

EQUAÇÃO DE DIFUSÃO EM COORDENADAS ESFÉRICAS APLICADA EM PROCESSOS DE SECAGEM

Isaac Ferreira de Lima(1); Célia Maria Rufino Franco(2)

Universidade Federal de Campina Grande, isaacferreira031@gmail.com (1)

Universidade Federal de Campina Grande celiarufino@ufcg.edu.br (2)

Resumo:

Este trabalho apresenta resultados parciais de uma pesquisa em desenvolvimento que tem como objetivo utilizar ferramentas computacionais para examinar a equação de difusão em coordenadas esféricas, sob o ponto de vista das aplicações, dando ênfase ao fenômeno de transferência de massa em processos de secagem. A solução da equação de difusão bidimensional em coordenadas esféricas foi obtida utilizando o método de separação de variáveis e um código computacional foi desenvolvido no software Mathematica afim de simular o teor de umidade de grãos de arroz em casca durante a secagem em camada fina na temperatura de 40°C. Considerou-se o modelo de difusão com condição de contorno de primeira espécie. O código computacional implementado no software Mathematica foi validado a partir do software Prescribed. A solução da equação de difusão foi ajustada aos dados experimentais de secagem de arroz em casca e o coeficiente de difusividade foi estimado. Os resultados mostram que o modelo descreve bem a secagem de grãos de arroz em casca.

Palavras-chave: Equação de Difusão, Secagem, Software Mathematica.

Introdução

Difusão de calor e massa são encontrados em vários processos de interesse tecnológico, incluindo a secagem de produtos agrícolas. O processo de secagem envolve transferência de calor e massa (umidade) entre um produto higroscópico e o ar de secagem (BROOKER et al., 1992, FIOREZE, 2003). Em consequência, o modelo matemático adequado para descrever esses fenômenos envolve a solução da Equação geral de transporte. Se a variável de interesse é a temperatura, tem-se um problema de difusão de calor (Equação do Calor). Por outro lado, se a variável de interesse é o teor de umidade de um determinado produto higroscópico, configura-se um problema de difusão de massa (Equação de Difusão). Da mesma forma que um gradiente de temperatura é necessário para a transferência de calor, um gradiente de concentração de umidade é necessário para o transporte de água. O modelo matemático para transferência de massa utilizado é baseado na teoria de difusão líquida no interior de sólidos, isto é, a difusão mássica ocorre no sentido da diminuição de concentração (umidade) e a água migra apenas na fase líquida.

Uma grande variedade de problemas, tanto na engenharia quanto na ciência em geral utiliza a teoria de difusão para descrever o transporte de matéria e/ou energia em um meio dentre as quais, pode-se destacar o aquecimento, a secagem, o resfriamento e em alguns casos, o congelamento de corpos. Em particular, em particular, o estudo da difusão de calor e massa em meios granulares torna-se especialmente importante, pois melhora o entendimento do processo de secagem, o que é de grande interesse na indústria de processos de alimentos. A modelagem matemática proporciona a predição, durante o processo de secagem, das temperaturas do ar e do material poroso, das trocas de calor e massa entre esse material e o ar, bem como dos teores de umidade no interior do produto e umidade do ar em todo o secador, fornecendo subsídios para o seu controle. Este controle é necessário para proporcionar condições ótimas ao processo, minimizando as perdas do produto e o consumo de energia. Tais necessidades associadas aos elevados custos da construção de protótipos baseados em modelos teóricos, tem aumentado a importância do desenvolvimento de pesquisas de modelos matemáticos otimizando, com simulações de secagem a partir de dados experimentais.

O desenvolvimento de modelos matemáticos requer a necessidade de se estabelecer certas hipóteses na descrição do processo físico. Estas hipóteses estão relacionadas, dentre outros fatores, com as condições de contorno, com os parâmetros de transporte, e com a geometria do corpo dentro do qual ocorre o transporte de matéria ou energia. Neste estudo, considerar-se-á condição de contorno de primeira espécie que pressupõe que o teor de umidade de equilíbrio é atingido instantaneamente na superfície do produto e não se altera durante o processo. O coeficiente de difusão de massa, considerado constante, será estimado a partir do ajuste da solução do modelo aos dados experimentais de secagem de grãos de arroz reportados na literatura, utilizando-se um código computacional implementado no software Mathematica.

