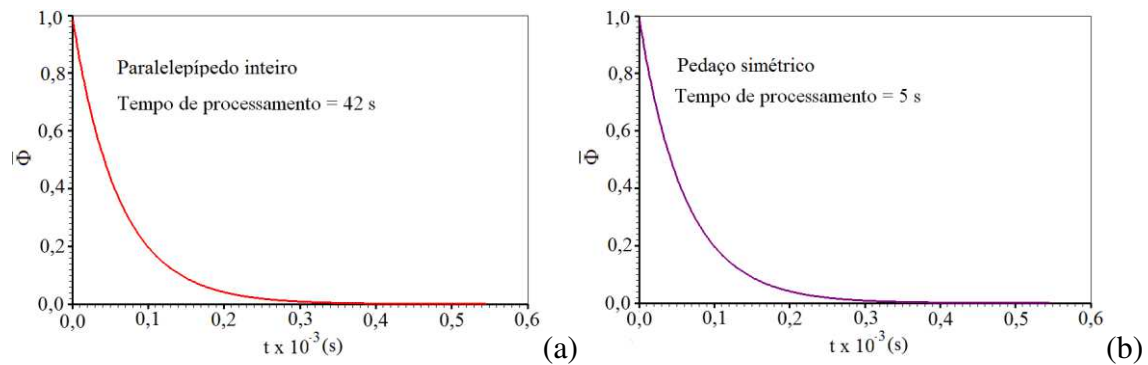
Inicialmente foi analisada a cinética do processo difusivo para o paralelepípedo inteiro, mostrado na Figura 4.54. Verificou-se que o tempo de processamento foi de 42 s, para as condições estipuladas.

Em seguida, foi utilizada uma malha que representa apenas 1/8 do paralelepípedo inteiro, conforme destaque na Figura 4.54. As dimensões usadas foram as seguintes:  $L_x/2 = 3,25 \times 10^{-3}$  m;  $L_y/2 = 22,75 \times 10^{-3}$  m e  $L_z/2 = 41,05 \times 10^{-3}$  m. O intervalo de tempo do processo difusivo foi de 0,2725 s, para um número de passos de tempo igual a 2000. Desta vez, a malha foi dividida em 10 x 10 x 10 volumes de controle, enquanto os valores do teor de umidade inicial e de equilíbrio foram mantidos respectivamente em 1 e 0. Os parâmetros termofísicos utilizados para simular esta situação física foram os mesmos usados ao se considerar o paralelepípedo inteiro.

Entretanto, para o coeficiente de transferência convectivo, deve-se observar que, para se considerar a simetria, torna-se necessário a imposição de fluxo zero nas faces oeste, sul e atrás, o que corresponde a  $h_w = h_s = h_b = 0$ . Assim sendo, só existe fluxo convectivo nas faces leste, norte e frente, com o coeficiente de transferência convectivo dado por:  $h_e = h_n = h_f = 4,98472 \times 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$ .

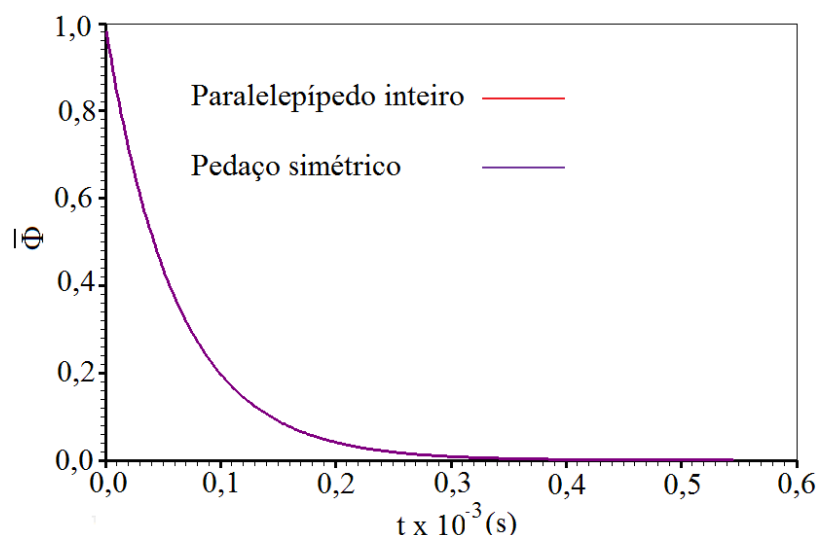
Nesse caso, foi verificado que o tempo de processamento gasto para realizar a simulação foi cerca de 5 s. Pode-se concluir, portanto, que ao se considerar a simetria do sólido em estudo, tem-se a redução de cerca de 8 vezes no tempo de processamento do *solver*. Em adição a isto, observa-se, também, uma grande redução no número de dados a serem armazenados durante o processamento.

Diante da grande vantagem em relação à redução do tempo computacional e ao espaço de memória requerido, os resultados obtidos sem a consideração da simetria e aqueles oriundos da solução numérica ao se considerar a simetria foram comparados, com o intuito de verificar se os resultados obtidos nos dois casos eram consistentes. Para tal, foi analisada a evolução temporal do valor médio da grandeza, com e sem simetria, e os resultados são apresentados na Figura 4.55.



**Figura 4.55** - Valor médio de  $\Phi$  para o paralelepípedo da Figura 4.54:  
(a) paralelepípedo inteiro; (b) pedaço simétrico.

Na Figura 4.56 aparece a superposição das duas curvas apresentadas na Figura 4.55.



**Figura 4.56** - Superposição do valor médio de  $\Phi$  no paralelepípedo inteiro e do pedaço simétrico.

Através da Figura 4.56, observa-se que não há diferenças perceptíveis nas linhas que representam os gráficos. Assim, é possível afirmar que existe uma perfeita concordância entre as duas cinéticas. Na Tabela 4.22 são apresentados alguns dos resultados obtidos para o valor médio de  $\Phi$  em seis instantes de tempo escolhidos aleatoriamente, com e sem a consideração da simetria.

**Tabela 4.22** - Valores médios de  $\Phi$  para 6 valores de tempo quaisquer.

Tempo (s)	$\bar{\Phi}$ sem simetria	$\bar{\Phi}$ com simetria
10	0,8437127	0,8437127
50	0,4391791	0,4391789
100	0,1976718	0,1976715
200	$4,0655617 \times 10^{-2}$	$4,0655244 \times 10^{-2}$
300	$8,4570040 \times 10^{-3}$	$8,4565437 \times 10^{-3}$
400	$1,7685931 \times 10^{-3}$	$1,7681410 \times 10^{-3}$

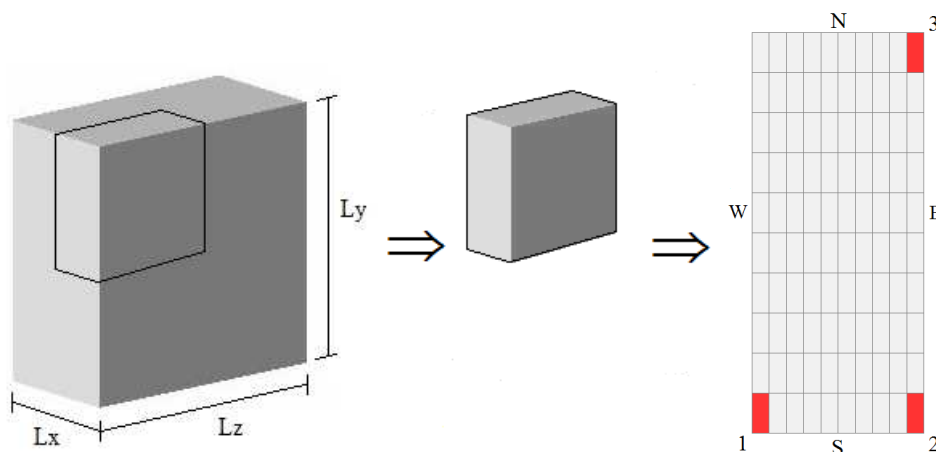
A concordância observada nos valores médios de  $\Phi$  em função do tempo, tanto nos dados da Tabela 4.22 quanto nos gráficos da Figura 4.56, evidencia a importância da utilização da simetria no processo difusivo em estudo, devido à redução do tempo de

processamento do programa desenvolvido e à economia de memória para armazenamento de dados.

Assim, mais uma vez, pode-se afirmar que existe consistência entre os resultados obtidos com o *software* proposto neste trabalho.

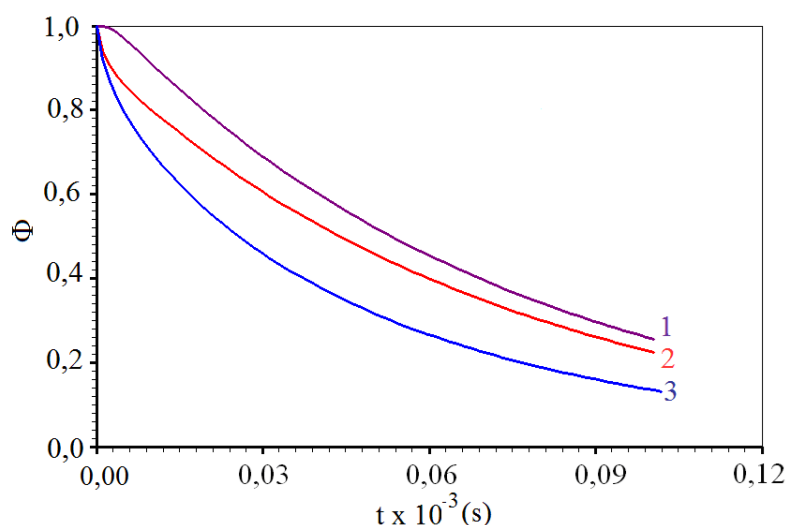
#### 4.6 Teste de coerência

Um teste para analisar a coerência dos resultados foi realizado, utilizando-se 1/8 do paralelepípedo da Figura 4.54. Todas as características físicas, bem como a discretização no tempo e no espaço foram os mesmos utilizados na Seção 4.4. Para tal, três volumes de controle estrategicamente escolhidos tiveram seus transientes analisados. Estes volumes de controle aparecem destacados na Figura 4.57, a qual apresenta o plano central do paralelepípedo e, portanto atrás da parte que representa 1/8 do paralelepípedo. Observa-se que o volume de controle número 1 está localizado no centro do sólido e, portanto, a oeste, ao sul e atrás da parte destacada (1/8), sendo identificado por (1, 1, 1). O volume de controle de número 2 está localizado a leste, ao sul e atrás, sendo identificado por (10, 1, 1). Já o volume de controle número 3 está localizado a leste, ao norte e atrás, e sua identificação é feita por (10, 10, 1).



**Figura 4.57** – Paralelepípedo inteiro, pedaço simétrico (1/8) e a malha na superfície de trás do pedaço simétrico, destacando os volumes de controle, 1 (sudoeste), 2 (sudeste) e 3 (nordeste).

A Figura 4.58 mostra a evolução temporal de  $\Phi$  para cada um dos três volumes de controle destacados na Figura 4.57.



**Figura 4.58** - Evolução temporal de  $\Phi$  para os volumes de controle destacados na malha da Figura 4.57: 1 (sudeste); 2 (sudeste) e 3 (nordeste).

Os resultados apresentados na Figura 4.58 evidenciam a coerência quanto ao fenômeno físico da difusão. Observa-se que o transporte da grandeza ocorre de forma mais lenta para o volume de controle no meio do paralelepípedo e, portanto, a sudoeste da malha, com destaque de número (1), mostrada na Figura 4.57. No volume de controle a nordeste da malha, com destaque de número (3), a grandeza é transportada mais rapidamente. O volume de controle a sudoeste da malha, mostrada com destaque de número (2), possui uma velocidade de transporte intermediária entre os volumes 1 e 3 (SILVA, 2007; FARIAS, 2011).

Já que as condições de simetria e de consistência foram verificadas em todos os testes realizados e, além disso, foi verificada a coerência dos resultados quanto ao fenômeno físico estudado, pode-se afirmar que o *software* desenvolvido é consistente e coerente para qualquer paralelepípedo.

Apesar das conclusões positivas obtidas quanto à coerência e consistência dos resultados, não se pode afirmar que tais resultados sejam corretos. Para isto, é necessário validar a solução numérica (*solver*) proposta, o que foi feito na próxima seção.

## **4.7 Validação do *solver* usando solução analítica da equação de difusão**

Para a validação do *solver* desenvolvido via soluções analíticas, foram realizados estudos teóricos para o transporte da grandeza de interesse  $\Phi$ . Primeiramente, foi atribuída ao sólido uma geometria unidimensional, representada por uma parede infinita. Em seguida, foi feita a validação para uma geometria tridimensional, representada por um paralelepípedo impondo-se, a ambas geometrias, condições de contorno de primeiro e/ou de terceiro tipos.

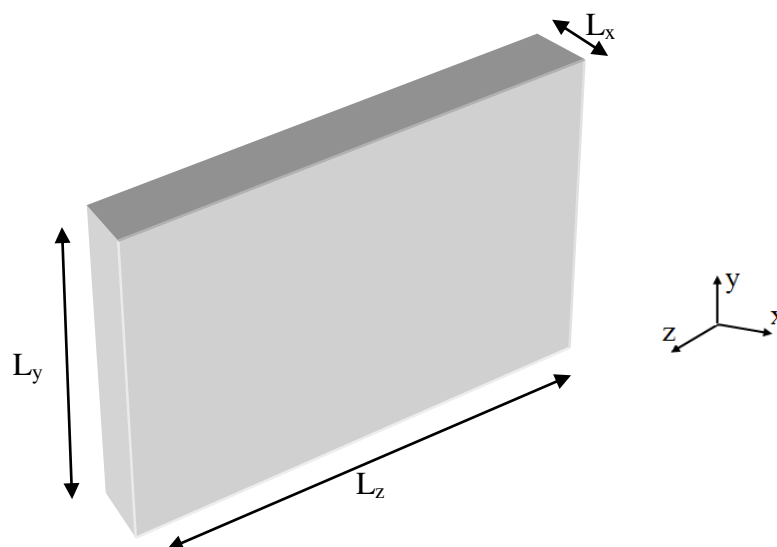
Nesses estudos, tanto na solução analítica, como na solução numérica proposta, foi considerado, para o parâmetro de transporte  $\lambda$ , um valor constante e igual à unidade. Foi considerada, também, uma distribuição inicial uniforme para a grandeza de transporte  $\Phi$ , mantendo-se ainda os coeficientes de transporte e as dimensões do sólido constantes durante todo o processo. Além disso, foi imposta a mesma condição de contorno (prescrita ou convectiva), o mesmo valor de equilíbrio da grandeza em todas as faces do sólido. Ainda, a difusão foi considerada como um processo sem geração de energia, ou seja, o termo fonte foi feito igual a zero.

### **4.7.1 Soluções analíticas da equação de difusão 1D: valor médio da grandeza para uma parede infinita**

Para a validação da solução numérica proposta para o processo de difusão descrito pela Equação (3.17), realizou-se o primeiro teste referente à geometria unidimensional.

Como a equação a ser resolvida neste trabalho envolve um domínio físico tridimensional simulou-se uma parede infinita a partir da utilização de um paralelepípedo com o comprimento ( $L_z$ ) e a largura ( $L_y$ ) muito maiores do que a espessura ( $L_x$ ). Assim, foi usado um paralelepípedo com as seguintes dimensões:  $L_x = 3,0 \times 10^{-3}$  m;  $L_y = 200,0 \times 10^{-3}$  m e  $L_z = 200,0 \times 10^{-3}$  m, conforme esquematizado na Figura 4.59. Procedendo deste modo, o fluxo da grandeza de interesse ocorre principalmente na direção x.

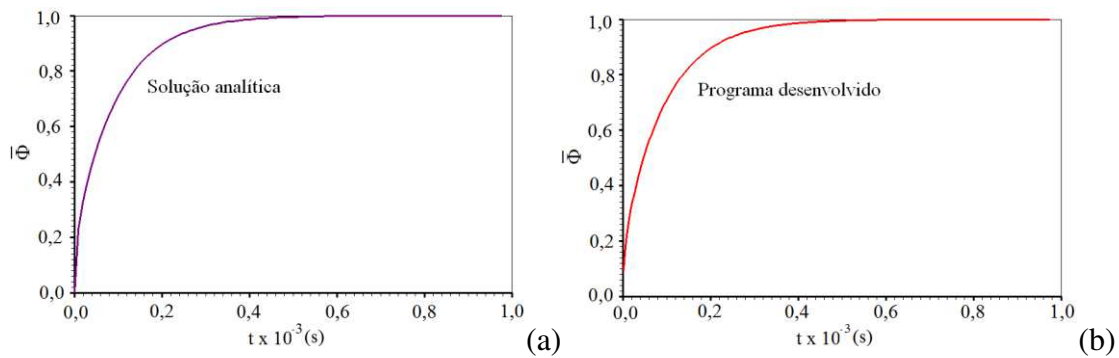




**Figura 4.59** - Paralelepípedo (fora de escala), destacando a simulação de uma parede infinita.

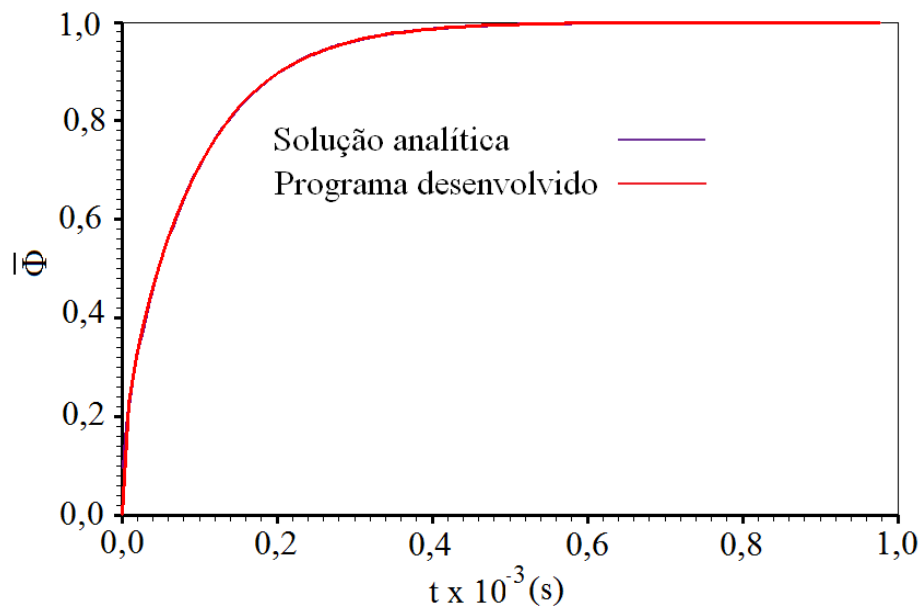
O intervalo de tempo do processo difusivo foi de 0,9762 s e o número de passos de tempo foi igual a 1000. Os parâmetros físicos usados para simular esta situação foram  $\Gamma^\Phi = 9,3395 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  e  $h = 1,0 \times 10^{+20} \text{ m s}^{-1}$ . Este último valor foi necessário para simular a condição de contorno de equilíbrio. Os valores do teor de umidade inicial e de equilíbrio são, respectivamente, 0 e 1.

