

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

DANIEL RIGONI

VERIFICAÇÃO E ANÁLISE DE ERROS DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO
PROCESSO DE AERAÇÃO DA MASSA DE GRÃOS UTILIZANDO O MÉTODO DAS
SOLUÇÕES FABRICADAS

CURITIBA

2022

DANIEL RIGONI

VERIFICAÇÃO E ANÁLISE DE ERROS DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO
PROCESSO DE AERAÇÃO DA MASSA DE GRÃOS UTILIZANDO O MÉTODO DAS
SOLUÇÕES FABRICADAS

Dissertação apresentada como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Métodos Numéricos em Engenharia pelo Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia do Setor de Ciências Exatas e Tecnologia, Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Marcio Augusto Villela Pinto

CURITIBA

2022

DADOS INTERNACIONAIS DE CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO (CIP)
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
SISTEMA DE BIBLIOTECAS – BIBLIOTECA DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA

Rigoni, Daniel

Verificação e análise de erros da simulação numérica do processo de aeração da massa de grãos utilizando o método das soluções fabricadas / Daniel Rigoni. – Curitiba, 2022.

1 recurso on-line : PDF.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia.

Orientador: Marcio Augusto Villela Pinto

1. Grãos – Armazenamento. 2. Grãos – Aeração da massa. 3. Método de diferença finita. 4. Método das soluções fabricadas. I. Universidade Federal do Paraná. II. Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia. III. Pinto, Marcio Augusto Villela. IV. Título.

Bibliotecário: Elias Barbosa da Silva CRB-9/1894

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação MÉTODOS NUMÉRICOS EM ENGENHARIA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **DANIEL RIGONI** intitulada: **VERIFICAÇÃO E ANÁLISE DE ERROS DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE AERAÇÃO DA MASSA DE GRÃOS UTILIZANDO O MÉTODO DAS SOLUÇÕES FABRICADAS**, sob orientação do Prof. Dr. MARCIO AUGUSTO VILLELA PINTO, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

Curitiba, 20 de Maio de 2022.

Assinatura Eletrônica

23/05/2022 11:17:18.0

MARCIO AUGUSTO VILLELA PINTO

Presidente da Banca Examinadora

Assinatura Eletrônica

24/05/2022 10:19:43.0

DANIELA DE CARVALHO LOPES

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL REI)

Assinatura Eletrônica

25/05/2022 11:15:01.0

SEBASTIÃO ROMERO FRANCO

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE ESTADUAL DO CENTRO-OESTE)

*Dedico esta dissertação à minha mãe Soili Rigoni, ao meu pai Orlei Rigoni
e à minha namorada Elizandra.*

AGRADECIMENTOS

A Deus, acima de tudo, pela oportunidade de existir e guiar meus passos, iluminando-me e conduzindo pelos melhores caminhos.

À meus pais Orlei Rigoni e Soili Rigoni por estarem sempre ao meu lado em todos os momentos.

À minha namorada Elizandra, pelo suporte e compreensão pelo tempo dedicado aos estudos.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Marcio Augusto Villela Pinto, pela sua dedicação, paciência e disponibilidade em me orientar.

Agradeço ao colega e amigo Prof. Jotair Kwiatkowski Jr, pelos ensinamentos e importantes contribuições.

Agradeço aos membros da banca examinadora, Profa. Dra. Daniela de Carvalho Lopes, Prof. Dr. Sebastião Romero Franco, Prof. e Prof. Dr. Marcio Augusto Villela Pinto, pelo tempo dispensado à leitura deste trabalho e pelas sugestões apontadas.

Agradeço ao Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia (PPGMNE) da Universidade Federal do Paraná (UFPR).

Agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo suporte financeiro.

Por fim, e não menos importante, aos meus amigos, Leonardo Delanora, Raphael Pezzi e Lucas Veira, pelo apoio e incentivo durante este percurso.

*" The price of success is hard work, dedication to the job at hand...
whether we win or lose, we have applied the best of ourselves to the task at hand."*

Vince Lombardi

RESUMO

O objetivo deste trabalho é apresentar uma solução analítica, por meio do Método das Soluções Fabricadas (MSF), para o modelo matemático que descreve o comportamento do processo de aeração da massa de grãos. Em contraste com trabalhos relacionados na literatura, utilizou-se várias aproximações numéricas para resolver o modelo matemático. Utilizou-se o Método das Diferenças Finitas (MDF) empregando-se a discretização espacial dado pelos métodos de Roberts e Weiss, Leith, esquema com um ponto a montante (UDS), esquema com diferença central (CDS) e UDS com correção adiada (UDS-C), combinados com as formulações temporais explícita, implícita e Crank-Nicolson. Adicionou-se a viscosidade artificial para controlar oscilações não-físicas nas soluções numéricas dos métodos de segunda ordem. Realizou-se uma análise de erros para todas as aproximações utilizadas, a fim de verificar a ordem efetiva do erro de discretização com o refinamento de malha. Além disso, os resultados obtidos numericamente foram comparados com a solução analítica e realizou-se uma comparação entre os tempos de Unidade Central de Processamento (CPU) em diferentes níveis de refinamento. Assim, verificou-se que os métodos CDS com formulação temporal Crank-Nicolson, Roberts e Weiss e Leith tiveram melhor desempenho do que o método UDS com a formulação explícita, amplamente utilizado na literatura.

Palavras-chaves: Armazenagem de Grãos. Pós-colheita. Diferenças Finitas. Viscosidade Artificial. Roberts e Weiss. Leith. Thorpe.

ABSTRACT

The goal of this work is to present an analytical solution, by means of the Method of Manufactured Solutions (MMS), for the mathematical model that describes the behaviour of the grain mass aeration process. In contrast to related works in the literature, several numerical approximations were used to solve the mathematical model. The Finite Difference Method (FDM) was used employing the spatial approximations given by the methods of Roberts and Weiss, Leith, Upwind Difference Scheme (UDS), Central Difference Scheme (CDS) and UDS with deferred correction (UDS-C) combined with the explicit, implicit and Crank-Nicolson temporal formulations. Artificial viscosity was added to control non-physical oscillations in the numerical solutions of the second-order methods. An error analysis was performed for all the approximations used, in order to verify the effective order of the discretization error with mesh refinement. Moreover, the results obtained numerically were compared with the analytical solution and a comparison between the Central Processing Unit (CPU) times at different levels of refinement was performed. Thus, it was verified that the methods CDS with Crank-Nicolson temporal formulation, Roberts and Weiss and Leith performed better than the UDS method with the explicit formulation, widely used in the literature.

Key-words: Grain Storage. Postharvest. Finite Difference. Artificial Viscosity. Roberts and Weiss. Leith. Thorpe.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIGURA 1 – COMPONENTES DE UM SISTEMA DE AERAÇÃO.	25
FIGURA 2 – DOMÍNIO DISCRETO DE UM SISTEMA QUE REPRESENTA O ARMAZENAMENTO DE UMA MASSA DE GRÃOS.	31
FIGURA 3 – MALHA PARA A SOLUÇÃO NUMÉRICA POR MEIO DO MDF, DE NÓ CENTRAL P , E SEUS VIZINHOS, EM DOIS PASSOS DE TEMPOS DISTINTOS.	32
FIGURA 4 – ESTRUTURA DE UMA MATRIZ TRIDIAGONAL.	38
FIGURA 5 – DOMÍNIO DE CÁLCULO.	44
FIGURA 6 – DADOS EXPERIMENTAIS DA TEMPERATURA DOS GRÃOS. .	50
FIGURA 7 – SOLUÇÃO ANALÍTICA PROPOSTA E OS DADOS EXPERIMEN- TAIS.	51
FIGURA 8 – DECAIMENTO DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM O RE- FINO DE MALHA PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES EM $T_{0,15}$	70
FIGURA 9 – DECAIMENTO DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM O RE- FINO DE MALHA PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES EM $T_{0,27}$	70
FIGURA 10 – DECAIMENTO DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM O RE- FINO DE MALHA PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES EM $T_{0,40}$	71
FIGURA 11 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM O REFINO DE MALHA EM $T_{0,15}$ PARA TODAS OS MÉTODOS EM ESTUDO.	71
FIGURA 12 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM O REFINO DE MALHA EM $T_{0,27}$ PARA TODAS OS MÉTODOS EM ESTUDO.	72
FIGURA 13 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM O REFINO DE MALHA EM $T_{0,40}$ PARA TODAS OS MÉTODOS EM ESTUDO.	72
FIGURA 14 – EFEITOS DA VISCOSIDADE ARTIFICIAL NO MÉTODO CDS – CRANK-NICOLSON.	74
FIGURA 15 – EFEITOS DA VISCOSIDADE ARTIFICIAL NO MÉTODO RWS. .	74
FIGURA 16 – EFEITOS DA VISCOSIDADE ARTIFICIAL NO MÉTODO LS . .	75
FIGURA 17 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANA- LÍTICAS UTILIZANDO UDS – EXPLÍCITO.	76
FIGURA 18 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANA- LÍTICAS UTILIZANDO UDS – IMPLÍCITO.	76

FIGURA 19 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO UDS - CRANK-NICOLSON.	77
FIGURA 20 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO CDS - IMPLÍCITO.	78
FIGURA 21 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO CDS - CRANK-NICOLSON.	78
FIGURA 22 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO UDS-C - IMPLÍCITO.	79
FIGURA 23 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO UDS-C - CRANK-NICOLSON.	79
FIGURA 24 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO RWS.	80
FIGURA 25 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO LS.	81
FIGURA 26 – NORMA L_2 DO ERRO <i>VERSUS</i> O NÚMERO DE INCÓGNITAS.	82
FIGURA 27 – EFEITO DO NÚMERO DE INCÓGNITAS SOBRE O TEMPO DE CPU PARA CADA APROXIMAÇÃO UTILIZADA	83

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – FORMULAÇÕES TEMPORAIS DE ACORDO COM O VALOR DE θ	34
TABELA 2 – ORDENS ASSINTÓTICAS DAS APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS UTILIZADAS.	42
TABELA 3 – VALORES PARA A POROSIDADE DA MASSA DE GRÃOS.	45
TABELA 4 – VALORES PARA A DENSIDADE DA MASSA DE GRÃOS.	45
TABELA 5 – VALORES PARA O CALOR ESPECÍFICO DA MASSA DE GRÃOS.	46
TABELA 6 – VALORES DAS CONSTANTES DA EQUAÇÃO DE CHUNG-PFOST.	46
TABELA 7 – ORDENS EFETIVAS DAS APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS UTILIZADAS.	73
TABELA 8 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO A VISCOSIDADE ARTIFICIAL NO MÉTODO CDS - CRANK-NICOLSON E NÃO UTILIZANDO A VISCOSIDADE ARTIFICIAL COM $N_y = 256$ e $N_t = 512$	74
TABELA 9 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO A VISCOSIDADE ARTIFICIAL NO MÉTODO RWS E NÃO UTILIZANDO A VISCOSIDADE ARTIFICIAL COM $N_y = 256$ e $N_t = 512$	75
TABELA 10 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO A VISCOSIDADE ARTIFICIAL NO MÉTODO LS E NÃO UTILIZANDO A VISCOSIDADE ARTIFICIAL COM $N_y = 256$ e $N_t = 512$	75
TABELA 11 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO UDS - EXPLÍCITO, UDS - IMPLÍCITO E UDS - CRANK-NICOLSON.	77
TABELA 12 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO CDS - IMPLÍCITO E CDS - CRANK-NICOLSON.	78
TABELA 13 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO UDS-C - IMPLÍCITO E UDS-C - CRANK-NICOLSON.	80
TABELA 14 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO RWS.	80
TABELA 15 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO LS.	81

TABELA 16 – NORMAS L_2 DO ERRO NUMÉRICO EM RELAÇÃO AO NÚ- MERO DE INCÓGNITAS PARA CADA MÉTODO UTILIZADO.	82
TABELA 17 – TEMPO DE CPU (SEGUNDOS) DAS APROXIMAÇÕES UTILI- ZADAS EM RELAÇÃO AO NÚMERO DE INCÓGNITAS.	83
TABELA 18 – COMPARATIVO ENTRE OS MELHORES MÉTODOS	84

LISTA DE ABREVIATURAS E DE SIGLAS

CDS	Esquema com Diferença Central
CPU	Unidade Central de Processamento
EDP	Equação Diferencial Parcial
LS	Esquema de Leith
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
MSF	Método das Soluções Fabricadas
RWS	Esquema de Roberts e Weiss
TDMA	Algoritmo para Matriz Tridiagonal
TIC	Tecnologia de Informação e Comunicação
UDS	Esquema com um Ponto a Montante
UDS-C	Esquema UDS com Correção Adiada

LISTA DE SÍMBOLOS

L	Altura do local de armazenamento da massa de grãos (m)
Q_r	Calor de oxidação dos grãos ($J s^{-1} m^{-3}$)
c_W	Calor específico da água ($J kg^{-1} ^\circ C^{-1}$)
c_a	Calor específico do ar ($J kg^{-1} ^\circ C^{-1}$)
c_g	Calor específico dos grãos ($J kg^{-1} ^\circ C^{-1}$)
a_N	Coefficiente associado à variável do nó N
a_S	Coefficiente associado à variável do nó S
a_P	Coefficiente associado à variável do nó central P
C_i	Coefficientes relacionados ao erro de discretização
E_M	Comparativo entre normas L_2
t_{CPU}^M	Comparativo entre tempos de CPU (s)
A	Constante (A) da equação de Chung-Pfost
B	Constante (B) da equação Chung-Pfost
C	Constante (C) da equação de Chung-Pfost
D	Constante adimensional ajustável
c	Constante dependente do método
ρ_a	Densidade do ar intragranular ($kg m^{-3}$)
ρ_σ	Densidade dos grãos ($kg m^{-3}$)
Δt	Diferença entre o tempo atual de simulação e o tempo anterior
y	Eixo na direção vertical (orientado de baixo para cima) (m)
h_s	Entalpia diferencial de sorção ($J kg^{-1}$)
h_v	Entalpia específica de vaporização da água ($J kg^{-1}$)
E	Erro de discretização
ξ_{CDS}	Erro de truncamento associado à aproximação CDS