Este trabalho apresenta resultados de uma pesquisa em desenvolvimento e tem como objetivo examinar a equação de difusão em coordenadas esféricas sob o ponto de vista das aplicações, dando ênfase aos fenômenos de transferência de massa em processos de secagem. Neste sentido, procurou-se desenvolver um código computacional na plataforma Mathematica para simular processos de transferência de massa e estimar, a partir dos dados experimentais, a difusividade de massa efetiva do grão de arroz em casca.

Metodologia

A equação geral de transporte (equação de

conservação) para um volume de controle infinitesimal é dada por (PATANKAR, 1980; BECK et al., 1992; MALISKA, 2004):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\lambda\Phi) + \nabla \cdot (\lambda\vec{v}\Phi) = \nabla \cdot (\Gamma^{\Phi}\nabla\Phi) + S^{\Phi} \quad (1)$$

onde Φ é a variável dependente de interesse, λ e Γ^{Φ} são coeficientes de transporte, \vec{v} é o vetor velocidade do meio e S^{Φ} é o termo fonte.

A equação que descreve o fenômeno de difusão para uma variável genérica Φ é obtida da Equação (1) fazendo $\vec{v} = \mathbf{0}$, já que neste caso o meio encontra-se em repouso (velocidade nula) e a variação da grandeza dentro do volume de controle ocorre unicamente por difusão. Assim, a equação de difusão é expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\lambda\Phi) = \nabla \cdot (\Gamma^{\Phi}\nabla\Phi) + S^{\Phi} \quad (2)$$

ou ainda, em coordenadas cartesianas (x, y, z) tem-se:

$$\frac{\partial(\lambda\Phi)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma^{\Phi}\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma^{\Phi}\frac{\partial\Phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma^{\Phi}\frac{\partial\Phi}{\partial z}\right) + S^{\Phi} \quad (3)$$

Do ponto de vista das origens físicas e das equações de taxas governantes, existem fortes analogias entre os processos de transferência de calor e de massa por difusão. A equação da taxa para a difusão mássica é conhecida como primeira lei de Fick e é dada na forma vetorial por:

$$\vec{j} = -D\nabla M \quad (4)$$

onde M é o teor de umidade e D é a difusividade efetiva de massa. O símbolo \vec{j} é definido como sendo o fluxo mássico difusivo e representa o fluxo de água por unidade de área em relação a um determinado referencial.

Considerando $\lambda = 1$, $\Phi = M$ e $\Gamma^{\Phi} = D$ na equação de difusão (2), obtém-se a equação para o transporte difusivo de massa, dada por:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \nabla \cdot (D\nabla M) + S^{\Phi} \quad (5)$$

onde M é o teor de umidade (em base seca) no instante t em um volume infinitesimal e S^{Φ} é o termo fonte.

A equação (5) pode ser escrita em coordenadas esféricas, da seguinte forma:

$$\frac{\partial(M)}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(D r^2 \frac{\partial M}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(D \sin \theta \frac{\partial M}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \left(D \frac{\partial M}{\partial \phi} \right) + S^* \quad (6)$$

Afim de descrever o processo de secagem, assumiu-se uma difusão unidimensional na direção do eixo r e que não há geração de energia. Neste caso $\frac{\partial M}{\partial \theta} = \frac{\partial M}{\partial \phi} = 0$ e a equação de difusão (6) pode ser escrita como segue:

$$\frac{\partial(M)}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(D r^2 \frac{\partial M}{\partial r} \right) \quad (7)$$

O domínio do problema em estudo consiste na esfera de raio R e as seguintes hipóteses foram consideradas na modelagem matemática:

- O sólido é homogêneo, isotópico e constituído de material sólido e água na fase líquida;
- As propriedades termo físicas são constantes durante o processo de secagem;
- As distribuições de umidade e temperatura no interior do sólido são uniformes no início do processo;
- O fenômeno de secagem ocorre por difusão de água e difusão de calor no interior do sólido e por evaporação da água e convecção térmica na superfície do mesmo

O problema matemático consiste em obter a solução da equação (7) satisfazendo as seguintes condições:

Condições de contorno de 1ª espécie. $\begin{cases} t > 0 \Rightarrow M(R, t) = t_0 \\ t > 0 \Rightarrow M(0, t) \neq \infty(\text{valor infinito}) \end{cases}$

Condição de simetria $\left. \frac{\partial M}{\partial r} \right|_{r=0} = 0$ (em $r = 0$, não há fluxo) $0 \leq r \leq R$

Condição inicial: $t = 0 \Rightarrow M = M_i$ em $0 < r < R$

Fazendo : $M^* = \frac{M - M_0}{M_i - M_0}$

onde M_i é o teor de umidade inicial e M_0 é o teor de umidade de equilíbrio, obtém-se pelo

método de separação de variáveis a seguinte solução:

$$M^*(r, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2R \cdot (-1)^{n+1}}{n\pi} \frac{1}{r} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{R} r \right) e^{-D \left(\frac{n\pi}{R} \right)^2 t} \quad (8)$$

Valor médio do teor de umidade

O valor médio da umidade é dado por:

$$\int_V M^* dV \quad (9)$$

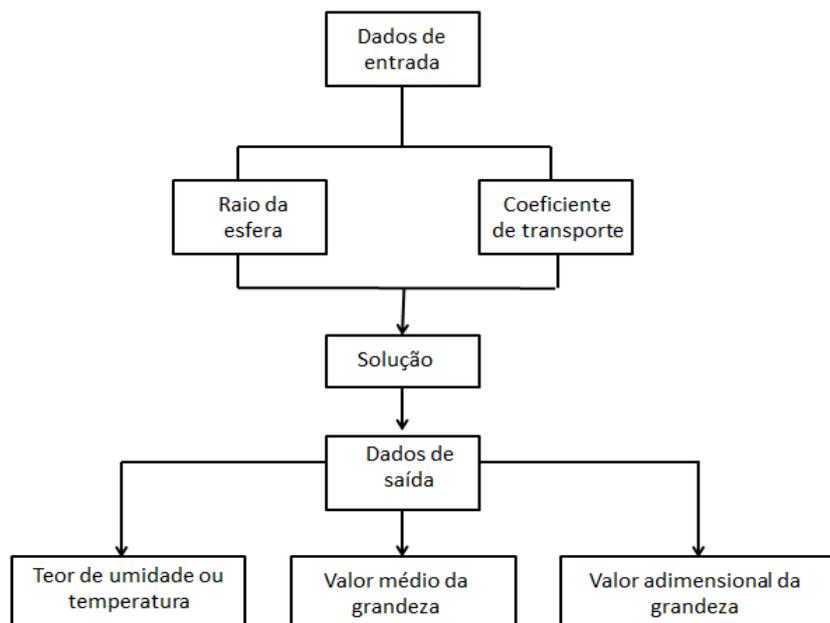
onde V é o volume da esfera.

Considerando o volume da esfera e substituindo (8) em (9) obtém-se:

$$\bar{M}^* = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{6}{n^2 \pi^2} e^{-D \frac{n^2 \pi^2}{R^2} t} \quad (10)$$

Resultados e Discursões

Foi desenvolvido um código computacional na plataforma Mathematica cujo fluxograma de operação é apresentado a seguir:



O código computacional desenvolvido foi utilizado para simular o teor de umidade do grão de arroz durante o processo de secagem contínua em leito fixo na temperatura de 40°C.

Dados experimentais da secagem de grãos de arroz em casca disponíveis na literatura são apresentados nas Tabelas 1 e 2.