Para a condição de contorno prescrita, os resultados numéricos obtidos com uma malha  $30 \times 30 \times 30$  foram comparados com os resultados da solução analítica, obtida com o *software* “Prescribed Adsorption - Desorption” V. 2.2, desenvolvido por Silva e Silva (2009b), disponível em <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/Prescribed.htm>, e acessado em março de 2011. Usando o programa LAB Fit Curve Fitting Software V 7.2.46, obtiveram-se os gráficos para o valor médio de  $\Phi$  em função do tempo e os gráficos obtidos são mostrados na Figura 4.60.



**Figura 4.60** - Transientes dos valores médios de  $\Phi$  em uma parede infinita com condição de contorno prescrita: (a) solução analítica ; (b) solver desenvolvido.

Com o mesmo procedimento, obteve-se a superposição das duas soluções, conforme mostra a Figura 4.61.



**Figura 4.61** - Superposição das soluções analítica e do *solver* desenvolvido para o valor médio de  $\Phi$  numa parede infinita com condição de contorno prescrita.

Os resultados observados na Tabela 4.23, para alguns valores médios de  $\Phi$ , em cinco instantes de tempo escolhidos ao acaso, enfatizam uma boa concordância entre os resultados obtidos com as duas soluções. Esta concordância já havia sido verificada na Figura 4.61.

**Tabela 4.23** - Valores médios de  $\Phi$  para 5 valores de tempo quaisquer.

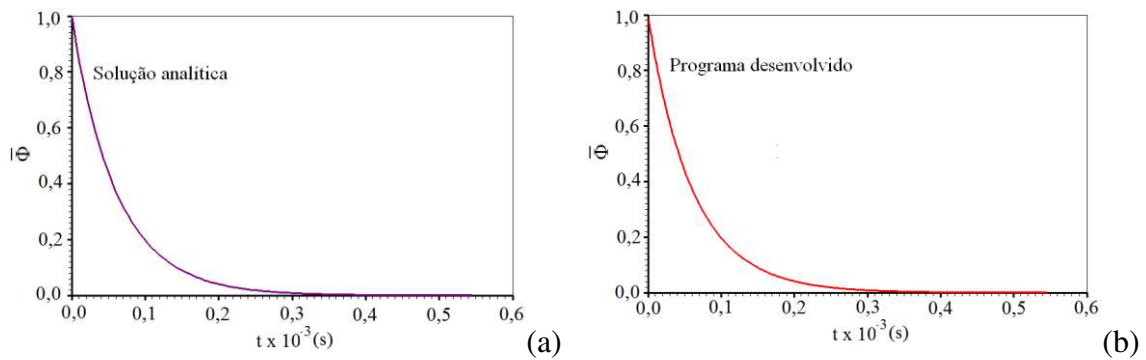
Tempo x $10^{-3}$ (s)	$\bar{\Phi}$ analítica	$\bar{\Phi}$ solver
0,205	0,9007026	0,9006240
0,400	0,9865566	0,9862684
0,605	0,9983531	0,9982946
0,800	0,9997770	0,9997615
0,976	0,9997615	0,9997550

Foram testadas, também, as soluções supondo que os fluxos estivessem nas direções  $y$  e  $z$ . Os resultados apresentaram a mesma concordância, permitindo comprovar a validação do *software* desenvolvido para resolver numericamente a equação de difusão em uma parede infinita com condição de contorno do primeiro tipo.

#### **4.7.2 Soluções analíticas da equação de difusão 3D: valor médio da grandeza para um paralelepípedo**

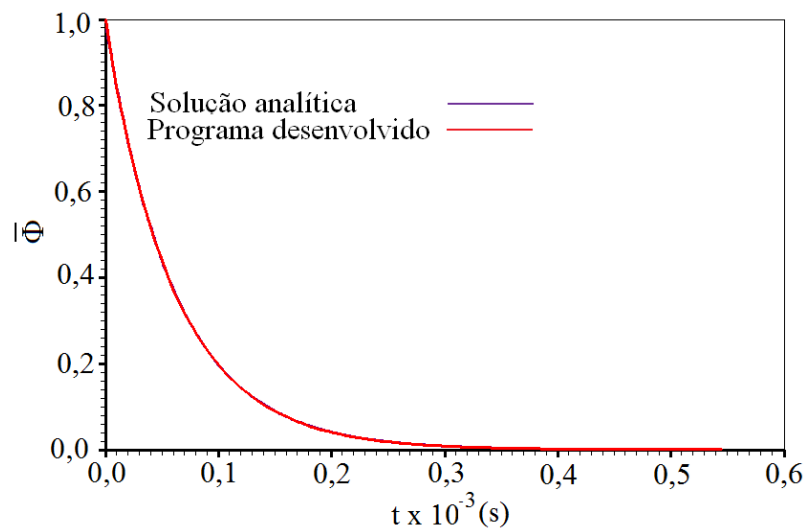
A fim de validar o *solver* desenvolvido para uma forma geométrica tridimensional, foi utilizado um paralelepípedo com as seguintes dimensões:  $L_x = 6,5 \times 10^{-3}$  m;  $L_y = 45,5 \times 10^{-3}$  m e  $L_z = 82,1 \times 10^{-3}$  m.

O intervalo de tempo do processo difusivo foi de 0,2725 s e o número de passos de tempo foi de 2000. Empregando-se a condição de contorno do terceiro tipo, os parâmetros físicos usados para simular esta situação foram  $\Gamma^\Phi = 5,31159 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  e  $h = 4,98472 \times 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$ . Os valores do teor de umidade inicial e de equilíbrio são respectivamente 1 e 0. Para esta condição de contorno (convectiva), os resultados em estudo foram comparados com a solução analítica obtida com o *software* “Convective Adsorption - Desorption”, V. 2.4, desenvolvido por Silva e Silva (2009b), disponível na internet no seguinte endereço: <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/Convective.htm>, e acessado em março de 2011. Os gráficos do valor médio de  $\Phi$  em função do tempo, para a solução analítica e para o programa desenvolvido (solver), são apresentados na Figura 4.62.



**Figura 4.62** - Transientes dos valores médios de  $\Phi$  em um paralelepípedo com condição de contorno convectiva: (a) solução analítica e (b) programa desenvolvido.

A superposição das curvas é mostrada na Figura 4.63 e, mais uma vez, verifica-se que não há diferenças perceptíveis entre as duas curvas.



**Figura 4.63** - Superposição das soluções analítica e do programa desenvolvido para o valor médio de  $\Phi$  num paralelepípedo com condição de contorno convectiva.

Enfatiza-se novamente aqui que, com a superposição das curvas referentes aos resultados analítico e numérico mostrada na Figura 4.63, o programa desenvolvido é válido para uma geometria tridimensional (paralelepípedo) com condição de contorno do terceiro tipo.

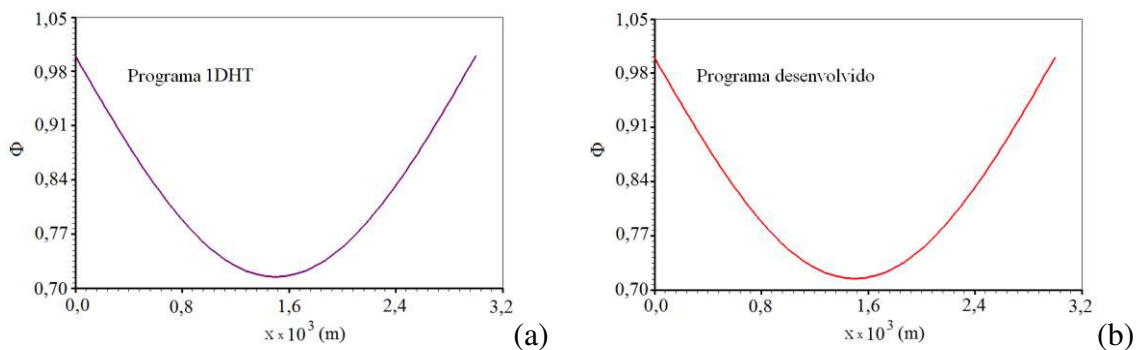
#### 4.8 Validação do solver desenvolvido via soluções numéricas: distribuição espacial em uma parede infinita

Para a validação do programa desenvolvido a partir da solução numérica, foram simulados inicialmente problemas cujos parâmetros de processo fossem constantes e conhecidos. A forma geométrica utilizada para os testes foi a de uma parede infinita e a condição de contorno utilizada foi a de equilíbrio, envolvendo a análise da distribuição espacial de  $\Phi$  em instante de tempo previamente estipulado.

Simulou-se uma parede infinita a partir da utilização de um paralelepípedo com largura ( $L_y = 200,0 \times 10^{-3}$  m) e comprimento ( $L_z = 200,0 \times 10^{-3}$  m) muito maiores do que a espessura ( $L_x = 3,0 \times 10^{-3}$  m). O intervalo de tempo do processo difusivo foi de 0,4881 s e o número de passos de tempo foi de 300, com 450 ( $3 \times 3 \times 50$ ) volumes de controle. Os parâmetros físicos usados para simular esta situação foram  $\Gamma^\Phi = 9,3395 \times 10^{-9}$  m<sup>2</sup> s<sup>-1</sup> e  $h_e = h_w = 1,0 \times 10^{+20}$  m s<sup>-1</sup>, com os demais valores iguais a zero. Os valores do teor de umidade inicial e de equilíbrio foram de respectivamente 0 e 1.

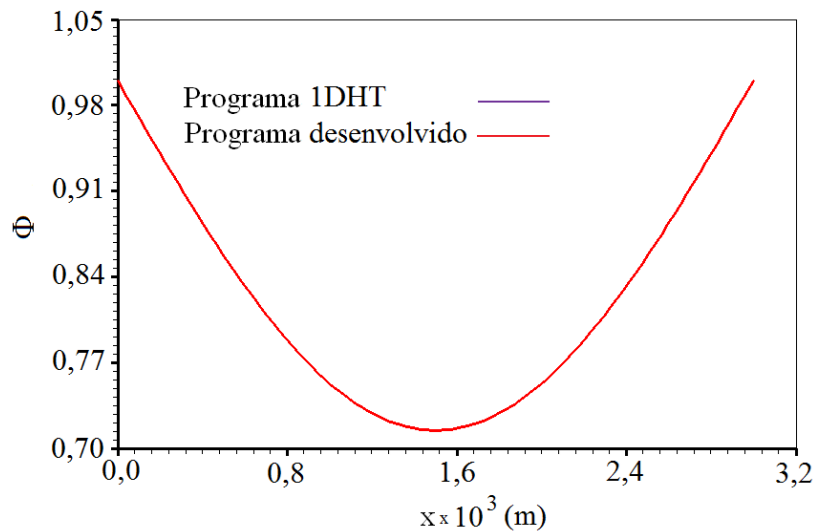
Para validação do programa desenvolvido, foi utilizado o Programa 1D Heat Transfer (1DHT), V. 6.1, desenvolvido por Silva (2008). Este programa tem como objetivo o estudo da transferência de calor unidimensional e está disponível no seguinte endereço eletrônico <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/ht.htm>, tendo sido acessado em junho de 2010. O comprimento  $L_x$  foi dividido em 50 volumes de controle.

Os gráficos obtidos para as duas soluções, em  $t = 146,43$  s, são apresentados na Figura 4.64.



**Figura 4.64** - Distribuição espacial de  $\Phi$  numa parede infinita com condição de contorno prescrita em  $t = 146,43$  s: (a) Programa 1DHT e (b) Programa desenvolvido.

A superposição das duas curvas é apresentada na Figura 4.65, através da qual, observa-se que houve uma perfeita concordância entre os resultados obtidos com os dois *softwares*, mostrando mais um resultado positivo em busca da validação do *software* proposto neste trabalho.



**Figura 4.65** - Superposição dos gráficos da Figura 4.64, da distribuição espacial em uma parede infinita, com condição de contorno prescrita em  $t = 146,43$  s.

#### 4.9 Validação do *solver* considerando dimensões e difusividade variáveis

Visando ampliar mais ainda o leque de aplicações do *software* desenvolvido, foram realizadas algumas simulações levando em consideração as variações na difusividade do meio, representado pelo parâmetro  $\Gamma^\Phi$ , e também nas dimensões do sólido.

Deve-se salientar que, em um processo difusivo, tanto nos casos de aquecimento e resfriamento quanto nos casos de absorção e dessorção, em geral observa-se uma variação no volume do sólido ao longo do tempo. Além disso, para que a situação descrita seja o mais próximo possível da situação física real, deve-se levar em consideração também as variações na difusividade durante a ocorrência do processo.

Com o intuito de validar o código numérico proposto neste trabalho, levando em consideração as variações nas dimensões do sólido e no parâmetro  $\Gamma^\Phi$ , foi simulada uma

parede infinita e os resultados obtidos foram comparados com aqueles provenientes da solução numérica obtida pelo *software* 1D Heat Transfer.

As informações sobre os parâmetros da simulação e a largura inicial da parede infinita estão resumidas na Tabela 4.24, lembrando que para o parâmetro  $\Gamma^\Phi$ , o valor mencionado é o valor inicial deste parâmetro. A condição de contorno empregada foi a de primeiro tipo. Deve-se destacar, também, que se trata de um processo de absorção.

**Tabela 4.24** - Informações sobre a simulação de uma parede infinita com largura e difusividade variáveis.

$\Phi_i$	$\Phi_{eq}$	$\Gamma^\Phi$ (m <sup>2</sup> h <sup>-1</sup> )	$L_x$ (m)
0,00	1,00	$5,7105 \times 10^{-8}$	$2,82 \times 10^{-3}$

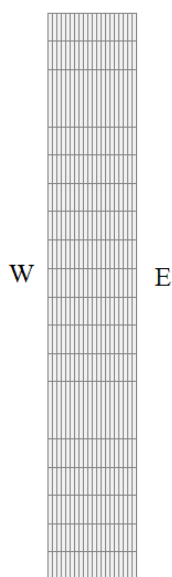
As expressões utilizadas para mostrar como a largura da parede infinita e o parâmetro  $\Gamma^\Phi$  dependem do valor da grandeza  $\Phi$  estão apresentadas nas Equações (4.7). Na Equação (4.7 a) está a expressão para a largura  $L_x$ , em metro (m), que depende do valor médio da grandeza  $\bar{\Phi}$ , enquanto a Equação (4.7 b) mostra a expressão para  $\Gamma^\Phi$ , em (m<sup>2</sup> h<sup>-1</sup>), que por sua vez depende do valor local da grandeza  $\Phi$ :

$$L_x = 2,82 \times 10^{-3} + 0,5 \times 10^{-3} \bar{\Phi} \quad (4.7a)$$

e

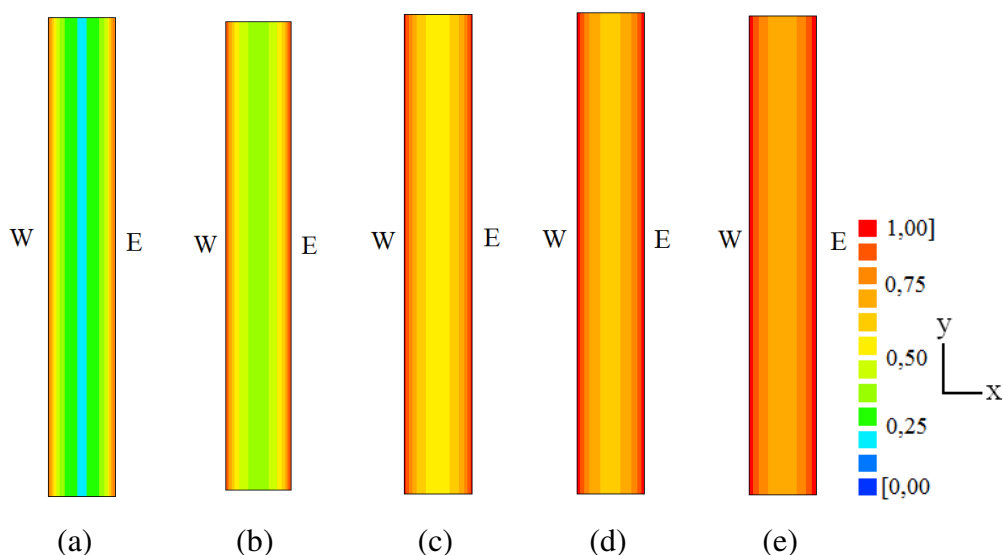
$$\Gamma^\Phi = 5,7105 \times 10^{-8} \times \exp(-2,9846 \Phi) \quad (4.7b)$$

Com relação à discretização da equação de difusão, o domínio trabalhado envolveu uma malha com 20 volumes de controle na direção x e um intervalo de tempo de 0,5 h para 2858 passos. Para simular a parede infinita a partir de um paralelepípedo, foi necessário e suficiente estabelecer fluxo zero ( $h = 0$ ) nas faces norte, sul, atrás e frente. A malha unidimensional está esquematizada na Figura 4.66.



**Figura 4.66** - Malha inicial para simular a parede infinita.

O primeiro teste realizado foi visando verificar a consistência do *software* desenvolvido, para esta nova situação física. Para tal, a evolução temporal da distribuição espacial foi analisada ao longo da direção  $x$  para vários instantes de tempo. Na Figura 4.67 aparecem os resultados para os seguintes instantes: a)  $t = 25$  h; b)  $t = 50$  h; c)  $t = 100$  h; d)  $t = 150$  h; e)  $t = 200$  h.



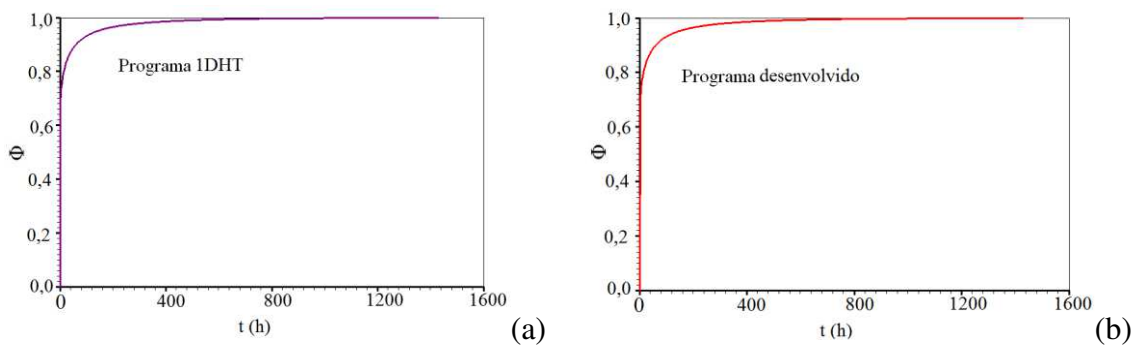
**Figura 4.67** - Distribuição espacial de  $\Phi$  em uma parede infinita (sem escala) para vários instantes: (a)  $t = 25$  h; (b)  $t = 50$  h; (c)  $t = 100$  h; (d)  $t = 150$  h e (e)  $t = 200$  h.