ξ_{LS}	Erro de truncamento associado à aproximação LS
ξ_{RWS}	Erro de truncamento associado à aproximação RWS
ξ_{UDS}	Erro de truncamento associado à aproximação UDS
ξ_{UDS-C}	Erro de truncamento associado à aproximação UDS-C
Δy	Espaçamento entre dois nós consecutivos
β	Fator de mistura entre os esquemas UDS e CDS da aproximação UDS-C
$erfc$	Função erro complementar
P	Identificador da posição do nó central
N	Identificador da posição do ponto discreto na direção norte
S	Identificador da posição do ponto discreto na direção sul
θ	Indicador do esquema temporal, explícito, implícito ou Crank-Nicolson
n	Localização temporal do nó
\mathbf{A}	Matriz do sistema
NC	Nó localizado no contorno ($y = L$)
N	Número de incógnitas
N_y	Número de nós na direção y
N_t	Número de passos no tempo
p_L	Ordem assintótica
p	Ordem de complexidade do método
p_E	Ordem efetiva
M_T	Parâmetro relacionado à temperatura utilizado para calcular a perda de matéria seca em relação ao tempo
M_U	Parâmetro relacionado à umidade utilizado para calcular a perda de matéria seca em relação ao tempo
\mathcal{A}	Parâmetro utilizado para simplificar a notação
\mathcal{B}	Parâmetro utilizado para simplificar a notação
\mathcal{F}	Parâmetro utilizado para simplificar a notação

m	Perda de matéria seca (kg)
ϵ	Porosidade da massa de grãos (decimal)
P_{atm}	Pressão atmosférica (kPa)
p_s	Pressão de vapor de saturação do ar (kPa)
p_{sa}	Pressão de vapor de saturação utilizando a temperatura do ar de aeração (kPa)
R	Razão de mistura (g (vapor da água) g^{-1} (ar seco))
R_C	Razão de mistura em $y = 0$ (g (vapor da água) g^{-1} (ar seco))
R_I	Razão de mistura inicial da massa de grãos (g (vapor da água) g^{-1} (ar seco))
q	Razão de refinamento de malhas
ϕ	Solução numérica aproximada obtida de uma certa variável
h	Tamanho representativo de malha
T_{amb}	Temperatura ambiente ($^{\circ}C$)
T_C	Temperatura do ar de aeração (temperatura em $y = 0$) ($^{\circ}C$)
T	Temperatura dos grãos ($^{\circ}C$)
T_I	Temperatura inicial da massa de grãos ($^{\circ}C$)
t	Tempo (s)
t_{CPU}	Tempo de CPU (s)
t_f	Tempo final de simulação (s)
U_p	Teor de água inicial dos grãos (% b.u.).
S_T	Termo fonte
b_P	Termo fonte associado à variável do nó central P
U	Umidade dos grãos (kg (água) kg^{-1} (grão seco))
U_C	Umidade em $y = 0$ (kg (água) kg^{-1} (grão seco))
U_I	Umidade inicial da massa de grãos utilizada nos cálculos (kg (água) kg^{-1} (grão seco))
r_u	Umidade relativa de equilíbrio (%)

u_r	Umidade relativa do ar ambiente (%)
r_a	Umidade relativa do ar de aeração (%)
Φ	Valor da solução analítica de uma certa variável
Λ	Variável arbitrária
S	Variável auxiliar para calcular o parâmetro relacionado a temperatura utilizado para calcular a perda de matéria seca em relação ao tempo
u_a	Velocidade do ar de aeração ($m.s^{-1}$)
b	Vetor correspondente ao termo fonte

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	20
1.1	Motivação	22
1.2	Objetivos	22
1.2.1	Objetivo Geral	22
1.2.2	Objetivos Específicos	23
1.3	Conceitos Gerais e Revisão de Literatura	23
1.3.1	Armazenamento e Aeração de Grãos	23
1.3.2	Modelagem Matemática do Processo de Aeração e Resoluções Computacionais	25
1.3.3	Método das Soluções Fabricadas (MSF)	28
1.3.4	Viscosidade Artificial	29
1.4	Delineamento do Texto	29
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	31
2.1	Método das Diferenças Finitas (MDF)	31
2.2	Aproximações Numéricas	33
2.2.1	Esquema com Um Ponto a Montante (UDS)	33
2.2.2	Esquema com Diferença Central (CDS)	35
2.2.3	Esquema UDS com Correção Adiada (UDS-C)	36
2.2.4	Esquema de Roberts e Weiss (RWS)	37
2.2.5	Esquema de Leith (LS)	37
2.3	Solução do Sistema de Equações	38
2.4	Viscosidade Artificial	39
2.5	Crítérios de Verificação Numérica	40
2.5.1	Erros de Discretização e Ordem Assintótica	41
2.5.2	Ordem Efetiva	42
2.5.3	Esforço Computacional	42
3	MODELO MATEMÁTICO	44
3.1	Parâmetros do Modelo Matemático	45
3.1.1	Constantes	45
3.1.2	Constantes Dependentes do Tipo de Grão	45
3.1.3	Parâmetros com Soluções Analíticas Conhecidas	46
3.2	Condições Iniciais	48
3.3	Condições de Contorno	48
3.4	Método das Soluções Fabricadas (MSF)	49
3.4.1	Solução Analítica	49
3.4.2	Termo Fonte	52
4	MODELO NUMÉRICO	54
4.1	Esquema com Um Ponto a Montante (UDS)	54
4.1.1	UDS com Formulação Explícita (UDS - Explícito)	55

4.1.2	UDS com Formulação Implícita (UDS - Implícito)	56
4.1.3	UDS com Formulação Crank-Nicolson (UDS - Crank-Nicolson)	57
4.2	Esquema com Diferença Central (CDS)	58
4.2.1	CDS com Formulação Explícita (CDS - Explícito)	59
4.2.2	CDS com Formulação Implícita (CDS - Implícito)	59
4.2.3	CDS com Formulação Crank-Nicolson (CDS - Crank-Nicolson)	60
4.3	UDS com Correção Adiada (UDS-C)	61
4.3.1	UDS-C com Formulação Explícita (UDS-C - Explícito)	62
4.3.2	UDS-C com Formulação Implícita (UDS-C - Implícito)	62
4.3.3	UDS-C com Formulação Crank-Nicolson (UDS-C - Crank-Nicolson) . . .	63
4.4	Esquema de Roberts e Weiss (RWS)	64
4.5	Esquema de Leith (LS)	65
4.6	Viscosidade Artificial	66
4.7	Algoritmo Base para a Implementação Computacional	67
5	RESULTADOS	69
5.1	Verificação Numérica	69
5.2	Resultados Numéricos	73
5.2.1	Efeitos da Viscosidade Artificial	73
5.2.2	Esquema com Um Ponto a Montante (UDS)	76
5.2.3	Esquema com Diferença Central (CDS)	77
5.2.4	UDS com Correção Adiada (UDS-C)	79
5.2.5	Esquema de Roberts e Weiss (RWS)	80
5.2.6	Esquema de Leith (LS)	81
5.3	Comparativo Entre as Aproximações	81
6	CONCLUSÕES	85
6.1	Conclusões Gerais	85
6.2	Principais Contribuições	85
6.3	Proposta de Trabalhos Futuros	86
	REFERÊNCIAS	87

1 INTRODUÇÃO

Na atual economia altamente competitiva e baseada no conhecimento, a gestão de uma vasta quantidade de informações e recursos é o pré-requisito fundamental para o sucesso dos produtores agrícolas. Esta gestão foi facilitada pela contínua evolução e uso das Tecnologias de Informação e Comunicação (TICs). A aplicação das TICs em diferentes setores da economia global tornou-se essencial para o aumento da eficiência e produtividade do trabalho (FAN *et al.*, 2021; DONG *et al.*, 2021).

O setor agrícola, na economia global, é um dos que mais experimenta a aplicação das TICs em todas as esferas de suas operações (NYARKO; KOZÁRI, 2021). Daum (2020) observou que, nos últimos anos, as TICs tornaram-se uma das principais ferramentas utilizadas pelos agricultores para gerenciar os fatores essenciais de produção, tais como o armazenamento dos grãos.

Durante o armazenamento dos grãos, o controle da temperatura e do teor de água é crucial para preservar os aspectos econômico e de qualidade do produto (PANIGRAHI *et al.*, 2020a). Caso contrário, a produção de grãos pode ser consideravelmente prejudicada ou mesmo completamente perdida (BINELO *et al.*, 2019). De acordo com Antunes *et al.* (2016), atualmente a aeração é a técnica de controle mais difundida empregada na conservação dos grãos armazenados.

A aeração de grãos é uma técnica de gerenciamento que pode ser usada para controlar a temperatura e o teor de água do grão armazenado (PANIGRAHI *et al.*, 2020a). O processo consiste na passagem forçada de ar através da massa de grãos, promovendo a redução e a uniformização de sua temperatura, com o objetivo de conservar os grãos armazenados (ZIEGLER *et al.*, 2021).

Mesmo com a larga escala de produção agrícola e a utilização de técnicas para melhorar a qualidade da massa de grãos, os investimentos em tecnologia ainda são modestos, principalmente para os pequenos produtores. Segundo Ferrasa *et al.* (2010), tornar a tecnologia acessível a esses produtores, através de soluções de baixo custo, é estratégico para melhorar a produtividade. Neste sentido, são relevantes os estudos envolvendo modelos matemáticos e resoluções computacionais.

Modelos matemáticos têm sido utilizados para descrever fenômenos teóricos e observados. Além disso, eles modelam e possibilitam prever o resultado de várias aplicações, independentemente das condições preexistentes. O processo de desenvolvimento de um modelo matemático oferece vários benefícios para os produtores (PANIGRAHI *et al.*, 2020b). Os modelos podem ser utilizados eficientemente para testar diferentes abordagens, que no campo podem levar anos e custar uma quantidade significativa de tempo e dinheiro. Os resultados

mais promissores durante a simulação podem então ser testados no campo (NUTTALL *et al.*, 2017).

Diversos modelos matemáticos podem ser encontrados na literatura envolvendo o processo de aeração, entre eles, Thompson (1972), Muir *et al.* (1980), Alagusundaram *et al.* (1990), Chang *et al.* (1993, 1994), Jia *et al.* (2000), Thorpe (2001b), Liu *et al.* (2016) e Novoa-Muñoz (2019).

Segundo Panigrahi *et al.* (2020b), idealmente, métodos analíticos devem ser utilizados para resolver os modelos matemáticos, devido à acurácia da solução. No entanto, suas soluções, para a maioria dos problemas do mundo real, são difíceis de se obter devido à complexidade do problema. Sendo assim, métodos numéricos com condições de contorno realistas são amplamente utilizados para resolver o modelo representativo do ecossistema dos grãos armazenados.

Os métodos numéricos são utilizados para transformar modelos matemáticos em modelos numéricos aproximados. Este processo é chamado de discretização do problema original. Enquanto os termos originais das equações são continuamente avaliados no domínio, as aproximações numéricas são avaliadas apenas em pontos específicos do domínio (também chamados de nós). O conjunto formado por todos esses pontos é chamado de malha computacional e corresponde a uma aproximação discreta do domínio contínuo do problema original (OLIVEIRA, 2020). Entre os métodos numéricos tradicionalmente utilizados neste caso, encontra-se o Método das Diferenças Finitas (MDF) (FERZIGER; PERIC, 2002).

Neste trabalho utilizou-se o modelo matemático proposto por Thorpe (2001b), muito utilizado na literatura (LOPES *et al.*, 2006; RADTKE, 2009; LOPES *et al.*, 2014, 2015; RIGONI; KWIATKOWSKI JR, 2020), cuja solução analítica é desconhecida. Nesses trabalhos, o MDF com a discretização espacial com um ponto a montante (UDS) e a formulação temporal explícita foram utilizados.

Um dos objetivos deste trabalho é apresentar uma solução analítica para tal modelo, por meio do Método das Soluções Fabricadas (MSF). Para solucionar o modelo numericamente utilizou-se o MDF e, diferentemente dos artigos citados anteriormente, empregou-se as aproximações espaciais dadas pelos métodos de Leith (1965), Roberts e Weiss (1966), UDS, esquema com diferença central (CDS) e UDS com correção adiada (UDS-C), combinadas às formulações temporais explícita, implícita e Crank-Nicolson.

Como realizado em uma variedade de problemas, utilizou-se a técnica apresentada por Von Neumann e Richtmyer (1950), para tratar oscilações não-físicas nas aproximações de segunda ordem (CURRAN *et al.*, 1974; XUAN *et al.*, 2017; MOUSA; MA, 2020).

O presente estudo, além de propor uma solução analítica para o modelo matemático e utilizar aproximações diferentes das existentes na literatura, apresenta uma análise de erros para todas as aproximações utilizadas, com o intuito de verificar a ordem efetiva do erro de

discretização com o refino de malha. Além disso, comparou-se os tempos de Unidade Central de Processamento (CPU) e os resultados obtidos numericamente com a solução analítica em diferentes níveis de refinamento de malha, a fim de determinar quais aproximações apresentam melhor desempenho.