Tabela 1: Parâmetros experimentais

Grão	Temperatura do ar de secagem (°C)	M ₀ (b.s.)	M _{eq} (b.s.)	T ₀ (°C)	T _{eq} (°C)
Arroz em casca BRSMG-Conai	40	22,46	5,45	29,7	39,8

Tabela 2: Dimensões do grão de arroz (BRSMG Conai) in natura com casca

Espessura (a')	Comprimento (b')	Largura (c')
(mm)	(mm)	(mm)
1,92	9,24	2,27

A partir dos dados fornecidos na Tabela 2, calculou-se o raio da esfera equivalente ao elipsoide, o qual foi utilizado na simulação computacional ($R = 1,71$ mm).

O teor de umidade médio adimensional (\bar{M}^*) é dado pela equação (10) o único parâmetro desconhecido é a difusividade de massa (D). A partir dos dados experimentais, relativos à secagem de grãos de arroz foi possível estimar o coeficiente de difusão.

Para estimar o parâmetro **D** de modo que a solução teórica produza resultados o mais próximo possível dos dados experimentais utilizou-se o software Prescribed (SILVA e SILVA, 2009) para geometria do tipo esfera. O algoritmo de otimização utilizado neste software está descrito em Silva et al. (2013). O valor do coeficiente de difusão fornecido pelo Prescribed foi utilizado como dado de entrada no código computacional desenvolvido no software Mathematica e as curvas simuladas do teor de umidade médio do grão de arroz são apresentadas na Figura 1.

Analisando a Figura 1 verifica-se uma excelente concordância entre os resultados, mostrando que o código computacional desenvolvido fornece valores compatíveis com os obtidos com o Prescribed.

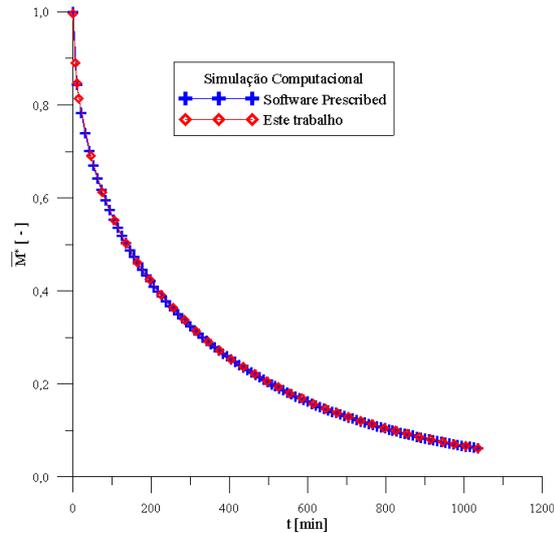


Figura 1: Comparação entre os resultados simulados com o código computacional desenvolvido neste trabalho e os obtidos pelo software Prescribed dos teores de umidade médio adimensional durante a secagem de arroz em casca na temperatura de 40°C.

A Figura 2 mostra a comparação entre os valores simulados e experimentais do teor de umidade médio adimensional de grãos de arroz em casca durante a secagem na temperatura de 40 °C. O valor do coeficiente de difusão obtido e alguns parâmetros estatísticos que medem a qualidade do ajuste do modelo aos dados experimentais são dados na Tabela 3. O melhor valor da difusividade efetiva corresponde ao menor valor do qui-quadrado (χ^2):

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n_0} [\Phi_i^{\text{pre}} - \Phi_i^{\text{exp}}]^2 \quad (11)$$

onde Φ_i^{exp} é o i -ésimo ponto experimental, Φ_i^{pre} é o valor previsto da grandeza Φ no mesmo ponto, n_0 é o número de observações.