Observa-se, pela distribuição espacial apresentada na Figura 4.67, que o *software* forneceu uma solução em consonância com o processo físico da absorção de



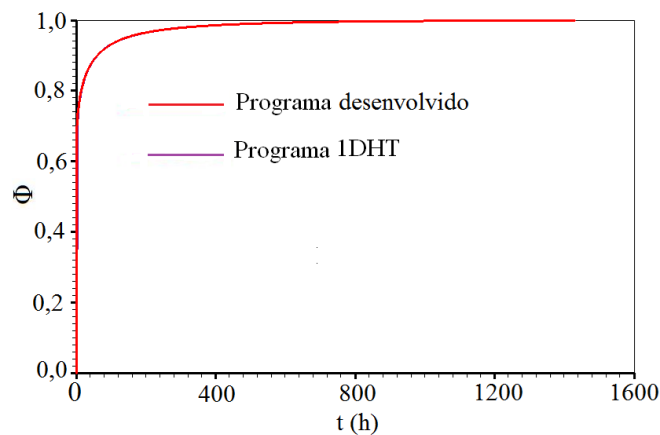
água, pois com a imposição da condição de contorno prescrita, logo no início do processo, as fronteiras já apresentam o valor da grandeza no equilíbrio. Verifica-se, ainda, que o transporte da grandeza no centro ocorre de forma mais lenta quando comparada com o transporte nas outras regiões, sendo bem mais rápido no contorno, identificado, neste caso pelas faces oeste e leste.

Os testes visando à validação do *software* tiveram início com a análise do transiente do volume de controle localizado a oeste da parede infinita, identificado pelo ponto nodal número 1. Os resultados obtidos estão mostrados na Figura 4.68.



**Figura 4.68** - Transiente para o volume de controle oeste de uma parede infinita com dimensão e difusividade variáveis: (a) Programa 1D Heat Transfer e (b) Programa desenvolvido.

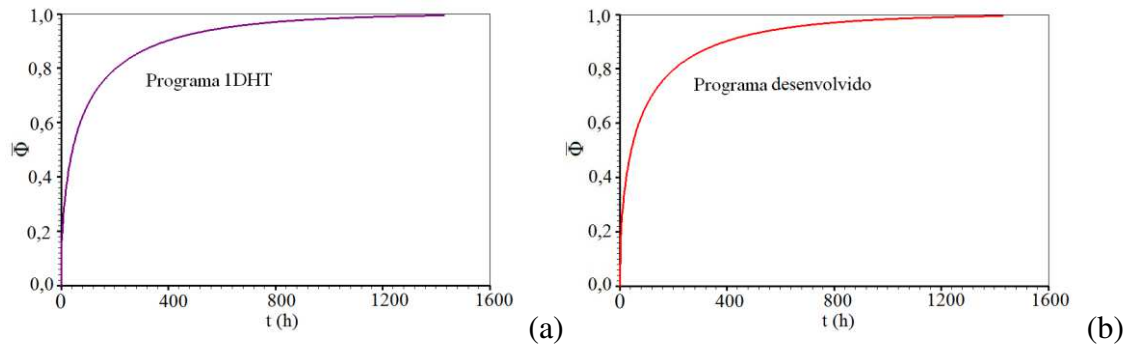
Visando comparar as soluções provenientes dos dois *softwares*, foi feita a superposição das duas curvas e o resultado está apresentado na Figura 4.69.



**Figura 4.69** - Superposição do transiente de  $\Phi$ , obtido com as duas soluções para o volume de controle oeste de uma parede infinita com dimensão e difusividade variáveis.

Analisando a Figura 4.69, que mostra a superposição dos resultados obtidos com as duas soluções numéricas, pode-se verificar uma perfeita concordância de resultados entre os dois *softwares*.

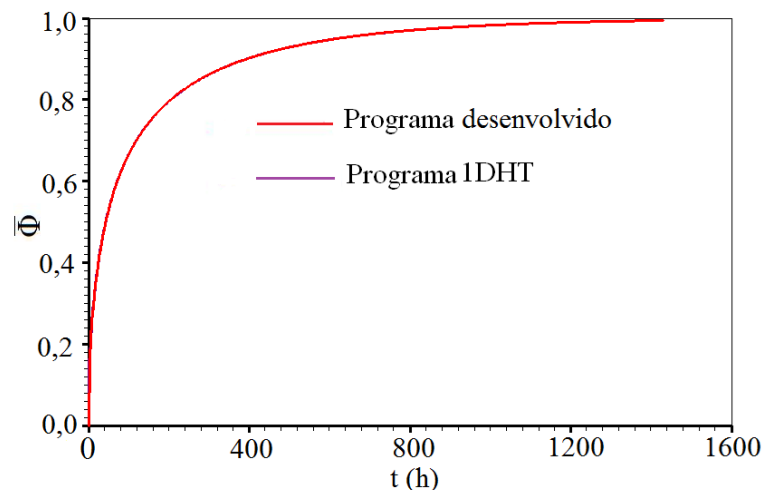
A evolução temporal do valor médio de  $\Phi$  também foi analisado e os resultados obtidos com as duas soluções numéricas estão apresentados na Figura 4.70.



**Figura 4.70** - Valor médio de  $\Phi$  obtido com os dois *softwares*:

(a) Programa 1D Heat Transfer e (b) Programa desenvolvido.

Para comparar os resultados obtidos para o transiente do valor médio de  $\Phi$  com os dois *softwares*, os gráficos da Figura 4.70 foram traçados num mesmo sistema de eixos e podem ser observados na Figura 4.71.



**Figura 4.71** - Superposição do valor médio de  $\Phi$  obtido com o Programa 1D Heat Transfer e com o Programa desenvolvido.

Observando-se a concordância apresentada para os dois *softwares* na Figura 4.71, consolida-se a validação do *solver* proposto, quando se leva em consideração as variações no parâmetro  $\Gamma^\Phi$  e nas dimensões do sólido.

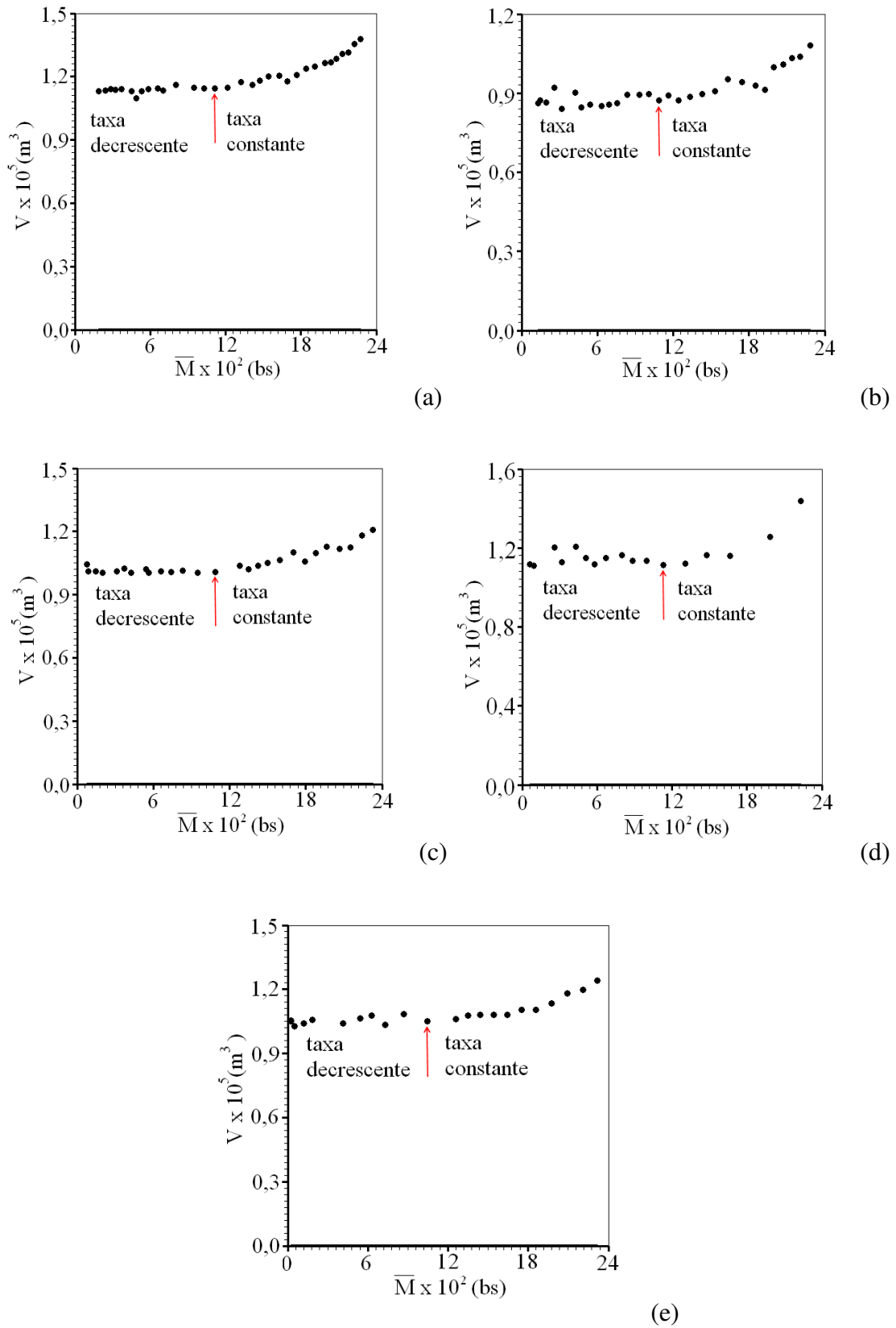
Neste ponto da pesquisa, com vários testes realizados e todos com resultados satisfatórios, é possível afirmar que o *software* desenvolvido é válido para descrever o fenômeno da difusão em várias condições, desde que a geometria possa ser aproximada para uma parede infinita, uma placa retangular ou um paralelepípedo.

#### **4.10 Secagem de materiais cerâmicos usando a solução numérica proposta**

Com o intuito de melhorar os resultados para a simulação da cinética de secagem das placas cerâmicas, um novo modelo foi proposto. Essencialmente, neste modelo, a condição de contorno é convectiva, enquanto a difusividade efetiva de massa varia com o teor de umidade local. Foi utilizada de 20 x 20 x 20 volumes de controle.

Para avaliar o comportamento da variação volumétrica com o tempo, foram traçados gráficos do volume das placas cerâmicas em função do teor de umidade médio para todas as temperaturas de secagem.

Conforme Figura 4.72, observa-se que uma variação apreciável no volume acontece principalmente no período em que a secagem ocorre à taxa constante, para todas as temperaturas investigadas. No entanto, durante o período de processo difusivo (taxa decrescente de secagem) não há, praticamente, variação de volume.



**Figura 4.72** - Gráficos do volume versus o teor de umidade médio para as temperaturas de secagem: (a)  $T = 50,0 \text{ }^\circ\text{C}$ ; (b)  $T = 60,0 \text{ }^\circ\text{C}$ ; (c)  $T = 70,0 \text{ }^\circ\text{C}$ ; (d)  $T = 80,0 \text{ }^\circ\text{C}$ ; (e)  $T = 90,0 \text{ }^\circ\text{C}$ .

Diante do exposto, a retração volumétrica das placas cerâmicas de revestimento não foi apreciada no estudo a seguir, considerando-se apenas a difusividade efetiva de massa variável.

#### **4.10.1 Expressão para a difusividade efetiva de massa**

Objetivando-se obter uma função adequada para descrever a difusividade efetiva de massa ao longo do processo de secagem, será considerado o seguinte procedimento. Os gráficos das Figuras 4.18, 4.20, 4.22 e 4.24 indicam que a difusividade deveria ser menor quando a razão de umidade diminui, ao final do processo. Isto significa que a difusividade e o teor de umidade devem ter o mesmo sentido de crescimento durante a secagem. Desta forma, uma difusividade dada por uma função crescente em relação ao teor de umidade deve descrever melhor os dados da cinética do transporte de água do que uma difusividade constante. Há na literatura, várias expressões para a difusividade efetiva de massa em função do teor de umidade local e/ou da temperatura (LIMA,1999).

Farias (2011), que trabalhou com o mesmo tipo de material cerâmico do presente estudo, concluiu que a melhor expressão para a difusividade efetiva de massa é dada por:

$$D = aM + b \quad (4.8)$$

em que a e b são os parâmetros que devem ser obtidos por otimização.

Assim, realizando-se os processos de otimização para obtenção da difusividade efetiva de massa para quatro das cinco temperaturas investigadas, obtêm-se os resultados apresentados na Tabela 4.25. Deve-se observar, mais uma vez, que os dados experimentais para a temperatura de 80°C são para controle, e não foram utilizados no processo de otimização, mas foram usados para a verificação de resultados obtidos. Posteriormente será discutido um pouco mais este assunto.

Vale salientar que o coeficiente de transferência convectivo de massa, embora tenha sido representado por uma função constante em cada simulação, foi recalculado de acordo com o processo de otimização descrito no item 3.9.

**Tabela 4.25** - Resultados para os parâmetros de transporte considerando difusividade efetiva de massa variável.

50 °C	D (m <sup>2</sup> min <sup>-1</sup> )	2,2419x10 <sup>-6</sup> M - 3,0509x10 <sup>-8</sup>
	h (m min <sup>-1</sup> )	5,5769x10 <sup>-5</sup>
	χ <sup>2</sup>	1,7098x10 <sup>-6</sup>
	R <sup>2</sup>	0,99984
60 °C	D (m <sup>2</sup> min <sup>-1</sup> )	2,2710x10 <sup>-6</sup> M - 1,7695x10 <sup>-8</sup>
	h (m min <sup>-1</sup> )	6,4388x10 <sup>-5</sup>
	χ <sup>2</sup>	1,4133x10 <sup>-6</sup>
	R <sup>2</sup>	0,99988
70 °C	D (m <sup>2</sup> min <sup>-1</sup> )	2,6804x10 <sup>-6</sup> M - 0,6900x10 <sup>-8</sup>
	h (m min <sup>-1</sup> )	8,0045x10 <sup>-5</sup>
	χ <sup>2</sup>	7,6668x10 <sup>-7</sup>
	R <sup>2</sup>	0,99993
90 °C	D (m <sup>2</sup> min <sup>-1</sup> )	3,9023x10 <sup>-6</sup> M + 1,5663x10 <sup>-8</sup>
	h (m min <sup>-1</sup> )	9,7902x10 <sup>-5</sup>
	χ <sup>2</sup>	4,6343x10 <sup>-7</sup>
	R <sup>2</sup>	0,99994

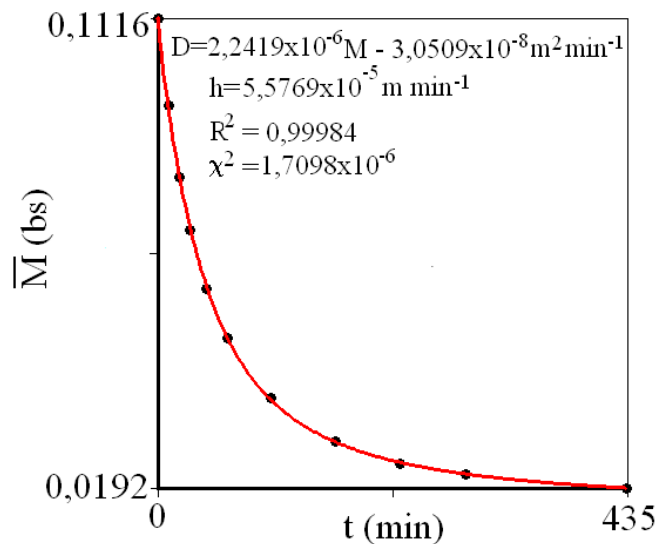
Uma vez que os parâmetros de transporte foram determinados por otimização, as cinéticas de secagem podem ser simuladas para as temperaturas investigadas.

Como a difusividade é variável, observa-se um comportamento não linear a ser considerado na solução numérica da equação de difusão, pois os coeficientes do sistema de equações resultante da discretização da equação de difusão dependem da difusividade e, conseqüentemente, do teor de umidade local, que é a grandeza a ser determinada em cada passo de tempo. O problema pode ser contornado diminuindo o

intervalo de tempo em que os coeficientes do sistema de equações são considerados constantes. Assim, as soluções numéricas da equação de difusão para este modelo foram obtidas para 2200 passos no tempo, com intervalos de tempo  $\Delta t = 0,20$  s.

#### 4.10.2 Secagem a 50,0 °C

Utilizando-se os resultados obtidos para  $D$  e  $h$  através do processo de otimização, foi feita a simulação da cinética de secagem para a temperatura de 50,0 °C, cujos resultados são apresentados na Figura 4.73. Na figura mencionada constam: os pontos experimentais, a simulação da cinética de secagem, a expressão para a difusividade efetiva, o valor do coeficiente de transferência convectivo de massa e os indicadores estatísticos.



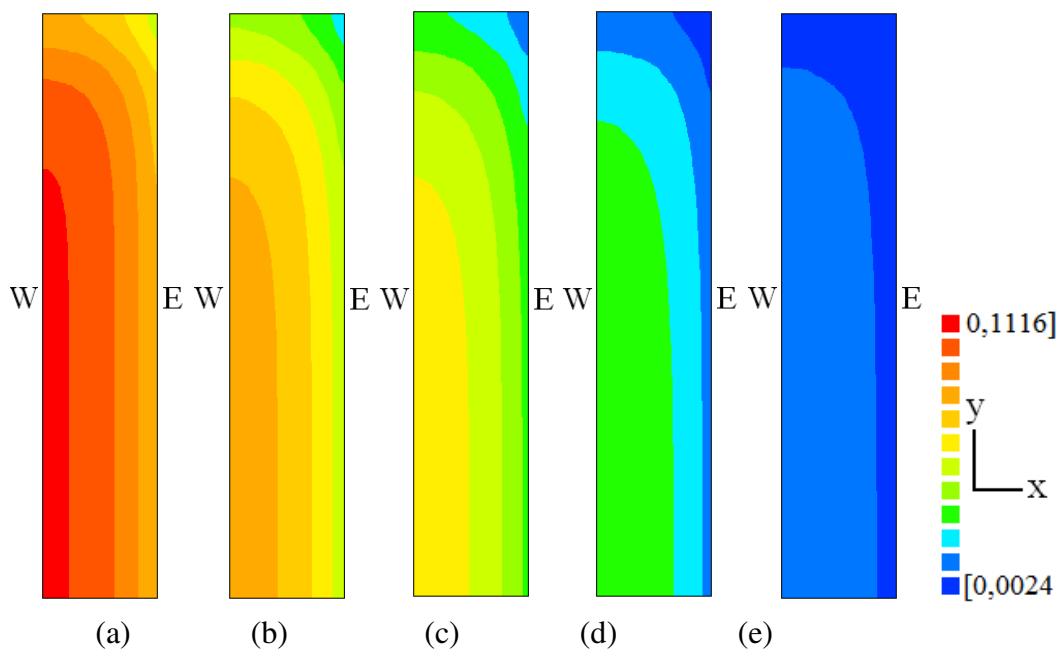
**Figura 4.73** - Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 50,0 °C, considerando-se a difusividade efetiva de massa variável.