1.1 Motivação

Em geral, na descrição qualitativa de um fenômeno físico, como o processo de aeração da massa de grãos, os modelos matemáticos resultantes são expressos por Equações Diferenciais Parciais (EDPs). Com exceção de casos mais simples, as soluções analíticas não são conhecidas, ou são difíceis de serem determinadas. Thorpe (2001b) realizou um estudo detalhado e formulou um modelo matemático referente ao processo de aeração da massa de grãos, muito utilizado na literatura. Apesar da vasta utilização desse modelo, sua solução analítica é desconhecida, dessa forma, tal modelo é solucionado apenas numericamente.

O principal método de discretização descrito na literatura é o MDF com aproximação espacial do tipo UDS. Ainda não consta na literatura um estudo detalhado envolvendo outras aproximações espaciais na resolução numérica desse modelo matemático.

Quando um modelo matemático é solucionado numericamente, a verificação da acurácia da solução é um processo essencial na construção de qualquer novo modelo numérico, confirmando que não existem erros ou inconsistências na solução (ARAKI, 2007). A validação de um modelo proporciona o grau de fidelidade com que o modelo representa um fenômeno físico específico. O trabalho realizado por Thacker *et al.* (2004) descreve, em detalhes, a diferença entre a verificação e a validação de um modelo matemático e como ambos são de extrema importância.

Na literatura, existem vários trabalhos (LOPES *et al.*, 2006; RADTKE, 2009; KWIATKOWSKI JR, 2011; RIGONI; KWIATKOWSKI JR, 2020; RIGONI *et al.*, 2021) que tratam da validação do modelo proposto por Thorpe (2001b). Todavia, ainda não existe um estudo sobre a verificação da solução numérica desse modelo matemático.

1.2 Objetivos

Considerando as questões referentes ao modelo matemático proposto por Thorpe (2001b) destacadas e discutidas na seção anterior, os objetivos geral e específicos do presente trabalho são definidos nesta seção.

1.2.1 Objetivo Geral

O objetivo geral deste trabalho consiste em efetuar uma análise de erros (com foco no erro de discretização) do modelo matemático proposto por Thorpe (2001b) utilizando o

MSF e ainda, comparar o desempenho de diversas aproximações numéricas na resolução do problema.

1.2.2 Objetivos Específicos

Diretamente vinculados ao objetivo geral da dissertação, são definidos também os seguintes objetivos específicos:

- Utilizar o MSF para propor uma solução analítica para o modelo proposto por Thorpe (2001b).
- Solucionar o modelo numericamente por meio do MDF, utilizando outras aproximações além das já utilizadas na literatura.
- Implementar a viscosidade artificial para amenizar as oscilações não-físicas nas soluções numéricas.
- Efetuar uma verificação numérica para as diversas aproximações estudadas.
- Analisar o tempo de CPU de cada aproximação utilizada.

1.3 Conceitos Gerais e Revisão de Literatura

Nesta seção, é apresentada uma revisão bibliográfica com o objetivo de fundamentar e situar o presente trabalho na literatura do problema. Aqui é discutido o armazenamento e o processo de aeração da massa de grãos; é apresentada uma revisão bibliográfica referente aos modelos matemáticos e resoluções computacionais na simulação do processo de aeração; é apresentada uma revisão sobre o MSF e, finalmente, é feita uma revisão de trabalhos que utilizaram a viscosidade artificial para tratar oscilações não-físicas nas soluções numéricas em uma variedade de problemas.

1.3.1 Armazenamento e Aeração de Grãos

Desde os primeiros tempos da história da humanidade, a produção de mantimentos é um fator determinante no desenvolvimento de qualquer sociedade. A produção, o transporte, o beneficiamento, o armazenamento, a comercialização e o consumo de alimentos constituem uma cadeia de atividades vitais às pessoas, às famílias e às nações, motivo pelo qual a armazenagem agrícola é uma atividade das mais antigas e importantes (WEBER, 2005). O armazenamento dos grãos, efetuado na grande maioria dos casos em silos, é uma das etapas mais relevantes da logística, pois colabora com a redução de custos e de tempo, atendendo com flexibilidade e velocidade às exigências da demanda do mercado (AZEVEDO *et al.*, 2008).

A modificação das condições do ambiente de armazenamento pode produzir diferentes efeitos, dependendo das características do ar de aeração e das características dos grãos armazenados. Estes efeitos são entendidos com mais facilidade quando o ambiente de armazenamento é considerado como um ecossistema com fatores bióticos e abióticos (LOPES *et al.*, 2006). O principal fator biótico deste ecossistema é o grão, pois todas as ações envolvidas no gerenciamento de um sistema de armazenamento são executadas visando a sua preservação (FLEURAT-LESSARD, 2002).

O grão é considerado um organismo vivo com atividade fisiológica reduzida, podendo permanecer assim por longos períodos. Este baixo nível de atividade biológica dos grãos se deve aos baixos teores de água necessários para se obter uma armazenagem segura. Altos valores de umidade no ambiente de armazenamento, combinados a valores inadequados, podem causar a germinação dos grãos, resultando em perda do seu valor nutritivo e impedindo o armazenamento seguro (NAVARRO; NOYES, 2001). Dito isso, é de fundamental importância que durante o armazenamento se tenha um controle da temperatura e do teor de água da massa de grãos.

Dentre as opções de controle das condições de armazenagem que não incluem produtos químicos e que podem se adaptar às regiões tropicais e pequenas propriedades rurais, a aeração é a tecnologia mais difundida. Na aeração, o ar ambiente, ou condicionado, é forçado a circular através da massa de grãos armazenados com a finalidade principal de estabelecer e manter a homogeneidade de temperatura dentro do ambiente de armazenamento e, caso seja possível, resfriar o produto armazenado (HARA; CORRÊA, 1981).

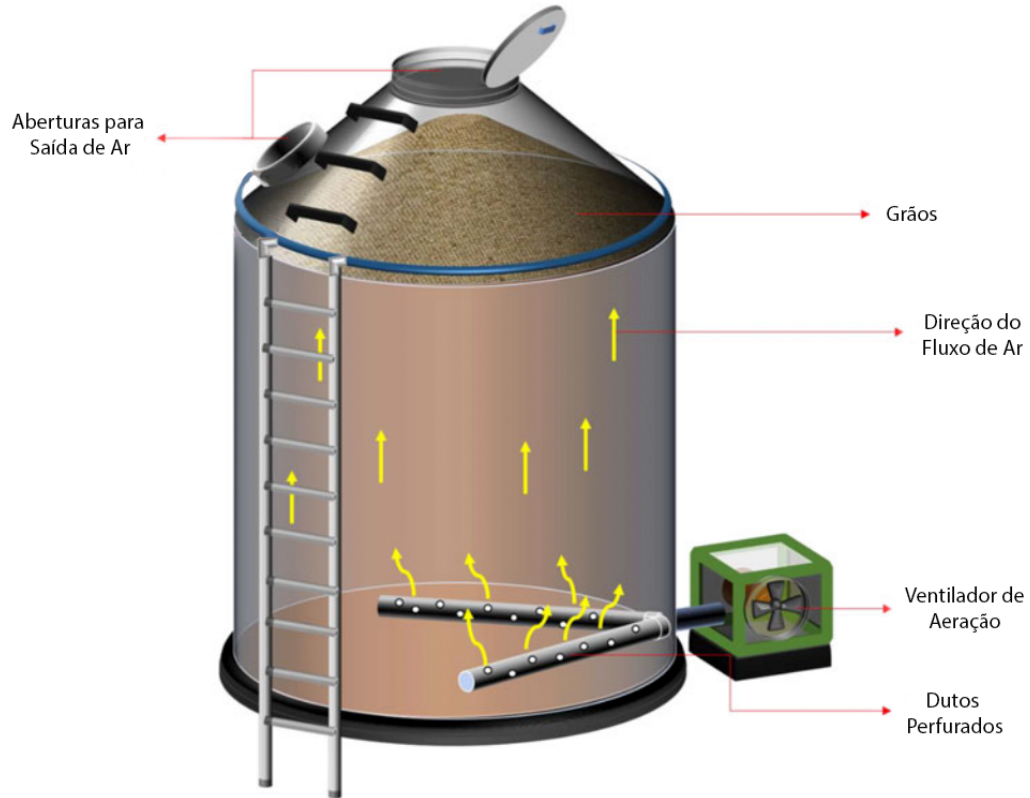
Uma das limitações da aeração é o fato desta tecnologia não eliminar imediatamente os insetos e microorganismos prejudiciais ao ambiente de armazenamento, mas sim impedir a sua proliferação. Entretanto, sua principal vantagem é a possibilidade de não utilizar produtos químicos. Além disso, esta tecnologia é mais simples, segura e econômica no controle do ambiente de armazenamento quando comparada à remoção física de insetos, à utilização de atmosfera controlada ou à utilização de irradiação, dentre outras (NAVARRO; NOYES, 2001).

Como mencionado anteriormente, a técnica de controle mais difundida empregada na conservação dos grãos armazenados é a aeração. O processo de aeração de grãos consiste em ventilar a massa de grãos armazenada com um fluxo de ar pré-determinado (FIGURA 1), promovendo o resfriamento e o equilíbrio do grão, criando condições favoráveis para o produto ser armazenado com qualidade por um longo período, favorecendo a questão logística (KHATCHATOURIAN *et al.*, 2013).

Bilobrovec (2005) expõe que os elementos que compõem um sistema de aeração visam, principalmente, a distribuição uniforme da movimentação do ar através da massa de grãos, de tal forma que todas as camadas de produto sejam aeradas de forma homogênea. Os principais componentes de um sistema de aeração são: dutos perfurados para conduzir e distribuir o ar através da massa de grãos; tubos de conexão que ligam os ventiladores aos dutos

perfurados e o conjunto ventilador-motor para insuflação ou sucção do ar. A FIGURA 1 ilustra os componentes de um sistema de aeração e como são distribuídos no local de armazenamento da massa de grãos.

FIGURA 1 – COMPONENTES DE UM SISTEMA DE AERAÇÃO.



FONTE: Modificado de Panigrahi *et al.* (2020b).

1.3.2 Modelagem Matemática do Processo de Aeração e Resoluções Computacionais

A modelagem do fenômeno de transferência de calor e massa no domínio de grãos armazenados é datada desde a década de 1970 (PANIGRAHI *et al.*, 2020b).

Thompson (1972) desenvolveu um modelo para prever as mudanças na temperatura e umidade durante o processo de aeração em grãos de milho. O modelo foi construído a partir de modificações feitas em um modelo, Thompson *et al.* (1968), desenvolvido para simular o processo de secagem. As transferências de calor e massa dentro dos grãos foram assumidas como adiabáticas (não há troca de calor com o meio externo), o que facilitou a formulação das respectivas equações de equilíbrio. A simulação foi realizada assumindo uma série de finas camadas de grãos posicionadas perpendicularmente ao fluxo de ar dentro do silo de armazenamento.

Muir *et al.* (1980) desenvolveram um modelo para simular a transferência de calor através do fenômeno de condução na direção vertical e radial em uma caixa cilíndrica e utilizaram o MDF para solucionar numericamente o modelo matemático. A temperatura inicial do grão, a temperatura ambiente diária e as velocidades do ar foram usadas como

parâmetros de entrada para prever a mudança de temperatura em toda a massa de grãos. No entanto, a geração de calor interno devido à respiração dos grãos foi negligenciada durante a formulação do modelo. A validação do modelo mostrou um erro padrão de estimativa de 1,3 °C e 1,8 °C, respectivamente, para armazenamento de colza e cevada em dois silos separados.

Alagusundaram *et al.* (1990) desenvolveram um modelo para prever a distribuição de temperatura devido ao fenômeno de condução dentro de um recipiente contendo colza e utilizaram o MDF para solucionar numericamente o modelo matemático. A equação de equilíbrio para calcular a transferência de calor transiente dentro de cada elemento espacial foi definida igualando a taxa de fluxo total de calor para o elemento e a taxa de mudança ocorrida na acumulação de calor dentro do elemento. Para fins de validação, os dados experimentais foram retirados de um silo de 5,56 m de diâmetro cheio até 2,7 m de altura. Dados de temperatura em quatro níveis do silo foram coletados e o modelo previu as temperaturas com um erro padrão médio de estimativa de 2,8 °C.

Chang *et al.* (1993, 1994) usaram o MDF para solucionar um modelo matemático que descreve a temperatura e o teor de água, particularmente durante os períodos de aeração. Uma equação transiente de transferência de calor e massa com condições iniciais e de contorno relacionadas foi escrita sobre um número finito de elementos espaciais. Modelos auxiliares para prever o efeito da radiação solar e coeficiente de transferência de calor por convecção na parede do silo e perfil de temperatura do solo sob o silo foram incluídos para fornecer um fenômeno de realismo aproximado durante a simulação. Além disso, juntamente com os dados climáticos ambientais, incluindo temperatura e umidade relativa do ar, radiação e velocidade do vento, a taxa de fluxo de ar também foi usada como entrada para simular a temperatura e o teor de água durante 15 e 32 meses de armazenamento de grãos de trigo. Isso foi validado com erro padrão de 1,1 °C da estimativa.