O coeficiente de correlação (r) e o desvio padrão (s) foram utilizados para medir a qualidade do ajuste. Estes parâmetros são definidos como segue (CHAPRA e CANALE, 1989; SILVA e SILVA, 1998):

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{n_0} \Phi_i^{\text{pre}} \cdot \Phi_i^{\text{exp}} - n_0 \bar{\Phi}^{\text{pre}} \bar{\Phi}^{\text{exp}}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n_0} [\Phi_i^{\text{pre}}]^2 - n_0 [\bar{\Phi}^{\text{pre}}]^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^{n_0} [\Phi_i^{\text{exp}}]^2 - n_0 [\bar{\Phi}^{\text{exp}}]^2}} \quad (12)$$

e

$$s = \sqrt{\frac{1}{n_0} \sum_{i=1}^{n_0} [\Phi_i^{\text{pre}} - \Phi_i^{\text{exp}}]^2} \quad (13)$$

onde Φ_i^{exp} é o i-ésimo ponto experimental, Φ_i^{pre} é o valor predito da grandeza Φ no mesmo ponto, n_0 é o número de observações, $\bar{\Phi}^{\text{exp}}$ e $\bar{\Phi}^{\text{pre}}$ são as médias aritméticas dos Φ_i^{exp} e Φ_i^{pre} , respectivamente. Uma vez calculado o coeficiente de correlação, pode-se obter o coeficiente de determinação r^2 .

Tabela 3: Parâmetros estatísticos obtidos com as simulações da secagem contínua de arroz em casca com o código computacional desenvolvido.

D [cm ² /s]	χ^2	r^2	S
$1,10 \times 10^{-7}$	$3,9775 \times 10^{-2}$	0,992478	$3,2353 \times 10^{-2}$

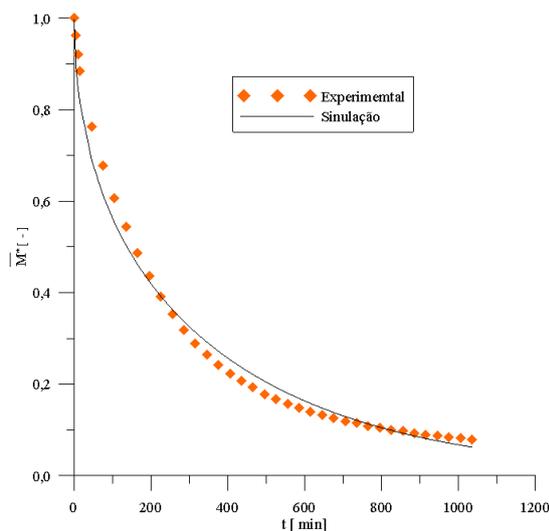


Figura 2: Comparação entre os teores de umidade médio adimensional teórico e experimental durante a secagem de arroz em casca na temperatura de 40°C.

Conclusão:

Este trabalho permitiu inserir o software Mathematica como ferramenta no estudo das equações diferenciais parciais aplicadas em processos de secagem. O código computacional desenvolvido apresenta resultados compatíveis com o software Prescribed. De acordo com os indicadores estatísticos, o modelo de difusão apresentado descreve bem os dados experimentais de secagem de grãos de arroz. Foi possível estimar o coeficiente de difusão de massa do produto. O código computacional desenvolvido também fornece o teor de umidade no interior do produto e poderá ser utilizado para

simular a distribuição de umidade e estabelecer condições ótimas ao processo de secagem para que se tenha produto de alta qualidade.

Referências

BAUMER, J. E.; MARIANI, V. C. **Investigação da condução de calor unidimensional e bidimensional em regime permanente.** Anais do XXVIII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, São Paulo, 2005.

BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. **Equações diferenciais elementares e problemas e valores de contorno.** 8ª edição. Rio de Janeiro: LTC, 2006.

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

FIGUEIREDO, R. **Princípios de secagem de produtos biológicos.** João Pessoa: Editora Universitária/UFPB, 2003. 229 p.

FRANCO, C. M. R.; LIMA, A. G. B.; SILVA, J. V.; NUNES, A. G. Applying liquid diffusion model for continuous drying of rough rice in fixed bed. **Defect and Diffusion Forum**, Vol. 369, p. 152-156, 2016.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional.** Rio de Janeiro: LTC Editora S.A., 2004.

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

LIMA, A. G. B.; DELGADO, J. M. P. Q.; NETO, S. R. F.; FRANCO, C. M. R. **Drying and Energy Technologies.** Chapter: Intermittent drying: fundamentals, modeling and applications. Springer, Vol. 63, p.19-41, 2015