Comparando-se os resultados expostos na Figura 4.73 com aqueles mostrados na Figura 4.18, observa-se que os indicadores estatísticos obtidos ao se considerar a difusividade efetiva de massa variável são significativamente melhores do que os valores encontrados ao se considerar tal parâmetro constante. O qui-quadrado, por exemplo, apresenta um valor aproximadamente 37 vezes menor e o coeficiente de determinação passa de 0,9952 para 0,9998. Em adição a isto, percebe-se uma perfeita

concordância da curva simulada com os dados experimentais durante todo o processo difusivo.

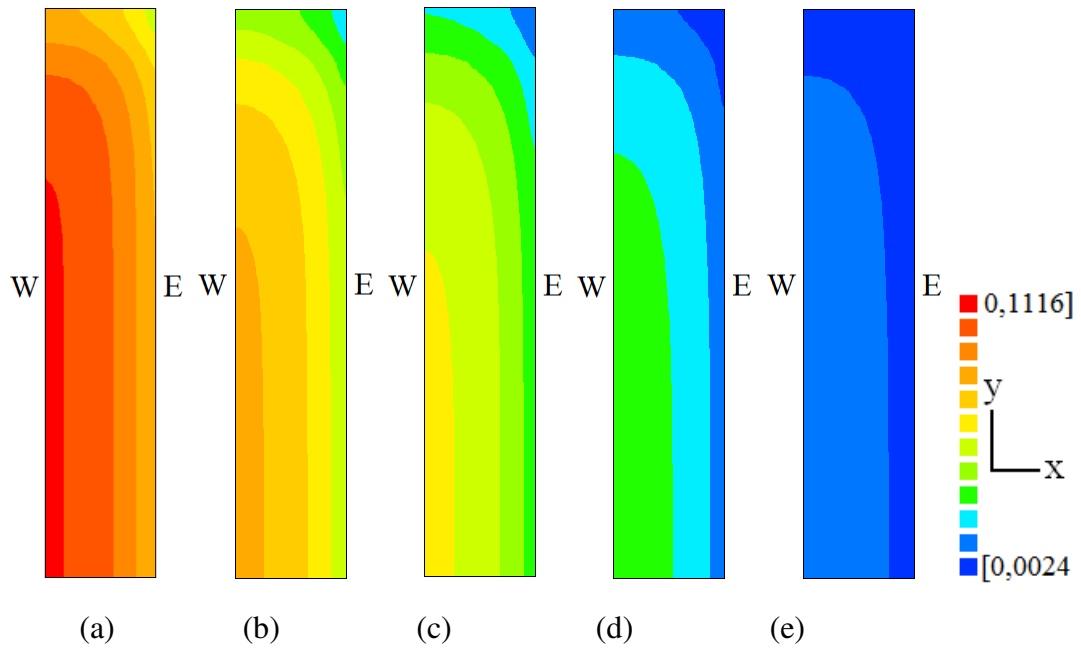
A obtenção de informações sobre como o teor de umidade está distribuído no interior e no contorno do sólido é importante, porque essas diferenças geram tensões que podem provocar danos ao produto, tais como trincas, fissuras ou deformações (NASCIMENTO, 2002; FARIAS, 2011). Assim, foi analisada a distribuição espacial do teor de umidade no sólido para alguns planos, em instantes de tempo previamente escolhidos.

A evolução temporal da distribuição espacial de  $M$  sobre os planos  $xy$  (ver Figura 4.28) que passam pelos pontos nodais  $(1, 1, 1)$ ,  $(1, 1, 18)$  e  $(1, 1, 20)$ , considerando a simetria do paralelepípedo, é apresentada nas Figuras de 4.74 a 4.76.

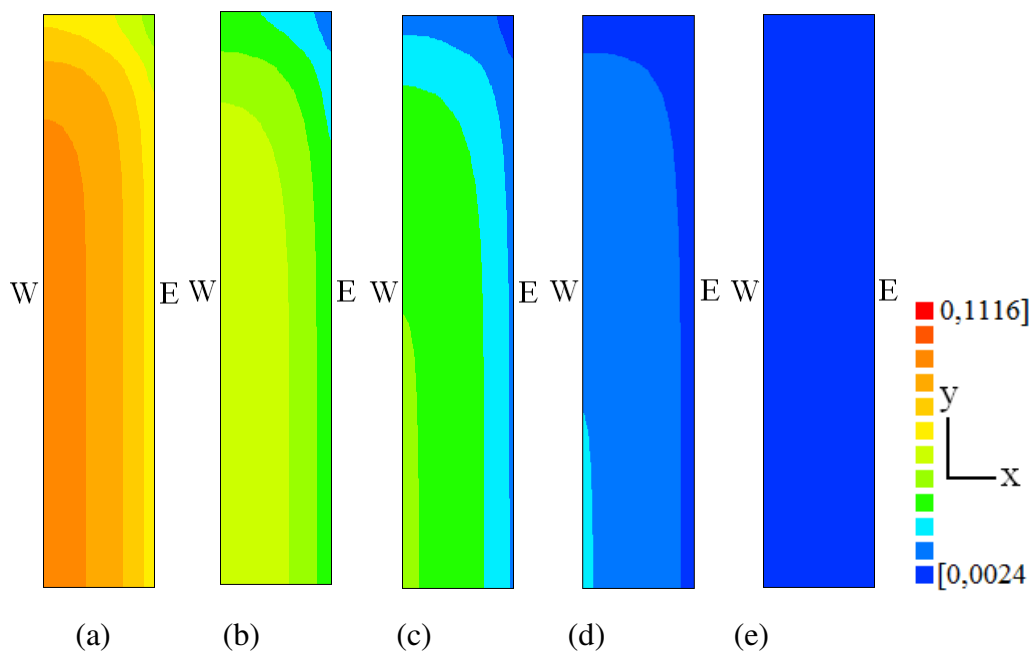


**Figura 4.74** - Distribuição do teor de umidade no plano  $xy$  que passa pelo ponto nodal  $(1, 1, 1)$  da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de  $50,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ , nos seguintes instantes de tempo: (a)  $10,0\text{ min}$ ; (b)  $30,0\text{ min}$ ; (c)  $50,0\text{ min}$ ; (d)  $100,0\text{ min}$  e (e)  $200,0\text{ min}$ .





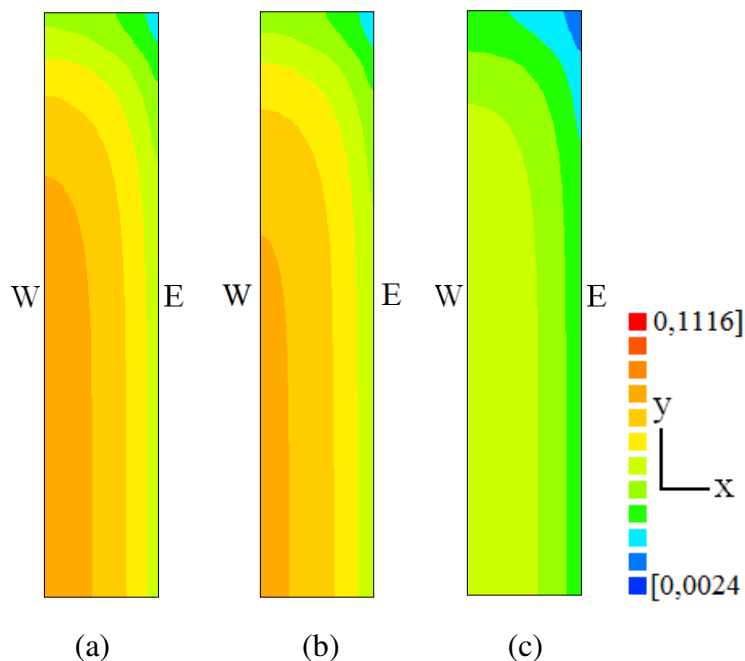
**Figura 4.75** - Distribuição do teor de umidade no plano xy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 18) da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de 50,0 °C, nos seguintes instantes de tempo: (a) 10,0 min; (b) 30,0 min; (c) 50,0 min; (d) 100,0 min e (e) 200,0 min.



**Figura 4.76** - Distribuição do teor de umidade no plano xy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 20) da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de 50,0 °C, nos seguintes instantes de tempo: (a) 10,0 min; (b) 30,0 min; (c) 50,0 min; (d) 100,0 min e (e) 200,0 min.

Fazendo-se uma análise dos gráficos apresentados nas Figuras de 4.74 a 4.76, pode-se concluir que, para os instantes iniciais do processo, os planos xy localizados mais internamente na placa cerâmica possuem praticamente o mesmo perfil da distribuição espacial do teor de umidade, o que é comprovado pelas Figuras 4.74 e 4.75. Por outro lado, o plano xy localizado mais próximo à face frontal do sólido possui uma maior velocidade de secagem, e, conseqüentemente um menor teor de umidade para todos os volumes localizados no referido plano, conforme a Figura 4.76.

Na Figura 4.77 está apresentada a distribuição espacial do teor de umidade, em um instante de tempo arbitrariamente escolhido como  $t = 30,0$  min, para vários planos da placa cerâmica, que vão desde o meio até a face frontal da placa (varredura na direção do eixo z). Estes planos são identificados por: (a) (1, 1, 1); (b) (1, 1, 18) e (c) (1, 1, 20).



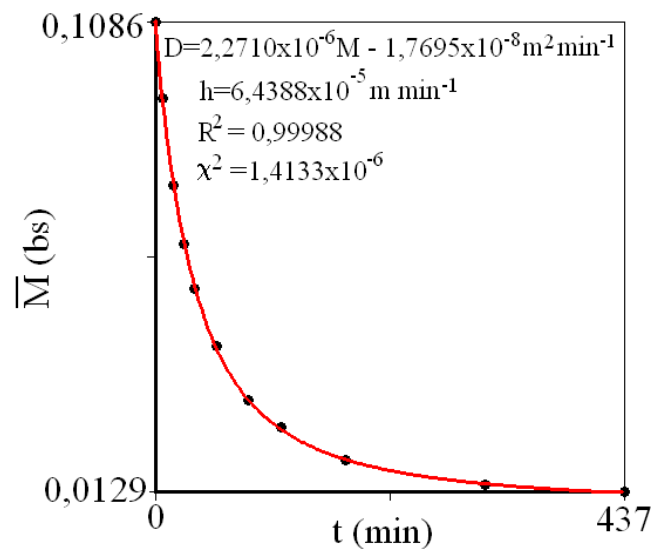
**Figura 4.77** - Distribuição do teor de umidade de uma placa cerâmica num instante de tempo 30 min, para uma temperatura de secagem de  $50,0$  °C, nos planos xy que passam pelos pontos nodais: (a) (1, 1, 1); (b) (1, 1, 18) e (c) (1, 1, 20).

A Figura 4.77 confirma o que foi observado nas Figuras de 4.74 a 4.76, ou seja, os perfis do teor de umidade são semelhantes para os planos xy situados mais

internamente, enquanto que o plano mais próximo da face frontal apresenta uma secagem mais rápida.

#### 4.10.3 Secagem a 60,0, 70,0 e 90,0 °C

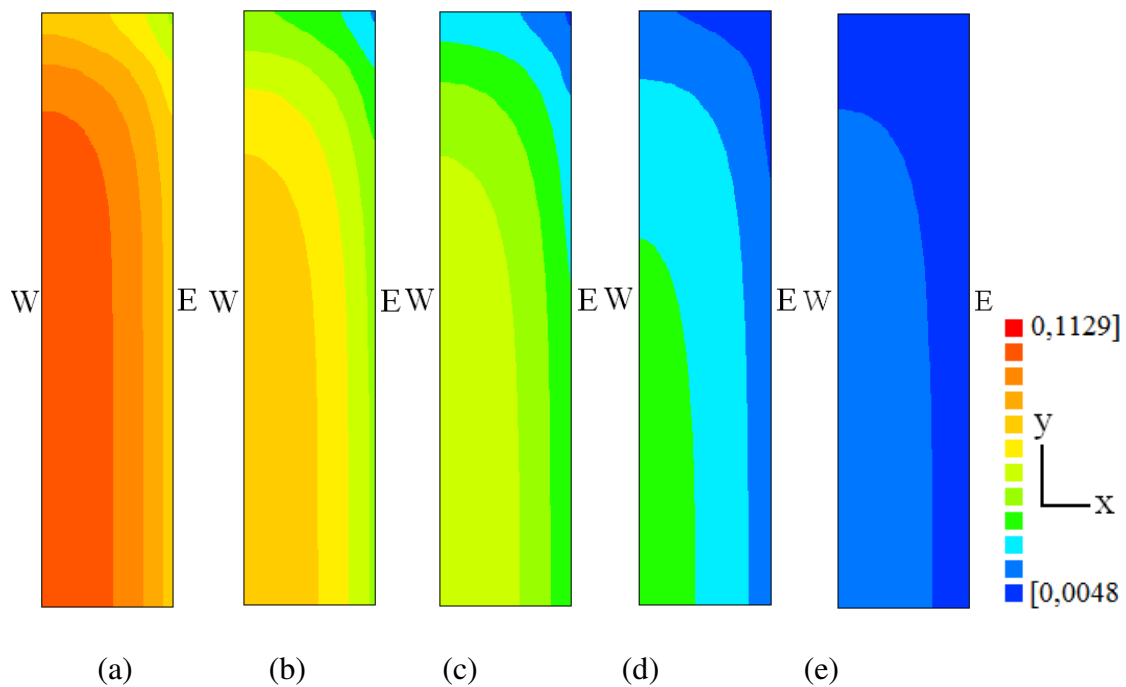
Apresentam-se, na Figura 4.78, para a temperatura de 60,0 °C, a curva simulada da cinética de secagem, os pontos experimentais, a expressão para a difusividade efetiva, o valor do coeficiente de transferência convectivo de massa e os indicadores estatísticos.



**Figura 4.78** - Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 60,0 °C, considerando-se a difusividade efetiva de massa variável.

Ao se comparar os resultados expostos na Figura 4.78 com aqueles mostrados na Figura 4.20, observa-se que, para esta temperatura, os indicadores estatísticos também são significativamente melhores do que os valores obtidos ao se considerar a difusividade efetiva de massa constante. Em adição a isto se percebe, do mesmo modo, uma perfeita concordância da curva simulada com os dados experimentais durante todo o processo difusivo.

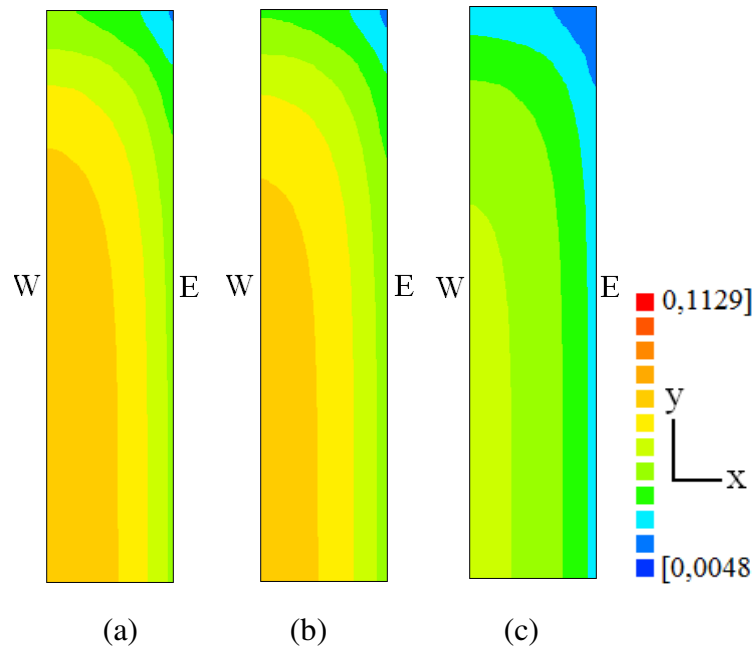
A evolução temporal da distribuição espacial de M sobre o plano xy que passa no ponto nodal (1, 1, 1) considerando-se a simetria do paralelepípedo, é apresentada na Figura 4.79.



**Figura 4.79** - Distribuição do teor de umidade no plano xy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 1) da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de 60,0 °C, nos seguintes instantes de tempo: (a) 10,0 min; (b) 30,0 min; (c) 50,0 min; (d) 100,0 min e (e) 200,0 min.

Observa-se que a distribuição do teor de umidade apresentada na Figura 4.79 tem um comportamento semelhante ao da temperatura de 50,0 °C, apresentando teores de umidade ligeiramente menores.

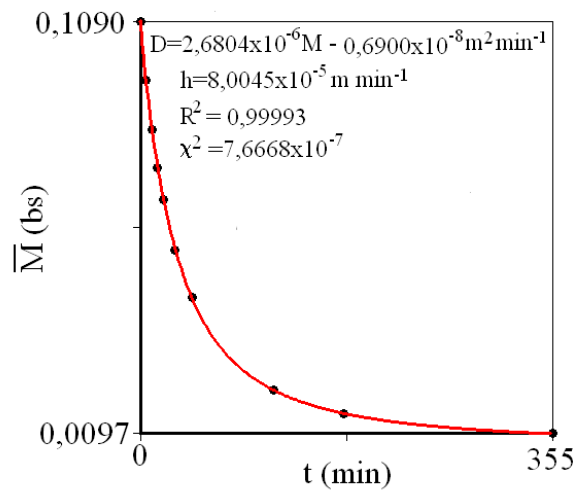
Na Figura 4.80 está apresentada a distribuição espacial do teor de umidade, em um instante de tempo arbitrariamente escolhido como  $t = 30,0$  min, para vários planos da placa cerâmica, que vão desde o meio até a face frontal (varredura na direção do eixo z). Estes planos são identificados por pontos nodais: (a) (1, 1, 1); (b) (1, 1, 18) e (c) (1, 1, 20).



**Figura 4.80** - Distribuição do teor de umidade de uma placa cerâmica num instante de tempo 30 min, para uma temperatura de secagem de 60,0 °C, nos planos xy que passam pelos pontos nodais: (a) (1, 1, 1); (b) (1, 1, 18) e (c) (1, 1, 20).

Mais uma vez observa-se que os perfis do teor de umidade são semelhantes para os planos xy situados no interior das placas cerâmicas, enquanto que o plano mais próximo da face frontal apresenta uma secagem mais rápida.