Jia *et al.* (2000) apresentaram um modelo para simular as flutuações de temperatura através do modo de convecção de transferência de calor devido à geração interna de calor. Uma equação em sistema de coordenadas cilíndricas foi proposta considerando a transferência de calor entre a superfície superior do grão e o teto do silo e nas paredes do silo devido ao fluxo de calor gerado. No entanto, a superfície inferior foi assumida adiabática. O Método dos Elementos Finitos (MEF) foi utilizado para resolver a equação com condições de contorno complexas. O estudo sugeriu que havia uma alta probabilidade de deterioração do grão próximo à fonte de calor interna e era independente da posição devido à baixa condutividade térmica do trigo. A temperatura medida estava em boa concordância com as previstas durante a fase inicial das validações.

Um modelo de equilíbrio, governado por EDPs e baseado nas equações de balanço de massa e energia, foi formulado por Thorpe (1997) e apresentado de forma detalhada por Thorpe (2001b). Lopes *et al.* (2006) validaram o modelo utilizando dados experimentais da aeração de grãos de milho. Os autores relataram algumas mudanças nas equações originais do

modelo matemático para simplificar e diminuir seu tempo computacional, sem diminuir sua precisão. Neste trabalho, o MDF com a aproximação espacial UDS e a formulação temporal explícita foi utilizado para resolver numericamente o modelo. Os resultados corroboraram com os dados experimentais registrados. A máxima diferença observada entre as temperaturas experimentais e numéricas foi de 3,2 °C.

Radtke (2009) e Kwiatkowski Jr (2011) solucionaram numericamente o modelo proposto por Thorpe utilizando o MDF. Radtke (2009) utilizou a aproximação espacial UDS com a formulação temporal explícita e o autor relatou que o modelo apresentou resultados satisfatórios quando comparado a dados experimentais. Kwiatkowski Jr (2011) utilizou a aproximação espacial UDS e realizou uma comparação entre as aproximações temporais explícita e implícita, o autor relatou que ao comparar dados experimentais com as simulações numéricas, o resultado foi satisfatório tendo uma pequena vantagem para a aproximação temporal implícita, pois deste modo a solução numérica é sempre convergente.

Lopes *et al.* (2015) compararam os modelos propostos por Thorpe (2001b) e Thompson (1972) com dados experimentais. Novamente, o modelo proposto por Thorpe foi resolvido numericamente pelo MDF utilizando a aproximação espacial UDS e a formulação temporal explícita. Os resultados mostraram que ambos os modelos tiveram boas correlações com os dados experimentais e apresentaram um desempenho muito semelhante. Os autores comentam que os dois modelos avaliados podem ser facilmente implementados em programas de computador, contribuindo para melhorias no controle desse processo e garantindo o gerenciamento da qualidade dos grãos durante o período de armazenamento.

Todos os estudos citados anteriormente que utilizaram o modelo proposto por Thorpe (2001b) adotaram as simplificações propostas pelo trabalho de Lopes *et al.* (2006).

Liu *et al.* (2016) desenvolveram um modelo integrado para simular o armazenamento de grãos em grande escala (arroz em casca) usando ar frio durante a aeração. Um algoritmo de método semi-implícito para equações ligadas à pressão foi usado para resolver as equações governantes que representam as transferências de calor, massa e quantidade de movimento. Um termo fonte foi adicionado à equação do momento para contabilizar a respectiva dissipação resultante da resistência ao fluxo de ar. As propriedades termofísicas do ar forçado foram estimadas pelo método proposto por Ranjbaran e Emadi (2015). Os resultados simulados mostraram uma diferença substancial nos dados de temperatura previstos e medidos. No entanto, houve uma ligeira diminuição no teor de água do grão de arroz ao longo da direção vertical, pois a operação foi limitada a 30 horas de aeração.

Novoa-Muñoz (2019) utilizou um silo cilíndrico de concreto de 6,3 m de diâmetro e 23,5 m de altura para fins de simulação. O modelo foi solucionado numericamente pelo MDF e foi desenvolvido (considerando coordenadas cilíndricas) assumindo condução de calor constante na direção circunferencial de um silo para armazenagem de cevada. Além disso, o fluxo de calor em torno do eixo central vertical foi considerado simétrico, sem calor interno

da respiração dentro do silo. Os valores de temperatura medidos foram incorporados como condições iniciais para a simulação manter o fluxo de calor através do grão armazenado como variável em relação ao tempo. A transferência de calor afetada pelo ar de aeração também foi incluída na forma de coeficientes de transferência de calor por convecção forçada na condição de contorno. Os resultados da simulação mostraram baixo erro padrão de estimativa em relação às temperaturas médias. Isso foi obtido por meio de validação usando um gráfico de dispersão entre o valor medido e o predito. Assim, delineando um valor predito mais próximo com a leitura do termopar ao longo do eixo central do silo. No entanto, foi encontrado um erro de temperatura de 6,6% próximo ao piso e em torno de 12% próximo ao telhado.

1.3.3 Método das Soluções Fabricadas (MSF)

O MSF foi definido por Oberkampf e Blottner (1998), mas a primeira proposta de uso do MSF para verificação do código foi apresentada por Steinberg e Roache (1985).

Segundo Roy e Sinclair (2009), devido à existência de soluções exatas se limitar somente para as equações mais simples, a principal dificuldade em estimar o erro de discretização é encontrar uma maneira de estimar a solução exata para EDPs e assim obter maior confiabilidade em sua análise.

A ideia do MSF se baseia em produzir uma solução exata sem estar interessado na realidade física do problema (ROY, 2005). Uma função analítica é definida e inserida no lugar da variável dependente na EDP, e todas as derivadas são calculadas analiticamente. A equação é criada de tal maneira que todos os termos restantes que não satisfazem a EDP são incorporados em um termo fonte. Este termo é, então, simplesmente acrescentado à EDP de forma a satisfazer exatamente à nova EDP (SALARI; KNUPP, 2000).

O código a ser verificado é modificado para suportar o termo fonte adicional e pode ser verificado comparando o resultado da simulação do problema fabricado com a solução analítica fabricada. Idealmente, o termo fonte é computado analiticamente; entretanto, quando isto não for possível, o termo fonte precisa ser computado de forma consistente e com no mínimo mesma precisão que os métodos numéricos que estão sendo verificados. Caso contrário, o erro no termo fonte irá ofuscar o do método numérico contaminando a verificação (FRENO *et al.*, 2021c).

As verificações de códigos têm sido realizadas em diversas áreas, incluindo dinâmica de fluidos (ROY *et al.*, 2004; BOND *et al.*, 2007; VELURI *et al.*, 2010; OLIVER *et al.*, 2012; EÇA *et al.*, 2016; FRENO *et al.*, 2021b), mecânica dos sólidos (CHAMBERLAND *et al.*, 2010), interação fluido-estrutura (ÉTIENNE *et al.*, 2012), transferência de calor na interação fluido-sólido (VEERARAGAVAN *et al.*, 2016), fluxos multifásicos (BRADY *et al.*, 2012), hidrodinâmica de radiação (MCCLARREN; LOWRIE, 2008), eletrodinâmica (ELLIS; HALL, 2009) e ablação (AMAR *et al.*, 2008, 2009, 2011; FRENO *et al.*, 2021a). Entretanto, a literatura existente contém poucas instâncias do MSF sendo utilizadas na verificação de códigos para

problemas relacionados à aeração da massa de grãos.

1.3.4 Viscosidade Artificial

Originalmente proposta por Von Neumann e Richtmyer (1950), a viscosidade artificial consiste em um método que controla as oscilações espúrias não-físicas nas soluções numéricas.

Curran *et al.* (1974) detalharam um novo e simples método numérico para calcular a propagação de ondas unidimensionais de grande amplitude em materiais compostos. O método trabalha com valores de tensão, velocidade de partícula e deslocamento. A principal vantagem do método em relação às abordagens macroscópicas anteriores é que ele utiliza a viscosidade artificial para modelar as dispersões geométricas e dissipativas do material composto.

Xuan *et al.* (2017) apresentaram um esquema melhorado do modelo de Lattice Boltzmann para as equações de Navier-Stokes compressíveis com número de Mach (razão entre a velocidade do objeto em um meio fluido e a velocidade da onda sonora nesse meio) elevado. Foi implementado ao modelo original a viscosidade artificial, resultando na redução das oscilações numéricas e ajudando a satisfazer a condição de estabilidade de Von Neumann.

Mousa e Ma (2020) desenvolveram dois esquemas numéricos para superar o problema de oscilações não-físicas que aparecem nas soluções dos modelos de uma/duas camadas de água rasa. Os esquemas numéricos propostos foram baseados no conceito da viscosidade artificial. A robustez e eficiência dos esquemas propostos são validados em muitas aplicações, como o problema de ruptura de represas e o problema de propagação de interface do modelo de água rasa de duas camadas.

Esta revisão bibliográfica embasa e justifica os objetivos desta dissertação e motiva, principalmente, a efetuar uma verificação numérica do modelo proposto por Thorpe (2001b) e a utilização de aproximações numéricas além das existentes na literatura para solucionar numericamente o modelo.

1.4 Delineamento do Texto

Apresenta-se nessa seção a maneira como o restante do trabalho é dividido. O capítulo 2 apresenta fundamentos teóricos a respeito de métodos de discretização, solução de sistemas lineares, viscosidade artificial, entre outras; dando ênfase aos métodos e técnicas utilizados na dissertação. O capítulo é finalizado com a apresentação dos critérios utilizados para verificação dos erros numéricos e também para o cálculo do esforço computacional de um modelo numérico.

O modelo matemático utilizado é apresentado no capítulo 3, juntamente com as condições de contorno, condições iniciais e os parâmetros envolvidos. Também é apresentado o MSF com a solução analítica proposta e o termo fonte.

No capítulo 4 são apresentados os modelos numéricos para cada aproximação espaço-temporal utilizada.

No capítulo 5, as ordens efetivas e os erros de discretização para cada aproximação utilizada são apresentadas e discutidas. Também são apresentados e discutidos os resultados referentes aos modelos numéricos desenvolvidos quando comparados à solução analítica proposta. Os resultados também referem-se ao desempenho computacional de cada aproximação utilizada.

Finalmente, no capítulo 6, são apresentadas as conclusões referentes a esta dissertação. São discutidas suas principais contribuições e também os pontos positivos com base nos objetivos propostos. O capítulo é finalizado com sugestões para trabalhos futuros.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

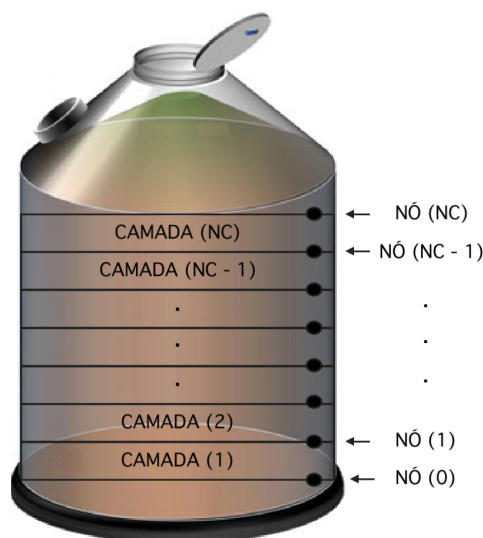
Neste capítulo será descrito o referencial teórico usado nesta dissertação. Apresenta-se o MDF e as aproximações usadas para discretizar as equações diferenciais, métodos de resolução de sistemas lineares, viscosidade artificial e os critérios de verificação numérica.

2.1 Método das Diferenças Finitas (MDF)

Um modelo matemático, associado a um determinado fenômeno físico, compreende as equações que governam tal fenômeno, o domínio matemático (correspondente ao domínio físico) sobre o qual elas estão definidas e as condições de contorno a elas impostas. O modelo matemático é também chamado de modelo contínuo (OLIVEIRA, 2020).

Para a resolução computacional do problema, o modelo matemático contínuo é transformado em um modelo discreto, através do qual o domínio contínuo inicial passa a ser representado por um número finito de pontos que dão origem a uma malha, chamada de malha computacional ou discreta, conforme exemplificado na FIGURA 2. As equações deixam de ser avaliadas continuamente e passam a ser avaliadas somente em tais pontos, também chamados de nós. As derivadas contidas nas equações são calculadas, em um dado ponto da malha, por meio de aproximações que utilizam pontos vizinhos ao ponto em questão. Para o MDF, tais aproximações são geralmente obtidas de expressões truncadas da série de Taylor. Esse processo é chamado de discretização do modelo matemático, e através dele o modelo contínuo inicial é transformado no chamado modelo discreto aproximado (OLIVEIRA, 2020).

FIGURA 2 – DOMÍNIO DISCRETO DE UM SISTEMA QUE REPRESENTA O ARMAZENAMENTO DE UMA MASSA DE GRÃOS.



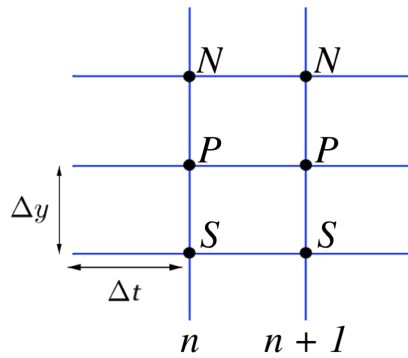
FONTE: Modificado de Panigrahi *et al.* (2020b).

No presente trabalho, o MDF é utilizado para a discretização das equações. O MDF é um método clássico e que, apesar da base matemática não ser nova, pode apresentar diferentes formulações de aproximação numérica (FERZIGER; PERIC, 2002).

Após o processo de discretização de uma dada equação pelo MDF, a avaliação das variáveis e das aproximações de suas derivadas nos nós da malha dão origem a um sistema de equações, o qual deve ser então solucionado por algum método apropriado para resolução de sistemas, comumente chamado de *solver*.