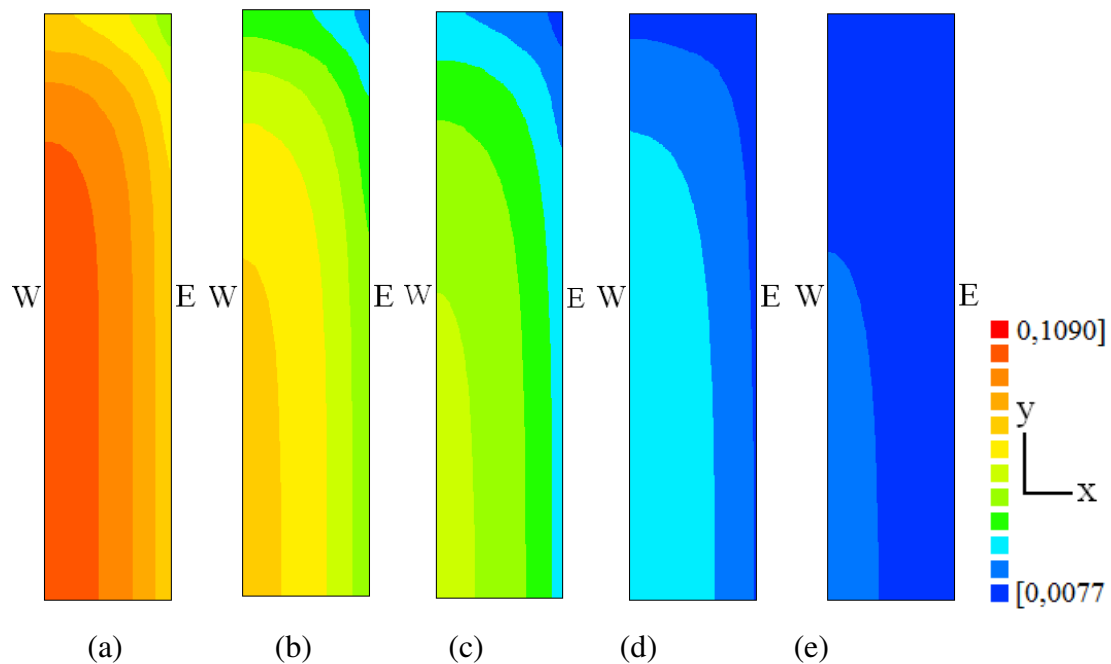
Para a temperatura de 70,0 °C, a cinética de secagem é apresentada na Figura 4.81.



**Figura 4.81** - Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 70,0 °C, considerando-se a difusividade efetiva de massa variável.

Além da curva simulada da cinética de secagem e os pontos experimentais, na Figura 4.81 também consta a expressão para a difusividade efetiva, o valor do coeficiente de transferência convectivo de massa e os indicadores estatísticos. Observa-se, também, que os indicadores estatísticos são significativamente melhores do que aqueles obtidos ao se considerar a difusividade constante.

A evolução temporal do transporte de água no interior do sólido (plano xy) pode ser visualizada através dos gráficos da Figura 4.82.

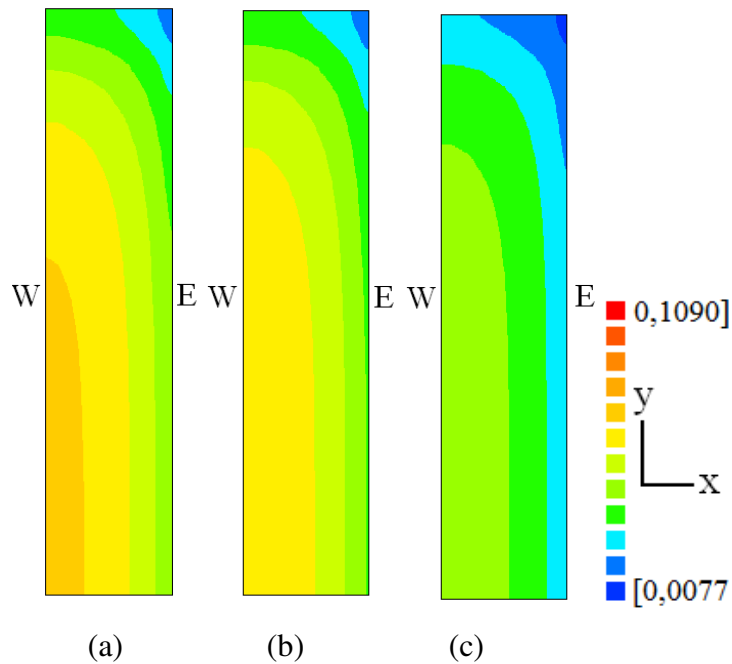


**Figura 4.82** - Distribuição do teor de umidade no plano xy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 1) da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de 70,0 °C, nos seguintes instantes de tempo: (a) 10,0 min; (b) 30,0 min; (c) 50,0 min; (d) 100,0 min e (e) 200,0 min.

A Figura 4.82 apresenta um comportamento semelhante à evolução temporal da Figura 4.79, embora se perceba que a “velocidade de secagem” seja maior.

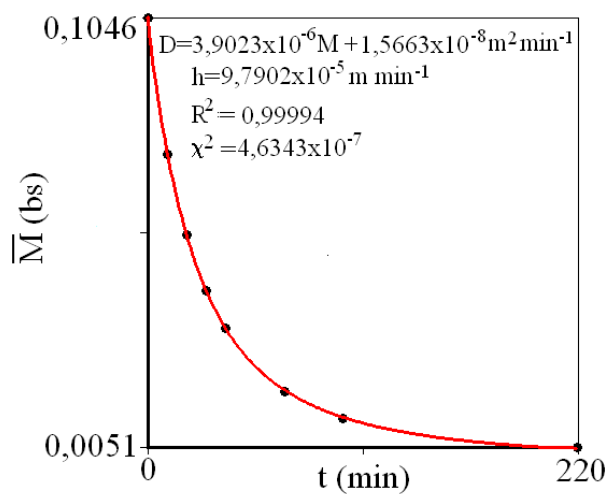
Na Figura 4.83 está apresentada a distribuição espacial do teor de umidade, em um instante de tempo arbitrariamente escolhido como  $t = 30,0$  min, para vários planos da placa cerâmica, que vão desde o meio até a face frontal da placa (varredura na

direção do eixo z). Estes planos são identificados passando pelos pontos nodais: (a) (1, 1, 1); (b) (1, 1, 18) e (c) (1, 1, 20).



**Figura 4.83** - Distribuição do teor de umidade de uma placa cerâmica num instante de tempo 30 min, para uma temperatura de secagem de 70,0 °C, nos planos xy, que passam pelos pontos nodais: (a) (1, 1, 1); (b) (1, 1, 18) e (c) (1, 1, 20).

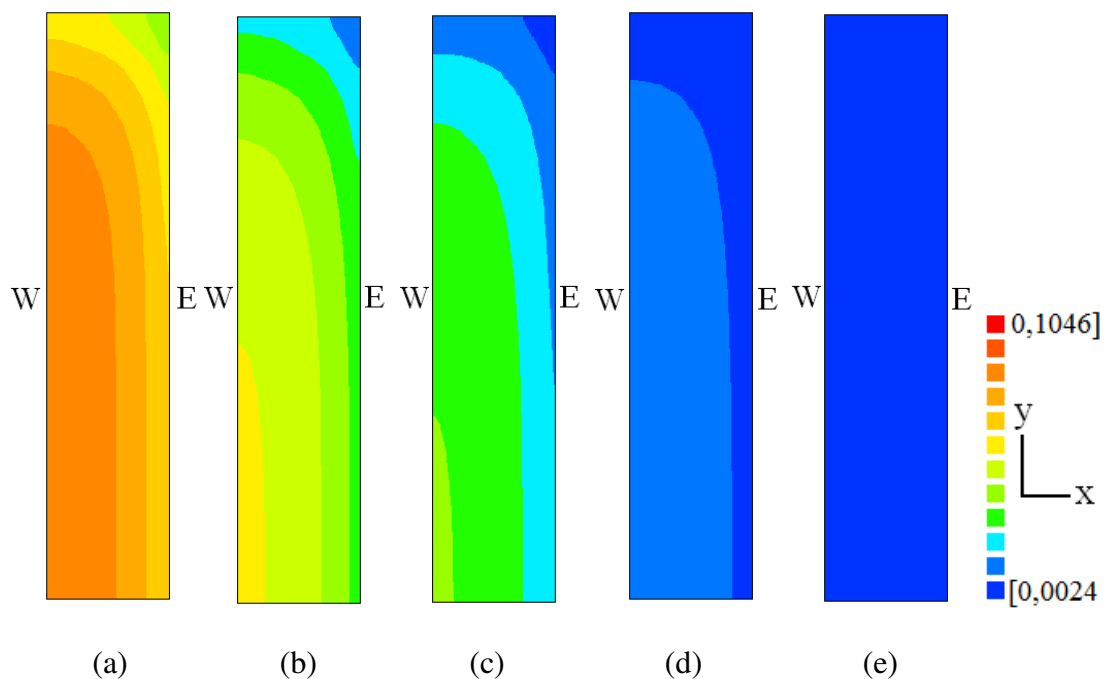
A simulação da cinética de secagem para a temperatura de 90,0 °C, calculada com os dados da Tabela 4.25, pode ser observada na Figura 4.84.



**Figura 4.84** - Simulação da cinética de secagem para a temperatura de 90,0 °C, considerando-se a difusividade efetiva de massa variável.

Observa-se, aqui também, que os indicadores estatísticos apresentados na Figura 4.84 são expressivamente melhores do que aqueles obtidos ao se considerar a difusividade constante (ver Figura 4.24).

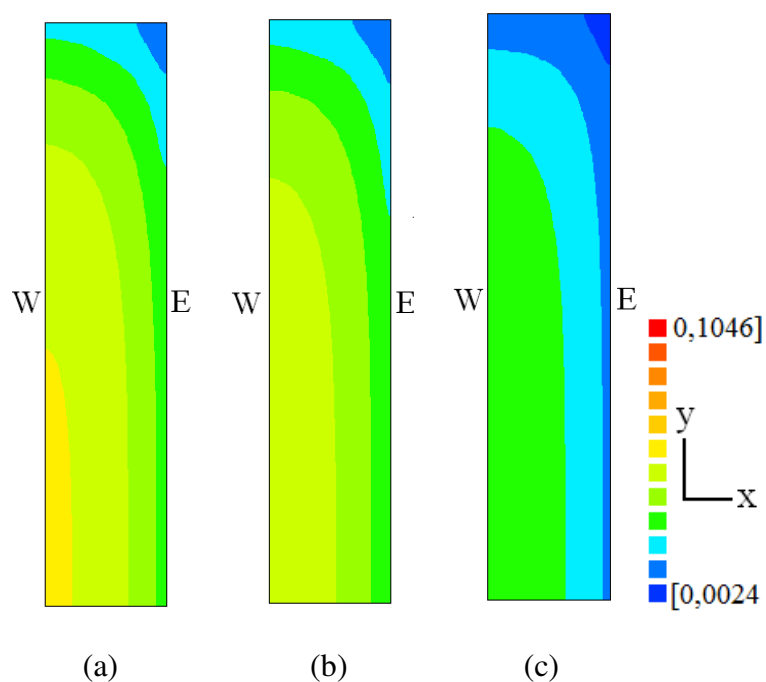
Na Figura 4.85, observando-se o perfil do teor de umidade no plano xy do sólido, para a temperatura do ar de secagem de 90,0 °C, ao longo do tempo, infere-se que aos 200 min de secagem todos os volumes de controle já atingiram o valor de equilíbrio.



**Figura 4.85** – Distribuição do teor de umidade no plano xy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 1) da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de 90,0 °C, nos seguintes instantes de tempo: (a) 10,0 min; (b) 30,0 min; (c) 50,0 min; (d) 100,0 min e (e) 200,0 min.

Na Figura 4.86 está apresentada a distribuição espacial do teor de umidade, em um instante de tempo arbitrariamente escolhido como  $t = 30,0$  min, para vários planos xy da placa cerâmica, que vão desde o meio até a face frontal da placa (varredura na direção do eixo z). Estes planos xy são identificados nos pontos nodais: (a) (1, 1, 1); (b) (1, 1, 18) e (c) (1, 1, 20).





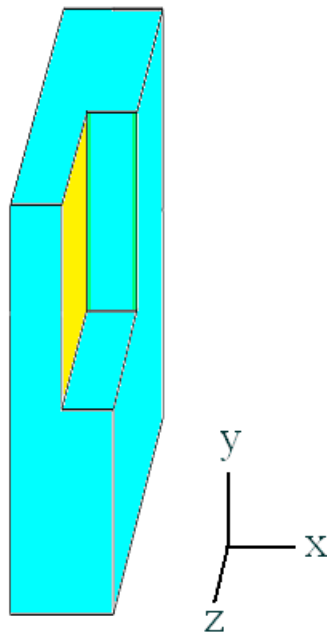
**Figura 4.86** – Distribuição do teor de umidade de uma placa cerâmica num instante de tempo 30 min, para uma temperatura de secagem de 90,0 °C, nos planos xy, que passam pelos pontos nodais: (a) (1, 1, 1); (b) (1, 1, 18) e (c) (1, 1, 20).

Fazendo-se uma análise geral para todas as temperaturas investigadas, observa-se que os indicadores estatísticos melhoraram expressivamente em relação àqueles obtidos ao se considerar a difusividade constante. O qui-quadrado, por exemplo, teve uma redução de cerca de trinta e seis vezes para as temperaturas de 50,0, 60,0 e 90,0 °C e atingindo uma redução de mais 54 vezes na temperatura de 70 °C, conforme dados das Figuras 4.73 e 4.18, 4.78 e 4.20, 4.81 e 4.22 e, por fim, das Figuras 4.84 e 4.24. Isto refletiu-se numa perfeita concordância das curvas simuladas com os dados experimentais durante todo o processo difusivo, conforme Figuras 4.73, 4.78, 4.81 e 4.84.

Quanto à distribuição do teor de umidade nos planos xy, que passam nos pontos nodais (1, 1, 1), (1, 1, 18) e (1, 1, 20), no tempo de 30 min, observou-se que praticamente não houve alteração no perfil dos planos internos (1, 1, 1) e (1, 1, 18) para as temperaturas de 50,0 e 60,0 °C, conforme Figuras 4.77 e 4.80. Já para a temperatura de 70,0 °C percebe-se uma alteração mais significativa, entre os planos xy, com pontos nodais (1, 1, 1) e (1, 1, 18), conforme Figura 4.83. Por último, observa-se que a temperatura de 90,0 °C foi a que apresentou variação mais expressiva para os dois

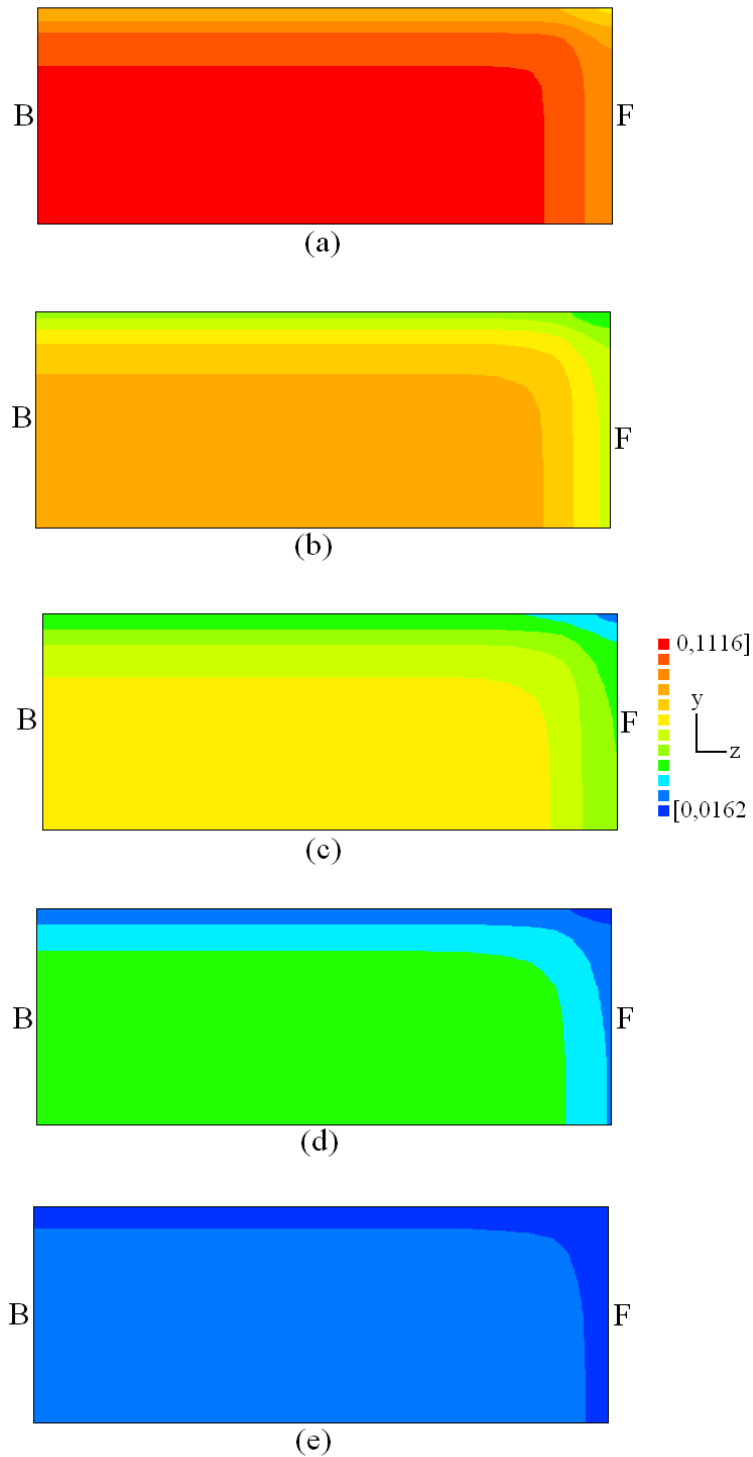
planos internos (1, 1, 1) e (1, 1, 18), conforme a Figura 4.86. Já o plano localizado mais próximo à face frontal do sólido em estudo (1, 1, 20) apresenta uma maior “velocidade de secagem”, e, conseqüentemente um menor teor de umidade para todos os volumes localizados nos referidos planos. Nota-se também que, como esperado, as placas cerâmicas secam mais rapidamente à medida que a temperatura do ar de secagem cresce.

Para corroborar com as afirmações feitas acima, foram traçados gráficos de contorno mostrando o perfil do teor de umidade no plano zy, que passa pelo ponto nodal (1, 1, 1), para as temperaturas de 50,0 e 90,0 °C.

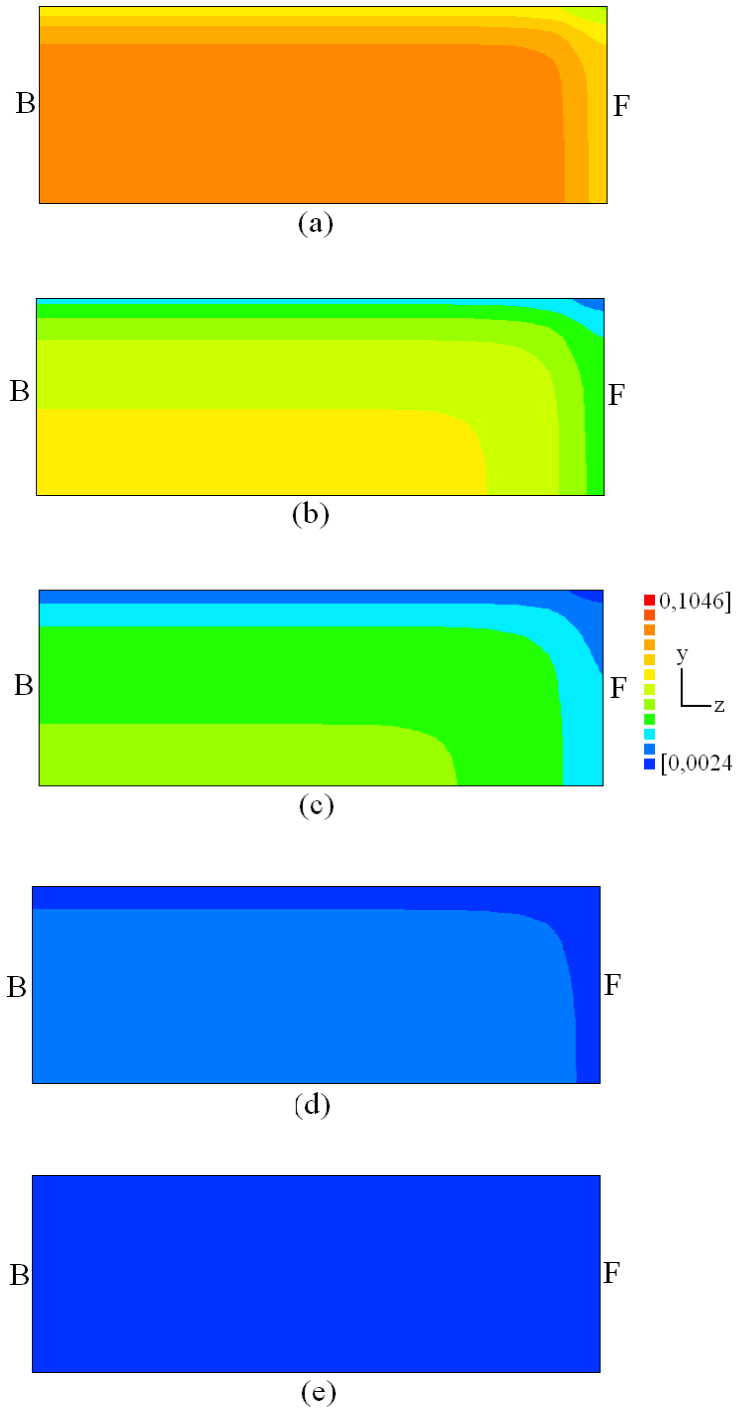


**Figura 4.87** – Destaque para o plano zy, passando pelo ponto central, onde a distribuição espacial do teor de umidade será examinada.

Os resultados para a temperatura de 50,0 °C são mostrados na Figura 4.88, enquanto que para a temperatura de 90,0 °C os gráficos são exibidos na Figura 4.89.



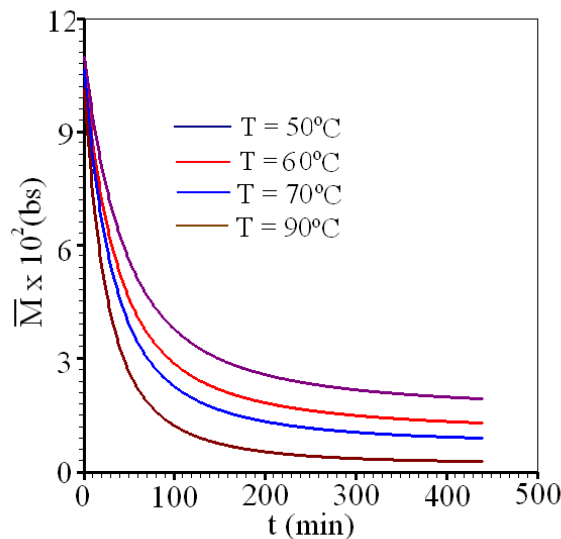
**Figura 4.88** - Distribuição do teor de umidade no plano  $zy$  que passa pelo ponto nodal  $(1, 1, 1)$  da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de  $50,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ , nos seguintes instantes de tempo: (a)  $10,0\text{ min}$ ; (b)  $30,0\text{ min}$ ; (c)  $50,0\text{ min}$ ; (d)  $100,0\text{ min}$  e (e)  $200,0\text{ min}$ .



**Figura 4.89** - Distribuição do teor de umidade no plano zy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 1) da placa cerâmica, para uma temperatura de secagem de 90,0 °C nos seguintes instantes de tempo: (a) 10,0 min; (b) 30,0 min; (c) 50,0 min; (d) 100,0 min e (e) 200,0 min.

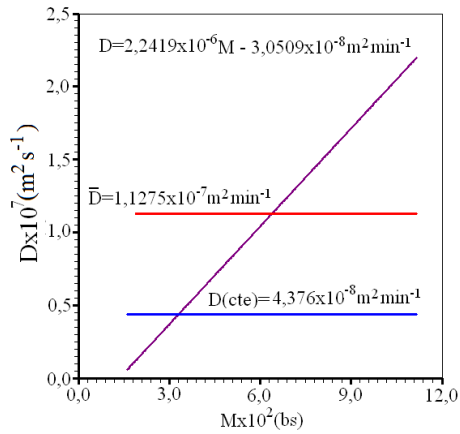
Com uma inspeção nas duas últimas figuras, percebe-se realmente que, para a temperatura de 50,0 °C, ao se fazer a varredura em planos xy na direção de z crescente, só haverá mudança significativa no perfil do teor de umidade para planos bem próximos à face frontal. Por outro lado, para a temperatura de 90,0 °C, essa variação já é bastante perceptível nos planos xy localizados bem antes do contorno frontal.

Até aqui, não se observaram grandes diferenças no comportamento das cinéticas de secagem para as quatro temperaturas em investigação, conforme pode ser observado na Figura 4.90.

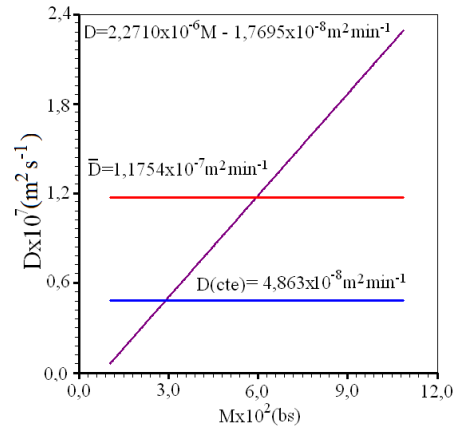


**Figura 4.90** - Superposição das cinéticas de secagem para as quatro temperaturas usadas no processo de otimização.

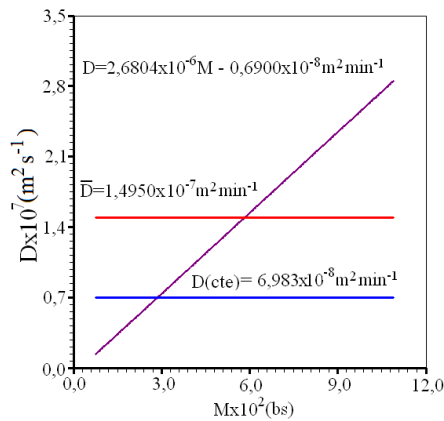
A seguir, apresentam-se nas Figuras 4.91, gráficos que destacam, em um mesmo sistema de eixos, as difusividades efetivas de massa em função do teor de umidade local, o seu respectivo valor médio e a difusividade constante para cada temperatura em estudo calculada através da solução analítica mencionada no item 4.2.3.



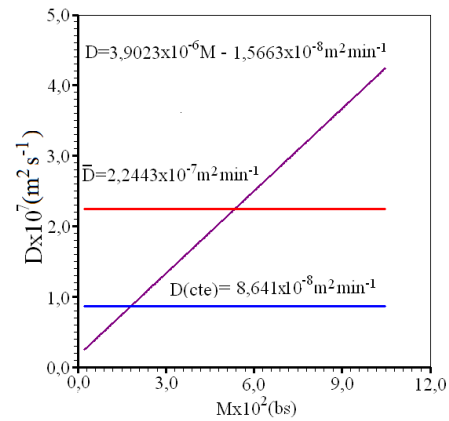
(a)



(b)



(c)



(d)

**Figura 4.91** - Difusividade efetiva de massa para as temperaturas:

(a)  $T = 50,0 \text{ } ^\circ\text{C}$ , (b)  $T = 60,0 \text{ } ^\circ\text{C}$ , (c)  $T = 70,0 \text{ } ^\circ\text{C}$  e (d)  $T = 90,0 \text{ } ^\circ\text{C}$

Através de uma análise da Figura 4.91, percebe-se uma diferença significativa entre os valores obtidos para a difusividade média e aqueles encontrados para o valor constante da difusividade. Pressupõe-se que esse fato é devido a uma melhora expressiva dos resultados obtidos com a solução numérica, ao se considerar a difusividade efetiva de massa como uma função linear do teor de umidade local.

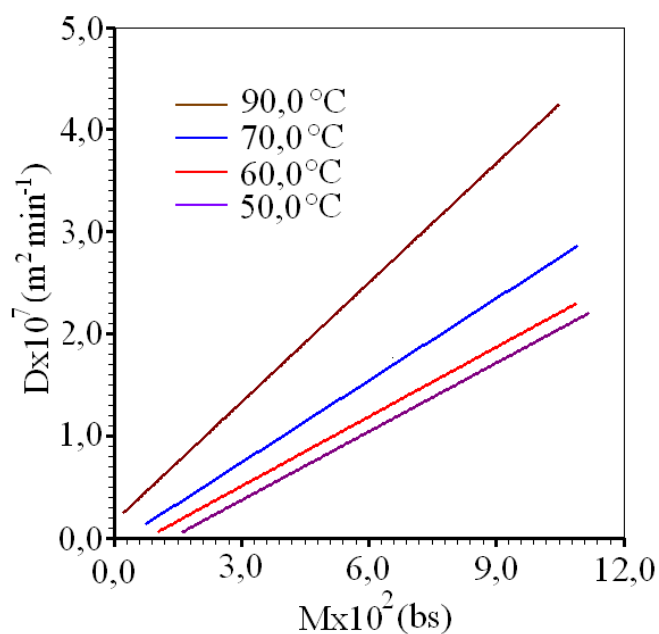
Um resumo com os valores médios para a difusividade efetiva de massa e com os valores ao se considerar tal parâmetro constante, para as quatro temperaturas, aparece na Tabela 4.26. Estes valores são apresentados no Sistema Internacional (S.I.) de unidades.

**Tabela 4.26** - Valores para a difusividade efetiva de massa.

T (°C)	$\bar{D}$ (m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	D (cte) (m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
50,0	1,879x10 <sup>-9</sup>	7,293x10 <sup>-10</sup>
60,0	1,959x10 <sup>-9</sup>	8,105x10 <sup>-10</sup>
70,0	2,492x10 <sup>-9</sup>	1,164x10 <sup>-9</sup>
90,0	3,741x10 <sup>-9</sup>	1,440x10 <sup>-9</sup>

Os valores que aparecem na Tabela 4.26, embora fortemente dependentes da geometria e composição do produto, bem como do processo de fabricação e temperatura de secagem, são compatíveis com valores disponíveis na literatura para a difusividade efetiva de água em materiais cerâmicos (NASCIMENTO, 2002; SILVA, 2007; FARIAS, 2011).

A Figura 4.92, apresenta as expressões da difusividade efetiva de massa em função do teor de umidade, obtidas para as quatro temperaturas, plotadas num único sistema de eixos.



**Figura 4.92** - Difusividades efetivas para as quatro temperaturas em função do teor de umidade local.

O objetivo, agora, é determinar uma única expressão que represente as difusividades, em todas as temperaturas investigadas (T) e em função do teor de umidade local (M). Para tal, através das expressões obtidas foram determinados valores para as difusividades efetivas, para cada temperatura, referentes a teores de umidade previamente estipulados: M = 0,0162; 0,0383; 0,0604; 0,0825 e 0,1046.

Dessa forma, a Tabela 4.27 foi montada com valores das difusividades efetivas dependentes da temperatura T e do teor de umidade M, através da qual é possível perceber que a difusividade aumenta tanto com o aumento da temperatura quanto com o aumento do teor de umidade local.

**Tabela 4.27** - Estrutura dos dados para determinar uma única expressão que represente a difusividade efetiva de massa D.

T (°C)	M	$D \times 10^8$ (m <sup>2</sup> min <sup>-1</sup> )
50,0	0,0162	0,58098
50,0	0,0383	5,53558
50,0	0,0604	10,4902
50,0	0,0825	15,4448
50,0	0,1046	20,3994
60,0	0,0162	1,90952
60,0	0,0383	6,92849
60,0	0,0604	11,9475
60,0	0,0825	16,9684
60,0	0,1046	21,9854
70,0	0,0162	3,65225
70,0	0,0383	9,57593
70,0	0,0604	15,4996
70,0	0,0825	21,4233
70,0	0,1046	27,3470
90,0	0,0162	7,88805
90,0	0,0383	16,5122
90,0	0,0604	25,1364
90,0	0,0825	33,7606
90,0	0,1046	42,3847



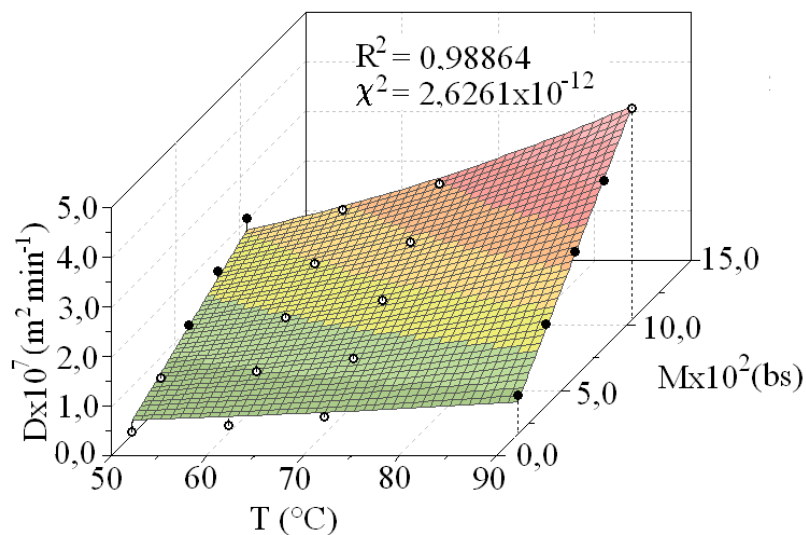
Outros autores também encontraram o mesmo tipo de comportamento para a difusividade de água em estudos de secagem (SILVA, 2007; SILVA, C. 2010; FARIAS, 2011).

O seguinte modelo matemático para a difusividade efetiva de massa em função do teor de umidade local e da temperatura foi usado para descrever os resultados obtidos no presente trabalho (SILVA et al., 2009; FARIAS, 2011):

$$D = (aM + b)\exp\left[-\frac{E_a}{R(T + 273,15)}\right], \quad (4.9)$$

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

Realizando-se o ajuste da Equação (4.9) aos dados da Tabela 4.27, o gráfico obtido para representar a difusividade em função da temperatura e do teor de umidade está mostrado na Figura 4.93.



**Figura 4.93** - Difusividade efetiva de massa em função da temperatura T e do teor de umidade M.

No gráfico da Figura 4.93, os círculos cheios representam pontos sobre ou acima da superfície ajustada, enquanto os círculos vazios representam pontos abaixo de tal superfície.

A equação ajustada resultou em uma expressão com D dado em  $\text{m}^2 \text{min}^{-1}$ , conforme a Equação 4.10 dada a seguir.

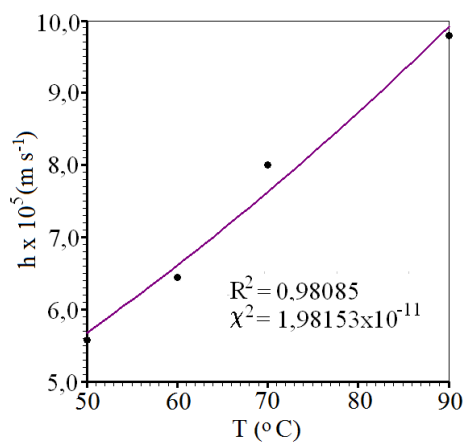
$$D = (5,0418 \times 10^{-3} M - 7,0373 \times 10^{-6}) \exp \left[ -\frac{2581}{(T + 273,15)} \right]. \quad (4.10)$$

Uma comparação da Equação (4.10) com a equação de Arrhenius, dada pela Equação (4.3) torna possível determinar a energia de ativação:  $E_a = 21,46 \text{ kJ mol}^{-1}$ , compatível com os dados da literatura (FARIAS, 2011).

Naturalmente, esta comparação ainda requer que o fator exponencial da temperatura na Equação (4.10) seja equivalente ao fator exponencial da equação de Arrhenius e que o fator pré-exponencial  $D_0$  seja identificado conforme é mostrado pela Equação (4.11), dada a seguir.

$$D_0 = (5,0418 \times 10^{-3} M - 7,0373 \times 10^{-6}) \quad (4.11)$$

Uma correlação entre o coeficiente de transferência convectivo de massa e a temperatura pode ser obtida pelo ajuste da Equação (4.4) aos dados obtidos por otimização para h, o que resulta no gráfico da Figura 4.94.

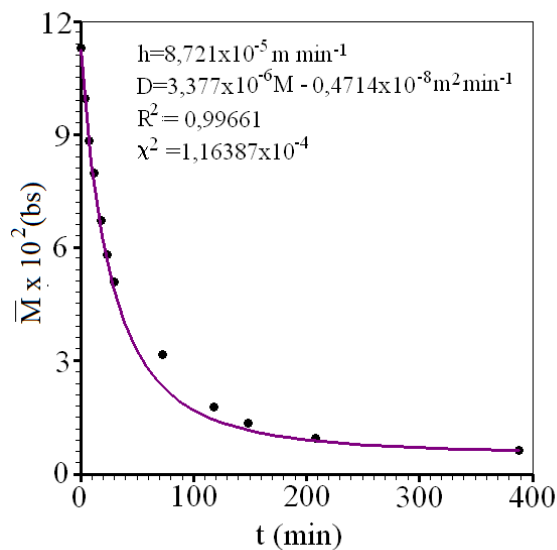


**Figura 4.94** - Coeficiente de transferência convectivo de massa em função da temperatura considerando difusividade variável.

Neste gráfico aparecem também os valores para os indicadores estatísticos, os quais podem ser considerados razoáveis. Por outro lado, a equação ajustada resulta na Equação (4.12), com  $h$  dado em  $\text{m min}^{-1}$ .

$$h = 8,989 \times 10^{-3} \exp\left[-\frac{1637}{(T + 273,15)}\right]. \quad (4.12)$$

Para testar as Equações (4.11) e (4.12), foram determinados, para a temperatura de  $80,0 \text{ }^\circ\text{C}$ , o valor de  $h = 8,721 \times 10^{-5} \text{ m min}^{-1}$  (Equação 4.12), e a expressão para a difusividade efetiva de massa dada por  $D = 3,377 \times 10^{-6} \text{ M} - 0,4714 \times 10^{-8}$  (Equação 4.10). Feita a simulação com estes parâmetros, os indicadores estatísticos obtidos foram  $R^2 = 0,99661$  e  $\chi^2 = 1,16387 \times 10^{-4}$ , conforme apresentados na Figura 4.95.



**Figura 4.95** - Simulação da cinética de secagem para a temperatura de  $80,0 \text{ }^\circ\text{C}$ , considerando-se a difusividade efetiva de massa variável.