Utilizou-se os pontos cardeais *S* (sul) e *N* (norte) como identificadores da posição de pontos discretos em relação a um nó central *P*, e *n* simboliza a localização temporal do nó, como indicado na FIGURA 3.

FIGURA 3 – MALHA PARA A SOLUÇÃO NUMÉRICA POR MEIO DO MDF, DE NÓ CENTRAL *P*, E SEUS VIZINHOS, EM DOIS PASSOS DE TEMPOS DISTINTOS.



FONTE: O autor (2022).

Aqui, Δy corresponde ao espaçamento espacial entre dois nós consecutivos, definido por,

$$\Delta y = \frac{L}{N_y - 1}, \quad (2.1)$$

onde L representa a altura do local de armazenamento da massa de grãos (m) e N_y é o número de nós na direção y . A diferença entre o tempo atual de simulação e o tempo anterior é definido por,

$$\Delta t = \frac{t_f}{N_t}, \quad (2.2)$$

onde t_f é o tempo final de simulação e N_t corresponde ao número de passos no tempo.

É desejável que o modelo discreto convirja para o modelo contínuo, quando Δy e Δt se aproximam de zero (TANNEHILL *et al.*, 1982).

2.2 Aproximações Numéricas

Para ilustrar a discretização de uma EDP pelo MDF, considerou-se, por exemplo, a equação que expressa a advecção de uma determinada variável Λ , em regime transiente, dada por

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial t} + \frac{\partial \Lambda}{\partial y} = 0. \quad (2.3)$$

No MDF, a aproximação dos termos envolvendo derivadas de Λ é feita usando expansões de série de Taylor, dada por (KREYSZIG, 2009)

$$\Lambda_y = \Lambda_P + \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right)_P \frac{(y - y_P)}{1!} + \left(\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial y^2} \right)_P \frac{(y - y_P)^2}{2!} + \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial y^3} \right)_P \frac{(y - y_P)^3}{3!} + \dots \quad (2.4)$$

O valor de Λ_y é exato se forem considerados os infinitos termos da série de Taylor. Nas próximas subseções, serão apresentadas como são realizadas as aproximações numéricas das derivadas espacial e temporal da Eq. (2.3) pelos métodos utilizados neste trabalho.

2.2.1 Esquema com Um Ponto a Montante (UDS)

A Eq. (2.4) aplicada ao nó S , a partir do ponto P da FIGURA 3, resulta em

$$\Lambda_S = \Lambda_P - \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right)_P \Delta y + \left(\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial y^2} \right)_P \frac{(\Delta y)^2}{2} - \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial y^3} \right)_P \frac{(\Delta y)^3}{6} + \dots \quad (2.5)$$

Isolando a derivada de primeira ordem da Eq. (2.5), tem-se

$$\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right)_P = \frac{\Lambda_P - \Lambda_S}{\Delta y} + \left(\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial y^2} \right)_P \frac{\Delta y}{2} - \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial y^3} \right)_P \frac{(\Delta y)^2}{6} + \dots \quad (2.6)$$

Assim, apresenta-se a aproximação UDS da derivada espacial:

$$\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right)_P \approx \frac{\Lambda_P - \Lambda_S}{\Delta y}. \quad (2.7)$$

A série de Taylor também pode ser expandida, em torno do instante de tempo n e do nó P , ao longo do tempo (VARGAS, 2013).

$$\Lambda_P^n = \Lambda_P^{n+1} - \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial t} \right)_P^{n+1} \Delta t + \left(\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial t^2} \right)_P^{n+1} \frac{(\Delta t)^2}{2} - \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial t^3} \right)_P^{n+1} \frac{(\Delta t)^3}{6} + \dots, \quad (2.8)$$

onde $n + 1$ representa o instante de tempo atual.

Assim, a partir da Eq. (2.8), obtém-se

$$\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial t}\right)_P^{n+1} = \frac{\Lambda_P^{n+1} - \Lambda_P^n}{\Delta t} + \left(\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial t^2}\right)_P^{n+1} \frac{\Delta t}{2} - \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial t^3}\right)_P^{n+1} \frac{(\Delta t)^2}{6} + \dots, \quad (2.9)$$

portanto, a aproximação da derivada temporal de Λ é dada por

$$\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial t}\right)_P^{n+1} \approx \frac{\Lambda_P^{n+1} - \Lambda_P^n}{\Delta t}. \quad (2.10)$$

Com a substituição das Eqs. (2.7) e (2.10) na Eq. (2.3), chega-se a discretização da Eq. (2.3), utilizando UDS:

$$\frac{\Lambda_P^{n+1} - \Lambda_P^n}{\Delta t} + \frac{\Lambda_P^\theta - \Lambda_S^\theta}{\Delta y} + \xi_{\text{UDS}} = 0, \quad (2.11)$$

onde θ indica um instante de tempo genérico na qual a derivada espacial é avaliada e o erro de truncamento (ξ_{UDS}) é dado por

$$\xi_{\text{UDS}} = \left(\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial y^2}\right)_P \frac{\Delta y}{2} - \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial y^3}\right)_P \frac{(\Delta y)^2}{6} + \dots + \left(\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial t^2}\right)_P \frac{\Delta t}{2} - \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial t^3}\right)_P \frac{(\Delta t)^2}{6} + \dots \quad (2.12)$$

A relação entre θ e Λ é dada por

$$\Lambda^\theta = \Lambda^n + \theta(\Lambda^{n+1} - \Lambda^n). \quad (2.13)$$

Em função do valor de θ , a TABELA 1 mostra as possíveis formulações temporais (TANNEHILL *et al.*, 1982):

TABELA 1 – FORMULAÇÕES TEMPORAIS DE ACORDO COM O VALOR DE θ .

Formulação Temporal	Valor de θ
Explícita	0
Implícita	1
Crank-Nicolson	0,5

FONTE: Tannehill *et al.* (1982)

Nota-se que essa notação não é rigorosa, podendo causar confusão, mas é amplamente utilizada na literatura devido a sua simplicidade (TANNEHILL *et al.*, 1982).

A formulação explícita recebe este nome devido ao valor da variável de interesse (Λ) em cada nó P da malha, no instante atual, ser calculado por valores conhecidos do instante

de tempo anterior. Com esta formulação, tem-se a vantagem de que a solução do sistema de equações algébricas é direta. A desvantagem é que existe um limite que deve ser satisfeito para o avanço no tempo não divergir. Para o exemplo dado pela Eq. (2.11), a condição de estabilidade é dada por

$$\frac{\Delta t}{\Delta y} \leq \frac{1}{2}. \quad (2.14)$$

Nas formulações implícita e Crank-Nicolson, devido à diagonal dominância, a solução é incondicionalmente estável no tempo, ou seja, não há limite como na formulação explícita. No entanto, o sistema de equações precisa ser resolvido com um *solver*. Além disso, tal *solver* tem que ser empregado a cada avanço no tempo.

2.2.2 Esquema com Diferença Central (CDS)

A Eq. (2.4) aplicada ao nó N , a partir do ponto P da FIGURA 3, resulta em

$$\Lambda_N = \Lambda_P + \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right)_P \Delta y + \left(\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial y^2} \right)_P \frac{(\Delta y)^2}{2} + \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial y^3} \right)_P \frac{(\Delta y)^3}{6} + \dots \quad (2.15)$$

Subtraindo a Eq. (2.5) da Eq. (2.15), tem-se

$$\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right)_P = \frac{\Lambda_N - \Lambda_S}{2\Delta y} - \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial y^3} \right)_P \frac{(\Delta y)^2}{6} - \left(\frac{\partial^5 \Lambda}{\partial y^5} \right)_P \frac{(\Delta y)^4}{120} + \dots \quad (2.16)$$

Assim, apresenta-se a aproximação CDS da derivada espacial:

$$\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right)_P \approx \frac{\Lambda_N - \Lambda_S}{2\Delta y}. \quad (2.17)$$

Com a substituição das Eqs. (2.17) e (2.10) na Eq. (2.3), chega-se a discretização da Eq. (2.3), utilizando CDS:

$$\frac{\Lambda_P^{n+1} - \Lambda_P^n}{\Delta t} + \frac{\Lambda_N^\theta - \Lambda_S^\theta}{2\Delta y} + \xi_{\text{CDS}} = 0, \quad (2.18)$$

cujo erro de truncamento (ξ_{CDS}) é dado por

$$\xi_{\text{CDS}} = - \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial y^3} \right)_P \frac{(\Delta y)^2}{6} - \left(\frac{\partial^5 \Lambda}{\partial y^5} \right)_P \frac{(\Delta y)^4}{120} + \dots + \left(\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial t^2} \right)_P \frac{\Delta t}{2} - \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial t^3} \right)_P \frac{(\Delta t)^2}{6} + \dots \quad (2.19)$$

2.2.3 Esquema UDS com Correção Adiada (UDS-C)

Uma outra técnica de aproximação consiste em misturar as aproximações UDS e CDS, assim tem-se UDS com correção adiada, conforme expressão

$$\Lambda_P = \Lambda_{P,UDS} + \beta(\Lambda_{P,CDS}^* - \Lambda_{P,UDS}^*), \quad (2.20)$$

onde * representa os valores conhecidos da iteração anterior, e são aplicados conforme o esquema dado por

$$\beta = \begin{cases} 0, & \text{UDS} \\ 1, & \text{CDS} \\ 0 \leq \beta \leq 1 & \text{Mistura} \end{cases}, \quad (2.21)$$

em que β é o fator de mistura entre os esquemas.

Substituindo as Eqs. (2.7) e (2.17) conforme o esquema da Eq. (2.20), tem-se

$$\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial y}\right)_P = \frac{\Lambda_P - \Lambda_S}{\Delta y} + \beta \left(\frac{\Lambda_S^* - 2\Lambda_P^* + \Lambda_N^*}{2\Delta y} \right) + (1-\beta) \left(\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial y^2} \right)_P \frac{\Delta y}{2} - \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial y^3} \right)_P \frac{(\Delta y)^2}{6} + \dots \quad (2.22)$$

Assim, apresenta-se a aproximação UDS-C da derivada espacial:

$$\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial y}\right)_P \approx \frac{\Lambda_P - \Lambda_S}{\Delta y} + \beta \left(\frac{\Lambda_S^* - 2\Lambda_P^* + \Lambda_N^*}{2\Delta y} \right). \quad (2.23)$$

Com a substituição das Eqs. (2.23) e (2.10) na Eq. (2.3), chega-se a discretização da Eq. (2.3), utilizando UDS-C:

$$\frac{\Lambda_P^{n+1} - \Lambda_P^n}{\Delta t} + \frac{\Lambda_P^\theta - \Lambda_S^\theta}{\Delta y} + \beta \left(\frac{\Lambda_S^* - 2\Lambda_P^* + \Lambda_N^*}{2\Delta y} \right) + \xi_{UDS-C} = 0, \quad (2.24)$$

cujo erro de truncamento (ξ_{UDS-C}) é da forma

$$\begin{aligned} \xi_{UDS-C} = & (1-\beta) \left(\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial y^2} \right)_P \frac{\Delta y}{2} - \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial y^3} \right)_P \frac{(\Delta y)^2}{6} + (1-\beta) \left(\frac{\partial^4 \Lambda}{\partial y^4} \right)_P \frac{(\Delta y)^3}{24} + \dots + \\ & + \left(\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial t^2} \right)_P \frac{\Delta t}{2} - \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial t^3} \right)_P \frac{(\Delta t)^2}{6} + \dots \quad (2.25) \end{aligned}$$

2.2.4 Esquema de Roberts e Weiss (RWS)

De acordo com Dehghan (2005) e Campbell e Yin (2007) o esquema proposto por Roberts e Weiss (1966) (RWS) consiste em aproximar a derivada espacial de uma variável Λ da seguinte forma:

$$\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right)_P^{n+1} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_P^{n+1} - \Lambda_S^{n+1}}{\Delta y} + \frac{\Lambda_N^n - \Lambda_P^n}{\Delta y} \right). \quad (2.26)$$

Com a substituição das Eqs. (2.26) e (2.10) na Eq. (2.3), chega-se a discretização da Eq. (2.3), utilizando o RWS:

$$\frac{\Lambda_P^{n+1} - \Lambda_P^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda_P^{n+1} - \Lambda_S^{n+1}}{\Delta y} + \frac{\Lambda_N^n - \Lambda_P^n}{\Delta y} \right) + \xi_{\text{RWS}} = 0, \quad (2.27)$$

cujo erro de truncamento (ξ_{RWS}) é dado por

$$\begin{aligned} \xi_{\text{RWS}} = & \frac{(\Delta y)^2}{12} \left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \left(2 + \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial y^3} \right)_P + \\ & + \frac{(\Delta y)^4}{240} \left(1 + \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \left(2 + \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \left(1 + 6 \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) + 3 \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 \right) \left(\frac{\partial^5 \Lambda}{\partial y^5} \right)_P + \dots \end{aligned} \quad (2.28)$$

2.2.5 Esquema de Leith (LS)

O esquema proposto por Leith (1965) (LS) consiste em aproximar a derivada espacial da Eq. (2.3) da seguinte forma (DEHGHAN, 2005):

$$\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right)_P^{n+1} \approx \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \left(\frac{\Lambda_P^n - \Lambda_S^n}{\Delta y} \right) + \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \left(\frac{\Lambda_N^n - \Lambda_S^n}{2\Delta y} \right). \quad (2.29)$$

Com a substituição das Eqs. (2.29) e (2.10) na Eq. (2.3), chega-se a discretização da Eq. (2.3), utilizando o LS:

$$\frac{\Lambda_P^{n+1} - \Lambda_P^n}{\Delta t} + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(\frac{\Lambda_P^n - \Lambda_S^n}{\Delta y} \right) + \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \left(\frac{\Lambda_N^n - \Lambda_S^n}{2\Delta y} \right) + \xi_{\text{LS}} = 0, \quad (2.30)$$

cujo erro de truncamento (ξ_{LS}) é dado por

$$\xi_{\text{LS}} = \frac{(\Delta y)^2}{6} \left[1 - \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 \right] \left(\frac{\partial^3 \Lambda}{\partial y^3} \right)_P + \frac{(\Delta y)^3}{8} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \left[1 - \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 \right] \left(\frac{\partial^4 \Lambda}{\partial y^4} \right)_P + \dots \quad (2.31)$$

2.3 Solução do Sistema de Equações

Após o processo de discretização, a avaliação das variáveis dependentes das equações em cada ponto interno (ou nó) da malha computacional, se dá em função de seus pontos vizinhos. Esse processo dá origem a um sistema de equações.