Observando-se os indicadores estatísticos da Figura 4.27, em que a difusividade efetiva de massa foi considerada constante, em relação aos da Figura 4.95, em que a difusividade foi considerada variável, percebe-se uma expressiva melhora nesses indicadores estatísticos; o qui-quadrado diminuiu de aproximadamente 14 vezes.

#### **4.11 Secagem de madeira usando solução numérica**

As informações sobre as condições de secagem de madeira (*Pinus elliottii* Engelm) estão disponíveis no Capítulo 3. Já os dados da cinética de secagem foram apresentados no Item 4.1 deste trabalho.

Nesta seção, são propostas algumas expressões para a difusividade efetiva de massa, visando descrever a secagem de madeira serrada. O modelo é referente à difusão líquida tridimensional com condição de contorno do terceiro tipo. Para cada expressão proposta para a difusividade, o coeficiente de transferência convectivo de massa e as dimensões do sólido foram considerados constantes. As difusividades efetivas de massa foram consideradas como função do teor de umidade local e os resultados para as cinco melhores expressões obtidas são apresentados e analisados.

Neste sentido, os parâmetros de cada expressão foram determinados por otimização, a partir do conjunto de dados experimentais para a cinética de secagem de pranchas de madeira. Uma vez conhecidos os parâmetros do processo, a simulação da cinética de secagem pode ser realizada, e o teor de umidade em um instante  $t$ , em qualquer posição dentro da madeira, pode ser determinado.

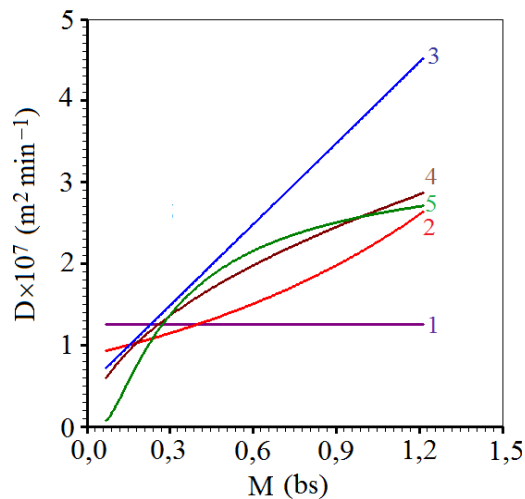
##### **4.11.1 Expressões para a difusividade efetiva de massa para madeira**

As expressões propostas para a difusividade efetiva de massa, como função do teor de umidade local, são apresentadas na Tabela 4.28 que apresenta, também, os resultados para os parâmetros de processo obtidos por otimização. Nesta tabela também são apresentados os indicadores estatísticos qui-quadrado ( $\chi^2$ ) e coeficiente de determinação ( $R^2$ ). Como os pesos estatísticos dos pontos experimentais não foram determinados no experimento, eles foram feitos iguais a 1, o que significa que todos os pontos experimentais têm o mesmo peso. Por último, a malha uniforme relativa ao pedaço simétrico do paralelepípedo (1/8) (ver Figura 4.54) foi definida com 20 x 20 x 25 volumes de controle, com 2000 números de passos no tempo, num intervalo de tempo  $\Delta t = 3,6$  s. Esta malha é equivalente à divisão do sólido inteiro em 80.000 volumes de controle.

**Tabela 4.28** - Expressões propostas para a difusividade e resultados dos processos de otimização.

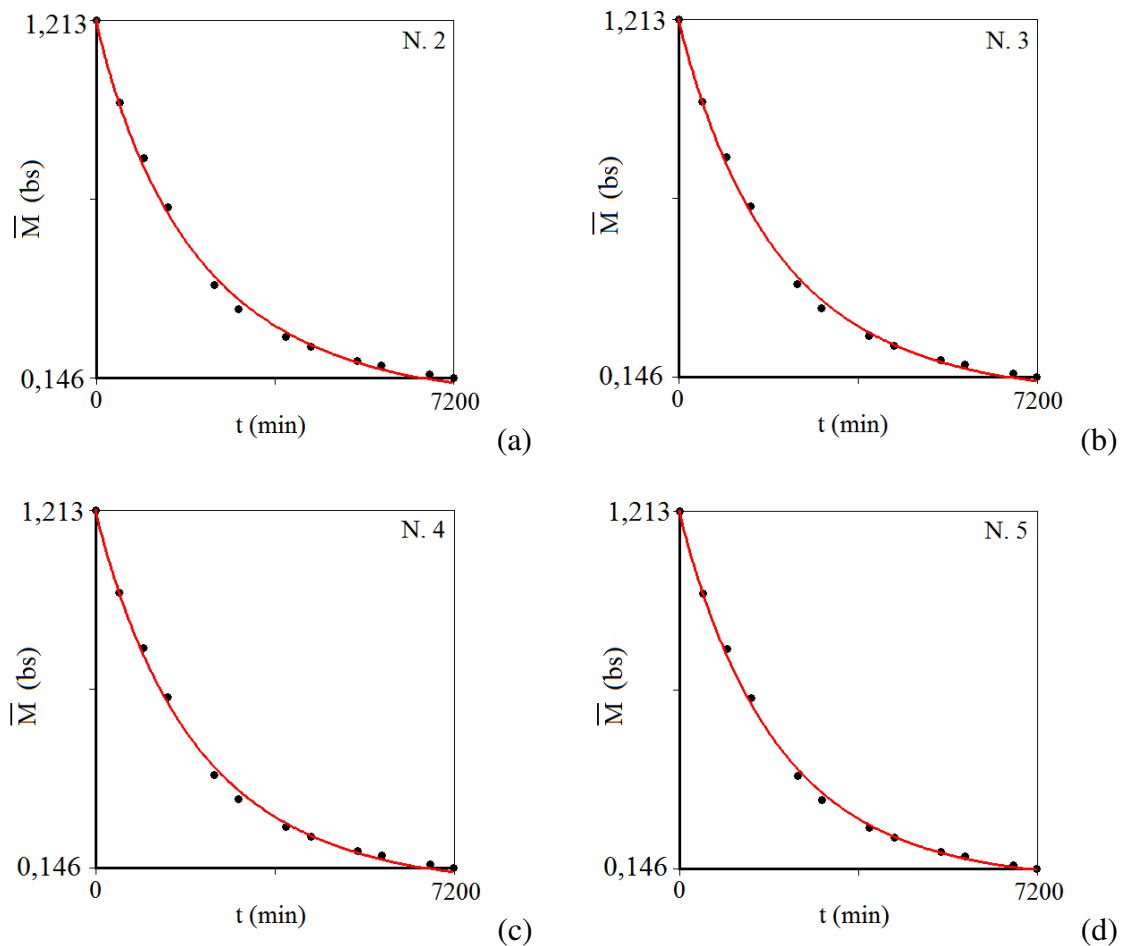
Nº	D	a	b x10 <sup>9</sup> (m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )	h x10 <sup>7</sup> (m s <sup>-1</sup> )	R <sup>2</sup>	χ <sup>2</sup> x 10 <sup>3</sup>
1	b	-	2,079	1,463	0,9972	4,3066
2	b exp(a M)	0,9104	1,452	1,350	0,9976	3,6013
3	a M + b	3,996x10 <sup>-9</sup>	1,162	1,238	0,9980	2,8546
4	a M <sup>1/2</sup> + b	4,524x10 <sup>-9</sup>	-0,211	1,267	0,9982	2,6772
5	b exp(a/M)	-0.2714	5,643	1,266	0,9987	1,8852

Conforme pode ser observado na Tabela 4.28, o pior resultado obtido é referente à consideração da difusividade constante em todo o domínio. Por outro lado, as expressões crescentes que consideram a difusividade efetiva de massa como uma função do teor de umidade local, produzem resultados melhores. Para a expressão de número 5, particularmente, o qui-quadrado é reduzido por um fator maior que 2, com relação à expressão de número 1. Os gráficos das expressões obtidas para a difusividade efetiva de massa em função do teor de umidade local podem ser observados na Figura 4.96.



**Figura 4.96** - Gráficos das expressões para a difusividade efetiva versus o teor de umidade local.

Utilizando-se os resultados obtidos para  $D$  e  $h$  através do processo de otimização, foi feita a simulação da cinética de secagem para os dados experimentais disponíveis, na temperatura de  $40,0\text{ }^{\circ}\text{C}$ . As simulações das cinéticas relativas às quatro melhores funções obtidas para a difusividade efetiva de massa são apresentadas na Figura 4.97.



**Figura 4.97** - Simulações da cinética de secagem de pranchas de madeira usando as seguintes expressões para a difusividade efetiva de massa: (a) número 2; (b) número 3; (c) número 4; (d) número 5.

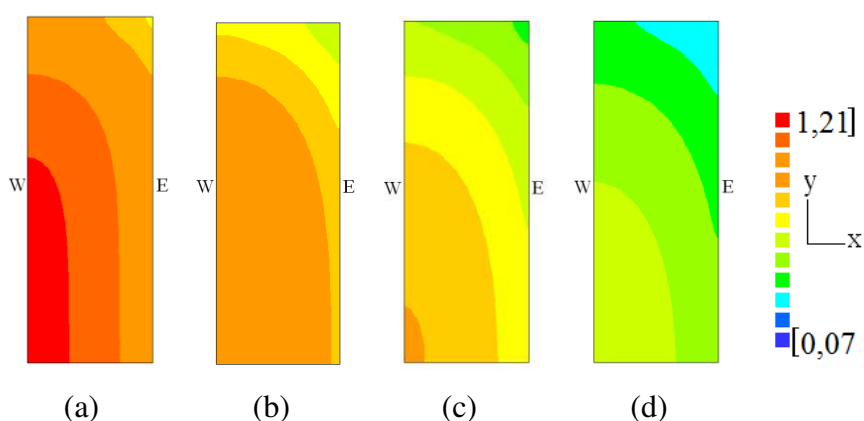
Para a difusividade efetiva de massa constante, uma comparação entre o resultado obtido no Item 4.1, usando uma solução analítica tridimensional e o resultado obtido aqui, usando uma solução numérica tridimensional, possibilita concluir que existe um completo acordo entre tais resultados. Esta conclusão permite afirmar, mais uma vez, que a solução numérica proposta foi validada através de resultados da

literatura. Entretanto, nos dois casos, os indicadores estatísticos das simulações podem ser considerados apenas razoáveis.

O uso de uma expressão variável para a difusividade efetiva de massa, dada como uma função do teor de umidade local, melhora sensivelmente a descrição da cinética de secagem de pranchas de madeira. Dentre as expressões testadas para a difusividade, o melhor resultado foi obtido através de uma expressão exponencial, em que o expoente é proporcional ao inverso do teor de umidade local (função nº 5).

A obtenção de informações sobre como o teor de umidade está distribuído no interior e no contorno do sólido é importante, porque essas diferenças geram tensões que podem provocar danos ao produto, tais como trincas, fissuras ou deformações (NASCIMENTO, 2002; FARIAS, 2011). Assim, foi analisada a distribuição espacial do teor de umidade no sólido para planos xy, em instantes de tempo previamente escolhidos.

A evolução temporal da distribuição espacial do teor de umidade no plano xy que passa pelo ponto nodal (1, 1, 1) (ver Figura 4.28), usando a função nº 5 para representar a difusividade efetiva de massa, é apresentada na Figura 4.98.

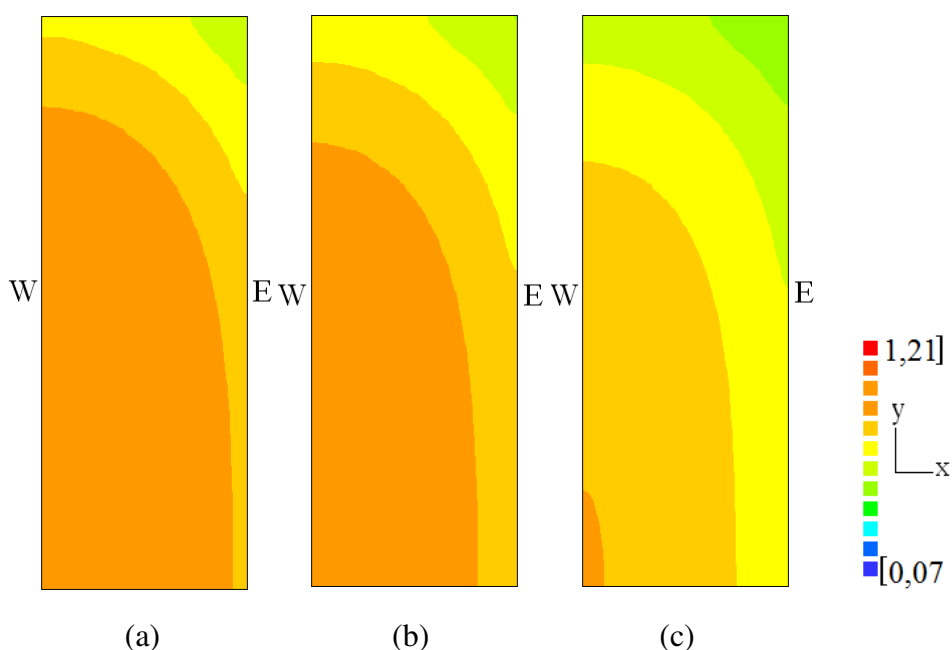


**Figura 4.98** - Distribuição do teor de umidade no plano xy que passa no ponto nodal (1, 1, 1) da madeira serrada, para uma temperatura de secagem de 40,0 °C, nos seguintes instantes de tempo: (a) 360,0 min; (b) 720,0 min; (c) 1260,0 min; e (d) 2160,0 min.

Através de uma inspeção na Figura 4.98, pode-se perceber a diferença entre as cinéticas de secagem dos volumes de controle da malha localizados no interior do sólido

daqueles situados nas fronteiras. Nota-se que, para qualquer dos instantes apresentados, os volumes de controle localizados no canto superior direito são aqueles que secam de forma mais rápida, já que são volumes de controle com duas faces (norte e leste) em contato com o meio ambiente. A face mais interna (oeste) seca mais lentamente do que a face mais externa (leste). Os volumes de controle da malha localizados no canto inferior esquerdo (centro do sólido) são os que demoram mais a secar, já que são os volumes de controle mais internos do sólido.

Quanto à distribuição do teor de umidade nos planos xy que passam pelos pontos nodais (1, 1, 1), (1, 1, 24) e (1, 1, 25), no tempo de 720 min, observa-se que há pouca alteração no perfil de distribuição dos planos mais internos (1, 1, 1) e (1, 1, 24). Já para o plano mais externo, que passa pelo nó (1, 1, 25) percebe-se uma alteração significativa em relação aos outros dois planos, conforme Figura 4.99.



**Figura 4.99** - Distribuição do teor de umidade em uma prancha de madeira serrada no instante de tempo de 720 min, para a temperatura de secagem de 40,0 °C, nos planos xy que passam pelos pontos nodais: (a) (1, 1, 1); (b) (1, 1, 24) e (c) (1, 1, 25).

Diante do exposto pode-se afirmar que o software desenvolvido, é apropriado para a descrição da secagem de sólidos na forma de paralelepípedo, como no estudo de caso da madeira serrada.



## **CAPÍTULO 5**

### **CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS**

Foram apresentadas, neste capítulo, as conclusões relativas às pesquisas realizadas neste trabalho. Esperando-se que as mesmas sejam úteis aos pesquisadores que trabalham com secagem de materiais na forma de paralelepípedo, com a utilização do Programa desenvolvido para este fim.

#### **5.1 Conclusões**

##### **5.1.1 Soluções analíticas**

- ✓ As técnicas analíticas propostas (soluções analíticas acopladas ao otimizador proposto) apresentaram resultados compatíveis com os resultados esperados na determinação de parâmetros termofísicos a partir de dados experimentais. Em adição, foi possível simular a cinética de secagem de pranchas de madeira e em placas cerâmicas de revestimento, e também prever a distribuição de umidade no interior do produto em um instante de tempo previamente estipulado.
- ✓ Foi possível concluir que a condição de contorno adequada para descrever a secagem de pranchas de madeira em baixas temperaturas, usando modelos de difusão, é a condição de contorno do terceiro tipo.

- ✓ O estudo do efeito geométrico na descrição da secagem de pranchas de madeira possibilita concluir que quanto mais próximo a geometria considerada está da geometria real, melhores são os resultados obtidos para os parâmetros termofísicos. Esta conclusão é baseada nos indicadores estatísticos obtidos nas diversas simulações efetuadas.
- ✓ A secagem de placas de revestimento cerâmico ocorreu em dois períodos distintos: inicialmente em taxa constante e posteriormente em taxa decrescente.
- ✓ A descrição da secagem em taxa constante pode ser feita através de simples ajustes de uma função do primeiro grau aos dados experimentais relativos a este período.
- ✓ Conforme esperado para o período de taxa constante, quanto maior é a temperatura do ar de secagem, maior é a taxa de secagem.
- ✓ A descrição da secagem de placas de revestimento cerâmico para o período de taxa decrescente através das soluções analíticas produziu resultados satisfatórios.
- ✓ A energia de ativação relativa às secagens das placas cerâmicas de revestimento obtida através da solução analítica para a equação de difusão foi igual ao seguinte valor:  $16,90 \text{ kJ mol}^{-1}$ .
- ✓ As expressões obtidas para difusividade efetiva de massa  $D$  e o coeficiente de transferência convectivo de massa  $h$  em função da temperatura do ar de secagem possibilitaram descrever a cinética de secagem das placas cerâmicas de revestimento a  $80 \text{ }^\circ\text{C}$  com sucesso, sem o demorado processo de otimização, através de uma simples simulação.

### 5.1.2 Soluções numéricas

- ✓ Com relação às técnicas numéricas, os estudos já realizados resultaram no desenvolvimento de um *software* para resolver numericamente a equação de

difusão tridimensional em regime transiente, em coordenadas cartesianas, usando a condição de contorno de Cauchy.

- ✓ Todos os testes realizados com relação à consistência e à coerência do *software* permitem concluir que os resultados obtidos são os resultados esperados para as situações físicas investigadas.
- ✓ As comparações entre as cinéticas de secagem obtidas com o produto desenvolvido com as soluções analíticas disponíveis na literatura indicam um completo acordo entre si, pressupondo parâmetros termofísicos constantes.
- ✓ As comparações entre as cinéticas de secagem obtidas com o produto desenvolvido e com as soluções numéricas unidimensionais disponíveis na literatura indicam um completo acordo entre si, pressupondo parâmetros termofísicos variáveis.
- ✓ Através da solução numérica apresentada é possível impor a condição de contorno de Newman, no caso de fluxo zero, o que possibilita tirar vantagem de possíveis simetrias.
- ✓ O *software* desenvolvido possibilita descrever um processo de difusão em um paralelepípedo inteiro, ou em um pedaço simétrico desse sólido. No entanto, quando for possível, deve-se optar pela descrição do processo em um pedaço simétrico, com significativa economia de tempo de processamento e de espaço de memória.
- ✓ A utilização do *software* desenvolvido para descrever a secagem das placas de revestimento cerâmico possibilitou propor uma expressão para a difusividade efetiva em função do teor de umidade local, o que melhorou sensivelmente os indicadores estatísticos obtidos através do uso de soluções analíticas. O qui-quadrado, por exemplo, diminuiu por um fator próximo de quarenta, para todas as temperaturas do ar de secagem.

- ✓ A energia de ativação obtida considerando-se a difusividade efetiva de massa variável foi igual a  $21,46 \text{ kJ mol}^{-1}$ .
- ✓ As expressões obtidas para D, em função da temperatura do ar de secagem e do teor de umidade local; e para h, em função da temperatura do ar de secagem, possibilitaram descrever a cinética de secagem das placas cerâmicas de revestimento a  $80 \text{ }^\circ\text{C}$  com sucesso, sem o demorado processo de otimização, através de uma simples simulação. Uma comparação entre o resultado obtido com a solução numérica (difusividade efetiva variável) com aquele obtido com a solução analítica (difusividade efetiva constante) mostra a superioridade do resultado obtido com a solução numérica.
- ✓ O modelo da difusão líquida, particularmente com a consideração da difusividade variável, em função do teor de umidade local, satisfatoriamente descreve as secagens estudadas neste trabalho.
- ✓ Uma comparação entre os resultados obtidos para a secagem de pranchas de madeira pressupondo a difusividade efetiva de massa constante nos dois casos, possibilita constatar o completo acordo entre as soluções analítica e numérica.
- ✓ Todos os valores determinados para os parâmetros termofísicos, relativos às secagens dos produtos estudados, são compatíveis com os valores encontrados na literatura para tais produtos.
- ✓ No caso da secagem de madeira, a comparação entre a difusividade efetiva de massa constante, usando uma solução analítica tridimensional, e o resultado obtido neste trabalho, usando uma solução numérica tridimensional, possibilitou concluir que existe um completo acordo entre tais resultados. Esta conclusão permite afirmar que a solução numérica proposta foi validada através de resultados da literatura. No entanto, verificou-se que os indicadores estatísticos para as duas simulações, foram apenas razoáveis.
- ✓ A utilização de expressões variáveis para a difusividade efetiva de massa, dadas como função do teor de umidade local, melhora sensivelmente a descrição da

cinética de secagem de pranchas de madeira. Dentre as expressões testadas para a difusividade, a expressão exponencial, em que o expoente é proporcional ao inverso do teor de umidade local, foi a que apresentou melhor resultado.

## **5.2 Sugestões para trabalhos futuros**

- ✓ Estudar o acoplamento massa-energia na descrição da secagem dos produtos estudados, usando as ferramentas desenvolvidas.
- ✓ Estudar a secagem de outros produtos na forma de paralelepípedo, tais como coco e batata em pedaços, usando as ferramentas desenvolvidas.
- ✓ Descrever o aquecimento, resfriamento, absorção e outros processos de difusão em produtos na forma de paralelepípedo, usando as ferramentas desenvolvidas.

## **REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

ALMEIDA, G. S. **Simulação e experimentação da secagem de cerâmica vermelha em sistemas térmicos industriais.** 2009, 191 p., Tese de Doutorado em Engenharia de Processos, Centro de Ciências e Tecnologia, UFCG, Campina Grande, PB, Brasil.

ALLEGRETTI, O.; FERRARI, S. **A sensor for direct measurement of internal stress in wood during drying: experimental tests toward industrial application.** Drying Technology, v. 26, iss. 9, p. 1150-1154, 2008.

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.

BARATI, A.; KOKABI, M.; FAMILI, M. H. N. **Drying of gelcast ceramic parts via the liquid desiccant method.** Journal of the European Ceramic Society, v. 23, n. 13, p. 2265–2272, 2003.

BARBOSA, C. G.; LIMA, J. T.; ROSADO, S. C. S.; TRUGILHO, P. F. **Elaboração de programa de secagem para madeiras de clones híbridos de eucalyptus spp.** Cerne, Lavras, v. 11, n. 1, p. 40-48, jan./mar. 2005.

BARONAS, R.; IVANAUSKAS, F.; JUODEIKIENE, I.; KAJALAVICIUS, A. **Modelling of moisture movement in wood during outdoor storage.** Nonlinear Analysis: Modelling and Control, v. 6, n. 2, p. 3-14, 2001

BARONAS, R.; IVANAUSKAS, F.; SAPAGOVAS, M. **Modelling of wood drying and an influence of lumber geometry on drying dynamics.** Nonlinear Analysis: Modelling and Control, Vilnius, IMI, n.4, p. 11-22, 1999.

BARROS, J. V. **Produção e estudo da microestrutura e propriedade mecânica da cerâmica  $Ba_2HoZrO_{5,5}$  a base de zircônia para fabricação de cadinhos de alta temperatura.** Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica), Centro de Tecnologia e Geociências, curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Pernambuco, 2003.

BATISTA, V. R.; NASCIMENTO, J. J. S.; LIMA, A. G. B. **Secagem e queima de tijolos cerâmicos maciços e vazados incluindo variações dimensionais e danos estruturais.** Revista Eletrônica de Materiais e Processos, v.3.1, p. 46-61 ISSN 1809-8797, 2008.

BATISTA, V. R.; NASCIMENTO, J. J. S.; LIMA, A. G. B. **Secagem e retração volumétrica de tijolos cerâmicos maciços e vazados: uma investigação teórica e experimental.** Revista Matéria, v. 14, n. 4, p. 1088-1000, 2009.

BEVINGTON, P. R.; ROBINSON, D. K. **Data reduction and error analysis for the Physical Sciences.** Second ed., WCB/McGraw-Hill, Boston, (1992).

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

BORTOLI, A. D. L. **Introdução à dinâmica de fluidos computacional.** Editora da Universidade do Rio Grande do Sul, 2000, 134 p.

BOUKADIDA, N.; NASRALLAH, S. B. **Effect of the variability of heat and mass transfer coefficients on convective and convective-radiative drying of porous media.** *Drying Technology*, v. 20, n. 1, p. 67-91, 2002.

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

CADÉ, M. A.; NASCIMENTO, J. J. S.; LIMA, A. G. B. **Secagem de tijolos cerâmicos vazados: uma aproximação por volumes finitos.** *Revista Matéria*, v. 10, n. 3, p. 433-453, 2005.

CARMO, J. E. F. **Fenômenos de difusão transiente em sólidos esferoidais oblatos. Estudo de caso: secagem de lentilhas.** 2004, 139 p. Tese de Doutorado em Engenharia de Processos, Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, PB, Brasil.

CARMO, J. E. F.; LIMA, A. G. B. **Mass transfer inside oblate spheroidal solids: modelling and simulation.** *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 25, n. 1, p. 19-26, 2008.

CHAPMAN, S. J. **Fortran 90/95 for scientists and engineers.** Boston:WCB/McGraw-Hill, 1<sup>st</sup> Edition, 1998, 874 p.

CHEMKHI, S.; ZAGROUBA, F. **Water diffusion coefficient in clay material from drying data.** *Desalination*, v. 185, iss. 1-3, p 491-498, 2005.

CHEMKHI, S.; ZAGROUBA, F. **Development of a Darcy-flow model applied to simulate the drying of shrinking media.** *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 25, n. 3, p. 503-514, 2008.

CRANK, J. **The Mathematics of Diffusion.** Clarendon Press, Oxford, UK, 1992 414 p.



DEDIC A. D., ZLATANOVIC, M. **Some aspects and comparisons of microwave drying of beech (*Fagus moesiaca*) and fir wood (*Abies alba*).** Holz als Roh-und Werkstoff 59(4):246-249, 2001.

DEDIC, A. D.; MUJUMDAR, A. S.; VORONJEC, D. K. **A three dimensional model for heat and mass transfer in convective wood drying.** Drying Technology, v. 21, iss. 1, p. 1-15, 2003.

DINCER, I. **Moisture transfer analysis during drying of slab woods.** Heat and Mass Transfer, v. 34, iss. 4, p. 317-320, 1998.

FARIAS, V. S. O. **Difusão 3D em sólidos com forma arbitrária usando coordenadas generalizadas.** 2011, 265 p. Tese de Doutorado em Engenharia de Processos. Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de Campina Grande, PB, Brasil.

FIGUEIREDO, R. **Princípios de secagem de produtos biológicos.** João Pessoa: Editora Universitária/UFPB, 229 p, 2004.

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

ITAYA, Y.; UCHIYAMA, S.; HATANO, S.; MORI, S. **Drying Enhancement of clay slab by microwave heating.** Drying Technology, v. 23, n. 6, p. 1243-1255, 2005.

JANKOWSKY, I. P. e LUIZ, M. G., **Review of wood drying research in Brazil: 1984-2004.** Drying Tecnology, v. 24, n. 4, p. 447-455, 2006.

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.

JIAN-FENG, Z.; JI-YOU, G., YING-CHUN, C. **Analysis of moisture diffusivity of larch timber during convective drying condition by using Crank's method and Dincer's method.** Journal of Forestry Research 18(3), 199-203, 2007.

KULASIRI, D., WOODHEAD, I. **On modelling the drying of porous materials: analytical solutions to coupled partial differential equations governing heat and moisture transfer.** Mathematical Problems in Engineering, 2005(3):275-291, 2005.

LAURENCE, N. **Compaq Visual Fortran - A guide to creating Windows applications.** Woburn MA: Digital Press, 2002, 462 p.

LIMA, A. G. B.; NEBRA, S. A., **Theoretical analysis of the diffusion process inside prolate spheroidal solids.** Drying Technology, V. 18, n. 1-2, p. 21-48, 2000.

LIMA, A. G. B. **Fenômeno de difusão em sólidos esferoidais prolatos. Estudo de caso: secagem de bananas.** 1999. 244 p. Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica, UNICAMP, Campinas, São Paulo, Brasil.

LIU, J. Y.; SIMPSON, W. T. **Mathematical relationship between surface emission and diffusion coefficients.** Drying Technology, v. 14, n. 3e4, p. 677-699, 1996.

LIU, J. Y.; SIMPSON, W. T. **Inverse determination of diffusion coefficient for moisture diffusion in Wood.** Proceedings of 33<sup>RD</sup> ASME National Heat Transfer Conference: Heat and Mass Transfer in Porous Media, August 15-17, Albuquerque, New Mexico, 1999.

LIU, J. Y.; SIMPSON, W. T.; VERRILL, S. P. **An inverse moisture diffusion algorithm for the determination of diffusion coefficient.** Drying Technology, v. 19, iss. 8, p. 1555-1568, 2001.

LOOI, A. Y.; GOLONKA, K.; RHODES, M. **Drying kinetics of single porous particles in superheated steam under pressure.** Chemical Engineering Journal, v. 87, n. 3, p. 329-338, 2002.

LUIKOV, A. V. **Analytical Heat Diffusion Theory**. Academic Press, Inc. Ltd, London, 1968, 684 p.

MAČIULAITIS, R.; MALAIŠKIENĖ, J.; KIAČAITĖ, A. **Influence of drying on the final properties of ceramics**. Proceedings of 9th International Conference “Modern Building Materials, Structures and Techniques” held on May 16–18, 2007, Vilnius: Technika, v. 1: p. 113–118. ISBN 978-9955-28-196-6.

MAČIULAITIS, R.; MALAIŠKIENĖ, J.; KIAČAITĖ, A. **The regulation of physical and mechanical parameters of ceramics bricks depending on the drying regime**. Journal of Civil Engineering and Management, v. 14, n. 4, p. 263–268, 2008.

MAČIULAITIS, R.; MALAIŠKIENĖ, J. **The regulation of structural parameters of ceramics depending on the drying regime**. Journal of Civil Engineering and Management, v. 15, n. 2, p. 197–204, 2009.

MELCHIADES, F. G.; DEL ROVERI, C; SOTÉRIO, J.; SILVA, L. L.; BOSCHI, A. O. **Estabilidade das dimensões e do formato de revestimentos cerâmicos. Parte II: Formato**. Cerâmica Industrial, v. 6, n. 6, p.11- 17, 2001.

MELLADO, E. C. E. R. **Modelo de transferência de calor e massa na secagem de madeira serrada de pinus**. 2007, 155 p. Tese de Doutorado em Engenharia Florestal do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Florestal do Setor de Ciências Agrárias da Universidade Federal do Paraná, Curitiba, PR, Brasil.

MIDGLEY, S. Department of Physics, University of Western Australia, **Fortran Parser**, 2002, online, disponível na Internet em <http://smidgley.customer.netspace.net.au/fortran>.

MUSIELAK, G. **Possibility of clay damage during drying**. Drying Technology, 2001, v. 19, n. 8, p. 1645-1659.

MUSIELAK, G.; MIERZWA, D. **Permanent strains in clay-like material during drying**. Drying Technology, 2009, v. 27 (7-8), p. 894-902.

NABHANI, M.; TREMBLAY, C.; FORTIN, Y. **Experimental determination of convective heat and mass transfer coefficients during wood drying.** 8th International IUFRO Wood Drying Conference, 225-230, 2003.

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

OLEK, W.; PERRÉ, P.; WERES, J. **Inverse analysis of the transient bound water diffusion in wood.** *Holzforschung*, v. 59, iss. 1, p. 38-45, 2005.

OLEK, W.; WERES, J. **Effects of the method of identification of the diffusion coefficient on accuracy of modeling bound water transfer in wood.** *Transport in Porous Media* 66(1-2):135-144, 2007.

PERRÉ, P.; TURNER, I. W. **A heterogeneous wood drying computational model that accounts for material property variation across growth rings.** *Chemical Engineering Journal* 86(1-2):117-131, 2002.

PINHEIRO, P. C. C.; RAAD, T. J.; YOSHIDA, M. I. **Model of a process for drying Eucalyptus spp at high temperatures.** *Brazilian Journal of Chemical Engineering*. v. 15, n. 4, p. 382-395, 1998.

PRESS, W. H. ET AL., 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.

RAFIEE, S.; KEYHANI, A.; MOHAMMADI, A. **Soybean seeds mass transfer simulation during drying using finite element method.** *World Applied Sciences Journal* 4(2): p. 284-288, 2008.

RICARDEZ, A. P.; SUÁREZ, J. R.; BERUMEN, L. A. **The drying of red oak at vacuum pressure.** *Maderas. Ciencia y Tecnología* 7(1):23-26, 2005.

SALIN, J. G. **Drying of liquid water in wood as influenced by the capillary fiber network.** *Drying Technology*, v. 26, iss. 5, p. 560-567, 2008.

SANDER, A.; SKANSI, D.; BOLF, N. **Heat and mass transfer models in convection drying of clay slabs.** *Ceramics International*, v. 29, n.3, p. 641-653, 2003.

SCHMEHL, R. **Function Parser**, 2003, online, disponível na Internet em [www.its.uni-karlsruhe.de/~schmehl/functionparserE.html](http://www.its.uni-karlsruhe.de/~schmehl/functionparserE.html), acesso em 29/02/2010.

SILVA, A. A.; NASCIMENTO, J. J. S.; LIMA, A. G. B. **Estudo analítico de secagem de placas cerâmicas usando o método integral baseado em Galerkin e condição de contorno de Dirichlet.** *Revista Eletrônica de Materiais e Processos*, v. 4.2, p. 48-55 ISSN 1809-8797, 2009.

SILVA, C. M. D. P. S. **Difusão de massa em corpos cilíndricos: modelagem e desenvolvimento de software com aplicação à secagem de bananas.** 2010, 129 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Agrícola), Departamento de Engenharia Agrícola, Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de Campina Grande, PB, Brasil.

SILVA, J. B. **Simulação e experimentação da secagem de tijolos cerâmicos vazados.** 2009. Tese de Doutorado do Programa de Pós-Graduação de Engenharia de Processos, Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de Campina Grande.

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

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, 2005.

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.** In: 8<sup>o</sup> Congresso Iberoamericano de Engenharia Mecânica, 2007, Cusco, Peru.

SILVA, W. P. **Transporte difusivo em sólidos com forma arbitrária usando coordenadas generalizadas.** 2007, 263 p. Tese de Doutorado em Engenharia de Processos. Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de Campina Grande, PB, Brasil.

SILVA, W. P.; SILVA, D. D. P. S.; SILVA, C. M. D. P. S.; SILVA, C. D. P. S. **Numerical simulation of the water diffusion in cylindrical solids.** International Journal of Food Engineering, v. 4, n. 2, iss. 2, article 6, doi: 10.2202/1556-3758.1394, 2008.

SILVA, W. P. **Software 1D Heat Transfer, V.6.1** (2008) online, disponível no endereço eletrônico <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/ht.htm>, data de acesso: junho/2010.

SILVA, W. P.; PRECKER, J. W.; SILVA, C. M. D. P. S.; SILVA, D. D. P. S. **Determination of the effective diffusivity via minimization of the objective function by scanning: application to drying of cowpea.** Journal of Food Engineering, 95(2):298–304, 2009.

SILVA, W. P. **Discretizações em fenômenos de transporte computacional, Cursos 1** (2009) Apresentações em PowerPoint, online, disponível no endereço eletrônico: <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/TCMFC.htm>, data de acesso: maio/2010.

SILVA, W. P.; SILVA, C. M. D. P. S. **“Prescribed” software** (2009a), online, disponível no endereço eletrônico <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/Prescribed.htm>, e acessado em maio de 2010.

SILVA, W. P.; SILVA, C. M. D. P. S. **“Convective” software** (2009b), online, disponível no endereço eletrônico: <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/Convective.htm> data de acesso: maio/2010.

SILVA, W. P.; SILVA, C. M. D. P. S. **Lab fit curve fitting software, V.7.2.46** (2009c); online, disponível em : [www.labfit.net](http://www.labfit.net), data de acesso: fevereiro/2011.

SILVA, W. P.; SILVA, L. D.; e SILVA, C. M. D. P. S.; NASCIMENTO, P. L. **Optimization and simulation of drying processes using diffusion models: application to wood drying using forced air at low temperature.** Wood Science and Technology (Print), p. 1-12, 2010.

SILVA, W. P.; SILVA, C. M. D. P. S.; SILVA, C. D. P. S **Visual fortran tutorial V.5.8** online, disponível em: <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/TCMFC.htm>, data de acesso: 2011.

SILVA, W. P., “**Contour plots**” software (2010) online, disponível no seguinte endereço eletrônico <http://zeus.df.ufcg.edu.br/labfit/Contour.zip>, data de acesso: janeiro/2011.

SKANSI, D.; TOMAS, S. **Microwave drying kinetics of a clay-plate.** Ceramics International, v. 21, n. 3, p. 207-211, 1995.

SU, S. L. **Modeling of multi-phase moisture transfer and induced stress in drying clay bricks.** Applied Clay Science, v. 12, n. 3, p. 189-207, 1997.

TAYLOR, J.R. **An Introduction to Error Analysis. University Science Books**, 2nd Edition, Sausalito, California, 1997.

TREMBLAY, C.; CLOUTIER, A.; FORTIN, Y. **Experimental determination of the convective heat and mass transfer coefficients for wood drying.** Wood Science and Technology 34(3): 253-276, 2000.

VIEIRA, C. M. F.; FEITOSA, H. S.; MONTEIRO, S. N. **Avaliação da secagem de cerâmica vermelha através da curva de Bigot.** Cerâmica Industrial, v. 8, n.1, p. 42-46, 2003.