É comum escrever a equação discretizada da seguinte forma:

$$a_P \Lambda_P = a_N \Lambda_N + a_S \Lambda_S + b_P, \quad (2.32)$$

onde, a_P , a_N e a_S são coeficientes associados a, respectivamente, Λ_P , Λ_N e Λ_S . b_P corresponde ao termo fonte. Dessa forma, métodos eficientes para resolução de sistemas são necessários.

A avaliação das Eqs. (2.11), (2.18), (2.24), (2.27) e (2.30), ou da sua forma equivalente, Eq. (2.32), em todos os pontos da malha gera um sistema de equações da forma

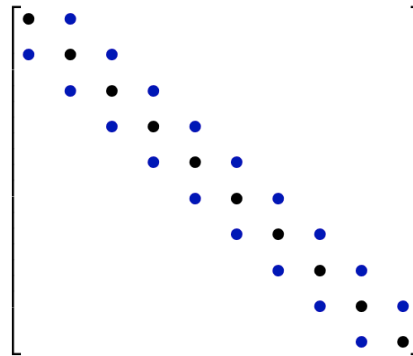
$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{\Lambda} = \mathbf{b}, \quad (2.33)$$

onde \mathbf{A} representa a matriz do sistema e \mathbf{b} é o vetor correspondente ao termo fonte.

Desse modo, a Eq. (2.32) corresponde a uma linha genérica do sistema da Eq. (2.33). Todavia, nota-se que essa linha contém apenas os valores das variáveis vizinhas ao nó atual P, juntamente com seus coeficientes. Isso gera sistemas com matrizes esparsas no processo de discretização. Nesse tipo de matriz, a maioria dos elementos são nulos e os elementos não nulos concentram-se em um número limitado de diagonais. Dessa forma, métodos especializados para esse tipo de matriz devem ser preferencialmente utilizados.

A FIGURA 4 apresenta a estrutura das matrizes obtidas através das aproximações utilizadas neste trabalho. Uma matriz com essa forma é também chamada de matriz tridiagonal.

FIGURA 4 – ESTRUTURA DE UMA MATRIZ TRIDIAGONAL.



FONTE: Modificado de
Oliveira (2020).

Os métodos de resolução de sistemas lineares, ou *solvers*, são classificados basicamente em duas categorias: métodos diretos e iterativos. Os métodos diretos procuram resolver o

sistema de equações através de uma sequência finita de operações e, exceto por erros de arredondamento e discretização, fornecem sua solução exata. Tais características podem ser interpretadas como vantagens dessa classe de métodos.

Pode-se afirmar que o método fundamental para o desenvolvimento e estudo dos métodos diretos é o método de eliminação de Gauss (PATANKAR, 1980). Nesse método, o sistema original é transformado em um sistema triangular equivalente, a partir do qual a solução é facilmente obtida.

Outro método direto bastante utilizado, é o Algoritmo para Matriz Tridiagonal (TDMA) (THOMAS, 1949; PATANKAR, 1980), que também é baseado no método de eliminação de Gauss, e é específico para resolução de sistemas envolvendo matrizes tridiagonais. O baixo custo desse método tornou sua utilização bastante popular para os casos em que matrizes tridiagonais são obtidas.

Neste trabalho, para todas as aproximações, utilizou-se o TDMA para solucionar o sistema resultante da discretização.

2.4 Viscosidade Artificial

Originalmente proposta por Von Neumann e Richtmyer (1950), a viscosidade artificial consiste em um método que controla as oscilações espúrias não-físicas nas soluções numéricas. No problema em estudo utilizou-se a viscosidade artificial para eliminar os problemas de oscilações excessivas nas aproximações de segunda ordem.

De acordo com Tryggvason (2017), a viscosidade artificial pode ser obtida da seguinte forma. Considere a EDP,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial y} = 0. \quad (2.34)$$

Definindo F' de tal sorte que,

$$F' = F - \alpha \frac{\partial f}{\partial y}, \quad (2.35)$$

onde $\alpha = D(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right|$ e D corresponde a uma constante adimensional ajustável (CAMPBELL; VIGNJEVIC, 2009).

Substituindo F por F' na Eq. (2.34), tem-se

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial y} = -\frac{\partial}{\partial y} \left[-\alpha \frac{\partial f}{\partial y} \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left[D(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| \frac{\partial f}{\partial y} \right]. \quad (2.36)$$

Note que, a medida que $\Delta y \rightarrow 0$,

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left[D(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| \frac{\partial f}{\partial y} \right]}_{\text{Viscosidade Artificial}} \rightarrow 0, \quad (2.37)$$

fazendo com que a Eq. (2.36) \rightarrow Eq.(2.34). O termo dado pela Eq. (2.37) recebe o nome de viscosidade artificial.

A viscosidade artificial pode ser adicionada a Eq. (2.3), assim tem-se

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial t} + \frac{\partial \Lambda}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left[D(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right] = 0 \quad (2.38)$$

De acordo com Tryggvason (2017), pode-se efetuar a discretização da viscosidade artificial pelo método de Lax e Wendroff (1960), obtendo-se

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[D(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right] \approx \frac{1}{\Delta y} \left(\left[D(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right]_{P+\frac{1}{2}} - \left[D(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right]_{P-\frac{1}{2}} \right). \quad (2.39)$$

Aproximando:

$$\left[D(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right]_{P+\frac{1}{2}} \approx D \left| \Lambda_N^n - \Lambda_P^n \right| (\Lambda_N^n - \Lambda_P^n) \quad (2.40)$$

e

$$\left[D(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right]_{P-\frac{1}{2}} \approx D \left| \Lambda_P^n - \Lambda_S^n \right| (\Lambda_P^n - \Lambda_S^n) \quad (2.41)$$

e substituindo as Eqs. (2.40) e (2.41) na Eq. (2.39), tem-se o termo discretizado da viscosidade artificial:

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[D(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right] \approx \frac{D}{(\Delta y)} \left[\left| \Lambda_N^n - \Lambda_P^n \right| (\Lambda_N^n - \Lambda_P^n) - \left| \Lambda_P^n - \Lambda_S^n \right| (\Lambda_P^n - \Lambda_S^n) \right]. \quad (2.42)$$

2.5 Critérios de Verificação Numérica

Verificação da acurácia de soluções é um processo essencial na construção de qualquer novo modelo numérico. Segundo Oberkampf e Trucano (2002), a verificação é a avaliação da acurácia da solução para um modelo computacional através de comparação com soluções conhecidas. Ainda de acordo com os autores, essas soluções conhecidas têm basicamente duas origens: soluções analíticas e soluções numéricas com alto grau de acurácia (conhecidas como *Benchmark*). A avaliação da acurácia da solução numérica é geralmente realizada a partir de

comparações com dados de gráficos e tabelas, mas principalmente por meio da quantificação e análise dos erros envolvidos.

Nesta seção, são apresentados alguns tópicos teóricos referentes aos critérios que serão utilizados para a verificação das soluções obtidas neste trabalho.

2.5.1 Erros de Discretização e Ordem Assintótica

Através da utilização de métodos numéricos, são obtidas soluções numéricas aproximadas para as variáveis de um dado problema. Seja Φ o valor da solução analítica de uma certa variável. A cada solução numérica aproximada obtida, indicada por ϕ , está associado também um erro numérico, o qual é calculado como

$$E(\phi) = \Phi - \phi. \quad (2.43)$$

De acordo com Marchi (2001), o erro numérico E possui quatro fontes principais: erros de truncamento, erros de iteração, erros de arredondamento e erros de programação. O erro numérico é denominado de erro de discretização quando sua única fonte são os erros de truncamento, ou seja, quando os erros de arredondamento, de iteração e de programação podem ser desprezados (FERZIGER; PERIC, 2002). Nesse caso, o erro de discretização (E) pode ser escrito como

$$E(\phi) = C_1 h^{p_1} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + \dots, \quad (2.44)$$

onde h é o tamanho representativo de malha, C_i , $i = 1, 2, 3, \dots$, são coeficientes que independem de h , mas dependem da variável em questão, e p_i , com $p_1 < p_2 < p_3 < \dots$, são inteiros positivos denominados ordens verdadeiras do erro. A primeira ordem verdadeira é chamada de ordem assintótica e é indicada também por $p_L = p_1$. A ordem assintótica é um resultado teórico que pode ser obtido "*a priori*" das soluções numéricas a partir dos tipos de aproximações utilizadas na discretização do problema (OLIVEIRA, 2020).

O erro de discretização da aproximação CDS, é de 2ª ordem, ou seja, $p_L = 2$. Porém, a aproximação numérica da derivada temporal utilizando a formulação explícita ou implícita é de 1ª ordem, ou seja, $p_L = 1$. A ordem assintótica resultante da combinação, quando ocorre uma mistura de aproximações no tempo e no espaço, é igual à ordem da aproximação que apresenta a menor ordem assintótica.

No caso da combinação entre CDS, tanto para a formulação explícita quanto implícita, a ordem assintótica resultante é igual à unidade. Uma maneira de se obter $p_L = 2$ é utilizando a formulação Crank-Nicolson, dado que tal formulação é de 2ª ordem no tempo (TANNEHILL *et al.*, 1982).

Na TABELA 2 são apresentadas as ordens assintóticas de cada aproximação utilizada neste trabalho (DEHGHAN, 2005; CAMPBELL; YIN, 2007; FERZIGER; PERIC, 2002; TANNEHILL *et al.*, 1982).

TABELA 2 – ORDENS ASSINTÓTICAS DAS APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS UTILIZADAS.

Método	Ordem Assintótica (p_L)
UDS - Explícito	1
UDS - Implícito	1
UDS - Crank-Nicolson	1
CDS - Explícito	1
CDS - Implícito	1
CDS - Crank-Nicolson	2
UDS-C - Explícito ($\beta = \frac{1}{2}$)	1
UDS-C - Implícito ($\beta = \frac{1}{2}$)	1
UDS-C - Crank-Nicolson ($\beta = \frac{1}{2}$)	1
Roberts e Weiss (RWS)	2
Leith (LS)	2

FONTE: Dehghan (2005), Campbell e Yin (2007), Ferziger e Peric (2002) e Tannehill *et al.* (1982).

2.5.2 Ordem Efetiva

Através das chamadas estimativas "*a posteriori*", pode-se verificar se a ordem assintótica do erro de discretização, calculada "*a priori*", é obtida pelo modelo numérico desenvolvido. Se a solução analítica do problema é conhecida, pode-se utilizar a ordem efetiva, p_E , do erro de discretização para estimar a ordem assintótica. De acordo com Marchi (2001), a ordem efetiva é calculada fazendo-se uso de duas malhas, uma fina e uma grossa, através de

$$p_E = \frac{\log\left(\frac{\Phi - \phi_2}{\Phi - \phi_1}\right)}{\log(q)}, \quad (2.45)$$

onde Φ é a solução analítica exata, ϕ_1 e ϕ_2 , h_1 e h_2 , são as soluções numéricas e os tamanhos representativos das malhas fina e grossa, respectivamente, e $q = h_2/h_1$ é a razão de refinamento de malhas. Teoricamente, a ordem efetiva tende à ordem assintótica com o refinamento da malha, ou seja, $p_E \rightarrow p_L$ quando $h \rightarrow 0$ (MARCHI, 2001).

2.5.3 Esforço Computacional

Seguindo a abordagem de Roy *et al.* (2015), o esforço computacional de um método numérico é avaliado através da análise do comportamento dos tempos de execução (t , em segundos), ou de CPU (t_{CPU}), em função do número de incógnitas (N) de cada malha. Para tanto, é realizado um ajuste (GONÇALVES, 2013) da forma

$$t_{CPU} = cN^p, \quad (2.46)$$

onde p é a inclinação da curva de crescimento do tempo em relação a N (em escala logarítmica), também chamada de ordem de complexidade do método, e c é uma constante dependente do método.

3 MODELO MATEMÁTICO

O modelo que descreve a temperatura (T) e a umidade dos grãos (U) utilizado neste trabalho foi proposto por Thorpe (1997) e apresentado de forma detalhada em Thorpe (2001b). De acordo com Lopes *et al.* (2006), algumas simplificações podem ser feitas no modelo original, sem perda de acurácia. Dessa forma, o modelo simplificado, que aqui será adotado, é dado por

$$\frac{\partial T}{\partial t} \left\{ \rho_\sigma [c_g + c_W U] + \epsilon \rho_a \left[c_a + R \left(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T} \right) \right] \right\} =$$

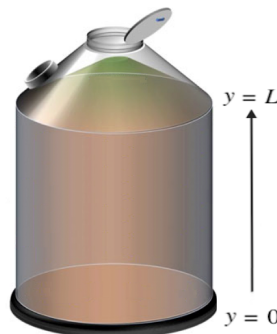
$$\rho_\sigma h_s \frac{\partial U}{\partial t} - u_a \rho_a \left[c_a + R \left(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T} \right) \right] \frac{\partial T}{\partial y} + \rho_\sigma \frac{dm}{dt} (Q_r - 0,6 h_v), \quad (3.1)$$

$$\rho_\sigma \frac{\partial U}{\partial t} = -u_a \rho_a \frac{\partial R}{\partial y} + \frac{dm}{dt} (0,6 + U), \quad (3.2)$$

onde: t - tempo (s), y - eixo na direção vertical (orientado de baixo para cima) (m), U - umidade dos grãos (kg (água) kg^{-1} (grão seco)), u_a - velocidade do ar de aeração (ms^{-1}), c_g - calor específico dos grãos ($Jkg^{-1} \text{ } ^\circ C^{-1}$), c_W - calor específico da água ($Jkg^{-1} \text{ } ^\circ C^{-1}$), c_a - calor específico do ar ($Jkg^{-1} \text{ } ^\circ C^{-1}$), R - razão de mistura (g (vapor da água) g^{-1} (ar seco)), ρ_a - densidade do ar intragranular (kgm^{-3}), ρ_σ - densidade dos grãos (kgm^{-3}), h_v - entalpia específica de vaporização da água (Jkg^{-1}), h_s - entalpia diferencial de sorção (Jkg^{-1}), T - temperatura dos grãos ($^\circ C$), ϵ - porosidade da massa de grãos (decimal), $\frac{dm}{dt}$ - derivada da perda de matéria seca em relação ao tempo ($kg s^{-1}$), Q_r - calor de oxidação dos grãos ($J s^{-1} m^{-3}$).

Considerou-se o fluxo de ar através da massa de grãos na direção vertical, ou seja: $y \in [0, L]$, onde L representa a altura do local de armazenamento da massa de grãos, conforme a FIGURA 5. Portanto, considerou-se uma simplificação unidimensional do modelo.

FIGURA 5 – DOMÍNIO DE CÁLCULO.



FONTE: Modificado de Panigrahi *et al.* (2020b).

3.1 Parâmetros do Modelo Matemático

O modelo matemático utilizado neste trabalho é composto por constantes, constantes que dependem do tipo de grão e parâmetros que são obtidos por meio de soluções analíticas conhecidas da literatura.

3.1.1 Constantes

A velocidade do ar de aeração (u_a) consiste na velocidade na qual o ar flui através da massa de grãos armazenada. Segundo Brooker *et al.* (1992) o calor específico da água (c_w) e o calor específico do ar (c_a) são quantidades bem definidas e respectivamente iguais a 4186 ($J/(kg^\circ C)$) e 1000 ($J/(kg^\circ C)$). De acordo com Fleurat-Lessard (2002), o calor de oxidação dos grãos (Q_r) é igual a 15778 ($J/(sm^3)$).

3.1.2 Constantes Dependentes do Tipo de Grão

Segundo Silva e Corrêa (2000), a porosidade (ϵ) pode ser definida como a relação entre o volume ocupado pelo ar existente na massa granular e o volume total ocupado por esta massa, tendo grande influência sobre a pressão de um fluxo de ar que atravessa a massa de grãos. A porosidade pode ser obtida de acordo com o tipo de grão, conforme a TABELA 3.

TABELA 3 – VALORES PARA A POROSIDADE DA MASSA DE GRÃOS.

Tipo de Grão	Porosidade (ϵ) (%)
Soja	0,361
Arroz	0,584
Milho	0,435
Trigo	0,453
Aveia	0,555

FONTE: Brooker *et al.* (1992).

A densidade dos grãos (ρ_σ) varia de acordo com a TABELA 4 e determina o volume requerido para armazenar uma determinada quantidade de produto. Esta propriedade influencia diretamente a vazão de ar requerida para a aeração e os processos de transferência de calor e de massa no ambiente de armazenamento (LOPES, 2006).

TABELA 4 – VALORES PARA A DENSIDADE DA MASSA DE GRÃOS.

Tipo de Grão	Densidade (ρ_σ) ($\frac{kg}{m^3}$)
Soja	737
Arroz	576
Milho	640
Trigo	762
Aveia	480

FONTE: Thorpe (2001b).

O calor específico dos grãos, segundo Lopes (2006), representa a quantidade de energia térmica requerida para aumentar a temperatura de 1 kg de produto em 1 °C. Esta propriedade também influencia os processos de transferência de calor e de massa durante a aeração (NAVARRO; NOYES, 2001). A TABELA 5 mostra o calor específico (c_g) para alguns tipos de grãos.

TABELA 5 – VALORES PARA O CALOR ESPECÍFICO DA MASSA DE GRÃOS.

Tipo de Grão	Calor Específico (c_g) ($Jkg^{-1} °C^{-1}$)
Soja	1637,0
Arroz	1197,0
Milho	1534,8
Trigo	1184,0
Aveia	1277,0

FONTE: Jayas e Cenkowski (2006).

3.1.3 Parâmetros com Soluções Analíticas Conhecidas

A entalpia diferencial de sorção (h_s), assim como a entalpia específica de vaporização da água (h_v), são propriedades importantes, consideradas nas simulações do processo de aeração, pois interferem nas transferências de calor e massa dentro do ambiente de armazenamento (LOPES, 2006). Segundo Thorpe (2001b), a entalpia diferencial de sorção é a energia total necessária para remover uma unidade de massa de água da massa de grãos.

A entalpia diferencial de sorção (h_s) pode ser calculada pela equação de Chung-Pfost (PFOST *et al.*, 1976)

$$h_s = h_v \left[1 + \frac{Ae^{-BU}(T + 273,15)}{(T + C)^2 - 5 + \frac{6800}{T+273,15}} \right], \quad (3.3)$$

onde A , B e C são constantes que variam de acordo com o tipo de grão, conforme a TABELA 6.

TABELA 6 – VALORES DAS CONSTANTES DA EQUAÇÃO DE CHUNG-PFOST.

Tipo de Grão	A	B	C
Soja	138,45	14,967	24,576
Arroz	594,65	21,733	35,703
Milho	312,31	16,958	30,205
Trigo	725,59	23,607	35,662

FONTE: Pfost *et al.* (1976).

De acordo com Thorpe (2001b), o calor aplicado à água que a faz mudar de líquido para vapor é chamado de entalpia específica de vaporização da água (h_v) e fornece a energia necessária para superar a atração mútua das moléculas no estado líquido, e pode ser calculada por

$$h_v = 2501,33 - 2,363T. \quad (3.4)$$

Esta equação foi obtida por Thorpe (2001b) ajustando-se uma equação linear a dados termodinâmicos obtidos por Cengel e Boles (1998). Derivando-se a Eq. (3.4) em relação à temperatura, encontra-se a derivada da entalpia de vaporização da água ($\frac{dh_v}{dT}$).

Visando corrigir os possíveis efeitos da altitude, a densidade do ar (ρ_a) pode ser calculada por (ALÉ, 2001)

$$\rho_a = \frac{258,8P_{atm}}{101,325(T + 273,15)}, \quad (3.5)$$

em que P_{atm} corresponde à pressão atmosférica em kPa .

A perda de matéria seca pode ser estimada por meio de modelos obtidos ajustando-se relações matemáticas a dados experimentais. O modelo mais utilizado é o apresentado por Thompson (1972), onde a derivada da perda de matéria seca em relação ao tempo ($\frac{dm}{dt}$) é dada por

$$\frac{dm}{dt} = 8,83 \times 10^{-4} \left\{ \exp \left[1,667 \times 10^{-6} \frac{t}{M_U M_T} \right] - 1 \right\} + 2,833 \times 10^{-9} \frac{t}{M_U M_T}, \quad (3.6)$$

onde M_U e M_T são parâmetros utilizados para ajustar o tempo de aeração de acordo com o teor de água e temperatura dos grãos. O parâmetro M_U pode ser obtido por

$$M_U = 0,103 \left(\exp \left[\frac{455}{(100U)^{1,53}} \right] - 0,845U + 1,558 \right), \quad (3.7)$$

e M_T pode ser obtido de acordo com a faixa de temperatura e umidade:

$$\left\{ \begin{array}{ll} M_T = S, & \text{se } T \leq 15 \text{ ou } U \leq 19, \\ M_T = S + \frac{\frac{100U}{U+1} - 19}{100} \exp [0,0183T - 0,2847], & \text{se } T > 15 \text{ e } 19 < U < 28, \\ M_T = S + 0,09 \exp [0,0183T - 0,2847], & \text{se } T > 15 \text{ e } U \geq 28, \end{array} \right. \quad (3.8a)$$

$$M_T = S + \frac{\frac{100U}{U+1} - 19}{100} \exp [0,0183T - 0,2847], \quad \text{se } T > 15 \text{ e } 19 < U < 28, \quad (3.8b)$$

$$M_T = S + 0,09 \exp [0,0183T - 0,2847], \quad \text{se } T > 15 \text{ e } U \geq 28, \quad (3.8c)$$

onde $S = 32,2 \exp [-0,1044T - 1,856]$.

A razão de mistura (R) é a razão entre a massa de vapor de água e a massa de ar seco em um dado volume de ar úmido. A razão de mistura é uma propriedade do ar, não estando diretamente relacionada à estimativa do teor de água dos grãos, e pode ser calculada por (THORPE, 2001a)

$$R = 0,622 \frac{r_u p_s}{P_{atm} - r_u p_s}, \quad (3.9)$$

onde p_s é a pressão de vapor de saturação do ar (kPa) dada por (HUNTER, 1987)

$$p_s = \frac{6 \times 10^{25}}{(T + 273,15)^5} \exp \left[-\frac{6800}{T + 273,15} \right], \quad (3.10)$$

e r_u corresponde a umidade relativa de equilíbrio e pode ser calculada por (CHUNG; PFOST, 1967)

$$r_u = \exp \left[-\frac{A}{T + C} \exp \left[-BU \right] \right]. \quad (3.11)$$

Nesta dissertação utilizaram-se as referências apontadas nesta seção para calcular os parâmetros do modelo matemático, no entanto, na literatura do problema, há uma grande variedade de opções para calcular estes parâmetros.

3.2 Condições Iniciais

Antes de serem armazenados, os grãos são submetidos à secagem, visando atingir um teor de água ideal para o armazenamento seguro. Este procedimento aquece os grãos de forma indesejável, sendo requerido um resfriamento da massa de grãos com a aeração. Portanto, em todo domínio, a condição inicial de temperatura é dada por (T_I).

$$T(y, 0) = T_I. \quad (3.12)$$

A umidade inicial (U_I) pode ser obtida conforme Thorpe (2001b), por

$$U(y, 0) = \frac{U_p}{100 - U_p} = U_I, \quad (3.13)$$

onde U_p corresponde ao teor de água inicial dos grãos (% b.u.).

Obtém-se a razão de mistura inicial (R_I) utilizando-se a Eq. (3.9) e empregando-se T_I e U_I como parâmetros nas Eqs (3.10 e 3.11)

3.3 Condições de Contorno

Em $y = 0$ supõe-se que os grãos localizados na base do local de armazenamento entram em equilíbrio com o ar de aeração, dessa forma

$$T(0, t) = T_C, \quad (3.14)$$

onde T_C representa a temperatura do ar de aeração.

A umidade em $y = 0$ (U_C) consiste em uma adaptação da equação de Chung-Pfost (Eq. (3.11)) e pode ser calculada por

$$U(0, t) = -\frac{1}{B} \ln \left[\ln \left(-\frac{r_a}{100} \right) \left(-\frac{T_C + C}{A} \right) \right] = U_C, \quad (3.15)$$

onde A , B e C variam de acordo com a TABELA 6 e r_a representa a umidade relativa do ar de aeração e é dada por

$$r_a = u_r \frac{\frac{6 \times 10^{25}}{(T_{amb} + 273,15)^5} \exp \left[-\frac{6800}{T_{amb} + 273,15} \right]}{\frac{6 \times 10^{25}}{(T_C + 273,15)^5} \exp \left[-\frac{6800}{T_C + 273,15} \right]}, \quad (3.16)$$

onde u_r corresponde a umidade relativa do ar ambiente e T_{amb} é a temperatura ambiente.

A razão de mistura em $y = 0$ (R_C), é dado por

$$R(0, t) = 0,622 \frac{r_a p_{sa}}{P_{atm} - r_a p_{sa}} = R_C, \quad (3.17)$$

onde p_{sa} corresponde a pressão de vapor de saturação, Eq. (3.10) utilizando T_C como parâmetro.

Em $y = L$, tem-se para a temperatura e umidade, as condições de contorno de Neumann.

$$\left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_{y=L} = 0, \quad (3.18)$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial y} \right)_{y=L} = 0. \quad (3.19)$$

3.4 Método das Soluções Fabricadas (MSF)

Esta seção constitui o desenvolvimento da solução analítica para a temperatura da massa de grãos, Eq. (3.1), e do termo fonte associado, utilizando o MSF.

3.4.1 Solução Analítica

Como discutido anteriormente, mesmo com a vasta utilização do modelo proposto por Thorpe (2001b), ainda não existe uma investigação sobre a solução analítica do modelo matemático. A fim de encontrar uma solução analítica para a temperatura da massa de grãos, Eq. (3.1), considerou-se como base, dados experimentais apresentados por Khatchatourian e Oliveira (2006) e Oliveira *et al.* (2007).

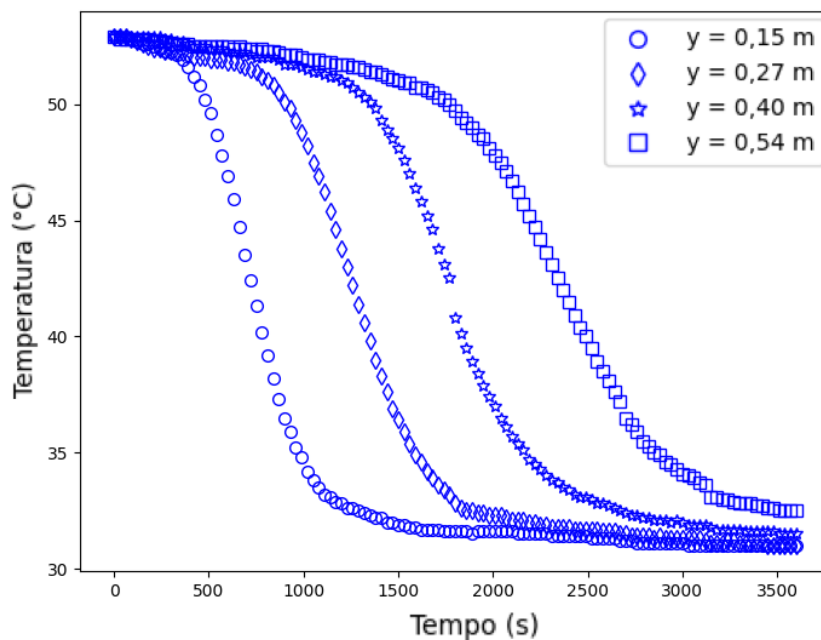
Estes dados foram obtidos no laboratório de medidas físicas e modelagem matemática da Universidade Regional do Noroeste do Rio Grande do Sul (UNIJUI), em um protótipo de

silo composto por um tubo PVC com isolamento térmico nas laterais, altura de 1,0 m ($L = 1$ m) e diâmetro de 0,15 m.

Para realização dos experimentos, os grãos de soja com teor de água médio de 12 % b.u. foram previamente selecionados, limpos e aquecidos em estufa até temperatura aproximada de 52,9 °C e a temperatura do ar de aeração era 31,1 °C. Ou seja, $T_I = 52,9$ °C e $T_C = 31,1$ °C. A temperatura dos grãos foi medida por termopares, inseridos dentro da massa de grãos ao longo do tubo, nas seguintes seções da coluna de grãos: $y = 0,15$ m; $y = 0,27$ m; $y = 0,40$ m e $y = 0,54$ m durante uma hora.

A FIGURA 6 mostra o comportamento da temperatura dos grãos, obtida experimentalmente, nas alturas $y = 0,15$ m, $y = 0,27$ m, $y = 0,40$ m e $y = 0,54$ m em relação a uma hora de aeração.

FIGURA 6 – DADOS EXPERIMENTAIS DA TEMPERATURA DOS GRÃOS.



FONTE: Khatchatourian e Oliveira (2006) e Oliveira *et al.* (2007).

A solução analítica para a Eq. (3.1) proposta neste trabalho foi fabricada a partir de modificações feitas em uma solução de um problema apresentado por Van Genuchten e Alves (1982), e ela é dada por

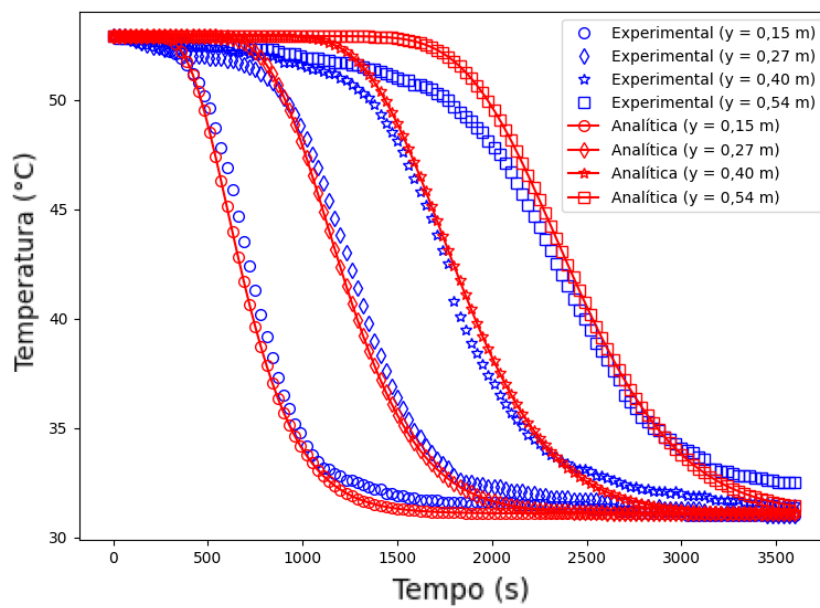
$$\hat{T}(y, t) = T_I + \frac{1}{2}(T_C - T_I) \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{y - 2,2 \times 10^{-4}t}{\sqrt{8 \times 10^{-6}t}}\right) + \exp\left(\frac{2,2 \times 10^{-4}y}{8 \times 10^{-6}}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{y + 2,2 \times 10^{-4}t}{\sqrt{8 \times 10^{-6}t}}\right) \right], \quad (3.20)$$

onde $erfc$ representa a função erro complementar (VAN GENUCHTEN; ALVES, 1982), definida por

$$erfc(x) = 1 - erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt. \quad (3.21)$$

A FIGURA 7 mostra a Eq. (3.20) aplicada nos mesmos pontos dos dados experimentais, utilizando $T_I = 52,9 \text{ }^{\circ}\text{C}$ e $T_C = 31,1 \text{ }^{\circ}\text{C}$.

FIGURA 7 – SOLUÇÃO ANALÍTICA PROPOSTA E OS DADOS EXPERIMENTAIS.



FONTE: O autor (2022).

Pode-se notar na FIGURA 7 que a solução analítica proposta neste trabalho apresenta uma boa concordância e acurácia quando comparada aos dados experimentais. A solução dada pela Eq. (3.20) foi fabricada para satisfazer um experimento realizado por Khatchatourian e Oliveira (2006) e Oliveira *et al.* (2007) com grãos de soja, muito citado na literatura. Observa-se que a solução analítica adota como parâmetros: o tamanho do local de armazenamento (y), o tempo de aeração (t), a temperatura do ar de aeração (T_C) e a temperatura inicial da massa do grãos (T_I).

Considerando sistemas de aeração realistas, que requerem aproximadamente entre 300 e 600 horas, diferentes geometrias, diferentes temperaturas iniciais e diferentes temperaturas do ar de aeração, a solução proposta neste trabalho, dada pela Eq. (3.20), satisfaz as condições mencionadas com ligeiras adaptações. Quanto à mudança do tipo de grão, são necessárias modificações mais elaboradas e estas adaptações são objeto de estudos.

3.4.2 Termo Fonte

Para a função definida anteriormente ser considerada solução analítica da Eq. (3.1), um termo fonte (S_T) deve ser adicionado a equação governante:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial T}{\partial t} \left\{ \rho_\sigma [c_g + c_W U] + \epsilon \rho_a [c_a + R(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T})] \right\} = \\ & \rho_\sigma h_s \frac{\partial U}{\partial t} - u_a \rho_a \left[c_a + R(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T}) \right] \frac{\partial T}{\partial y} + \rho_\sigma \frac{dm}{dt} (Q_r - 0,6 h_v) + S_T, \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde o termo fonte S_T pode ser calculado da seguinte forma:

$$\begin{aligned} S_T = & \frac{\partial \hat{T}}{\partial t} \left\{ \rho_\sigma [c_g + c_W U] + \epsilon \rho_a [c_a + R(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T})] \right\} \\ & - \rho_\sigma h_s \frac{\partial U}{\partial t} + u_a \rho_a \left[c_a + R(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T}) \right] \frac{\partial \hat{T}}{\partial y} - \rho_\sigma \frac{dm}{dt} (Q_r - 0,6 h_v). \end{aligned} \quad (3.23)$$

A derivada $\frac{\partial \hat{T}}{\partial t}$ é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{T}}{\partial t} = & \frac{1}{2} (T_C - T_I) \left[- \frac{2 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^4 t)^2}{t} \right] \left(- \frac{176,777(y-2,2 \times 10^{-4} t)}{t^{\frac{3}{2}}} - \frac{0,0777817}{\sqrt{t}} \right)}{\sqrt{\pi}} \right. \\ & \left. - \frac{2 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^4 t + y)^2}{t} \right] \left(\frac{0,0777817}{\sqrt{t}} - \frac{176,777(2,2 \times 10^{-4} t + y)}{t^{\frac{3}{2}}} \right)}{\sqrt{\pi}} \right]. \end{aligned} \quad (3.24)$$

E a derivada $\frac{\partial \hat{T}}{\partial y}$ é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{T}}{\partial y} = & \frac{1}{2} (T_C - T_I) \left[27,5 \exp \left[27,5y \right] \operatorname{erfc} \left(\frac{353,553(2,2 \times 10^{-4} t + y)}{\sqrt{t}} \right) \right. \\ & \left. - \frac{398,942 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^{-4} t)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} - \frac{398,942 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^{-4} t + y)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} \right]. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Substituindo as Eqs. (3.24) e (3.25) na Eq. (3.23), obtém-se o termo fonte:

$$\begin{aligned}
S_T = & \left\{ \frac{1}{2}(T_C - T_I) \left[- \frac{2 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^4 t)^2}{t} \right] \left(- \frac{176,777(y-2,2 \times 10^{-4} t)}{t^{\frac{3}{2}}} - \frac{0,0777817}{\sqrt{t}} \right)}{\sqrt{\pi}} \right. \right. \\
& - \frac{2 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^4 t + y)^2}{t} \right] \left(\frac{0,0777817}{\sqrt{t}} - \frac{176,777(2,2 \times 10^{-4} t + y)}{t^{\frac{3}{2}}} \right)}{\sqrt{\pi}} \left. \right] \left. \right\} \left\{ \rho_\sigma [c_g + c_W U] \right. \\
& + \left. \epsilon \rho_a [c_a + R(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T})] \right\} - \rho_\sigma h_s \frac{\partial U}{\partial t} + u_a \rho_a \left[c_a + R(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T}) \right] \\
& \left\{ \frac{1}{2}(T_C - T_I) \left[27,5 \exp [27,5y] \operatorname{erfc} \left(\frac{353,553(2,2 \times 10^{-4} t + y)}{\sqrt{t}} \right) \right. \right. \\
& - \frac{398,942 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^{-4} t)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} - \frac{398,942 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^{-4} t + y)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} \left. \right] \left. \right\} \\
& - \rho_\sigma \frac{dm}{dt} (Q_r - 0,6h_v). \tag{3.26}
\end{aligned}$$

Ademais, efetuando algumas simplificações e denotando \mathcal{A} , \mathcal{B} e \mathcal{F} , como

$$\mathcal{A} = \rho_\sigma [c_g + c_W U] + \epsilon \rho_a \left[c_a + R \left(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T} \right) \right], \tag{3.27}$$

$$\mathcal{B} = u_a \rho_a \left[c_a + R \left(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T} \right) \right], \tag{3.28}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{F} = & \mathcal{A} \left\{ \frac{1}{2}(T_C - T_I) \left[- \frac{2 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^4 t)^2}{t} \right] \left(- \frac{176,777(y-2,2 \times 10^{-4} t)}{t^{\frac{3}{2}}} - \frac{0,0777817}{\sqrt{t}} \right)}{\sqrt{\pi}} \right. \right. \\
& - \frac{2 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^4 t + y)^2}{t} \right] \left(\frac{0,0777817}{\sqrt{t}} - \frac{176,777(2,2 \times 10^{-4} t + y)}{t^{\frac{3}{2}}} \right)}{\sqrt{\pi}} \left. \right] \left. \right\} \\
& + \mathcal{B} \left\{ \frac{1}{2}(T_C - T_I) \left[27,5 \exp (27,5y) \operatorname{erfc} \left(\frac{353,553(2,2 \times 10^{-4} t + y)}{\sqrt{t}} \right) \right. \right. \\
& - \frac{398,942 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^{-4} t)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} - \frac{398,942 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^{-4} t + y)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} \left. \right] \left. \right\}, \tag{3.29}
\end{aligned}$$

tem-se a equação que descreve a temperatura (T) da massa de grãos:

$$\mathcal{A} \frac{\partial T}{\partial t} + \mathcal{B} \frac{\partial T}{\partial y} = \mathcal{F}, \tag{3.30}$$

cuja solução analítica é dada pela Eq. (3.20) por meio do MSF.

4 MODELO NUMÉRICO

Neste capítulo são apresentados os modelos numéricos resultantes da discretização do modelo matemático apresentado no capítulo 3. Os modelos numéricos são desenvolvidos através das aproximações apresentadas no capítulo 2: UDS; CDS; UDS-C; RWS e LS. O capítulo contém também a implementação da viscosidade artificial nos métodos de segunda ordem, ou seja, a modificação dos coeficientes desses métodos. Finalmente, este capítulo é encerrado apresentando um algoritmo da implementação computacional.

4.1 Esquema com Um Ponto a Montante (UDS)

Aproximando a derivada espacial de T por UDS (Eq. (2.7)) e a derivada temporal de T utilizando a Eq. (2.10), tem-se a discretização da Eq. (3.30):

$$\mathcal{A}^\theta \left[\frac{T_P^{n+1} - T_P^n}{\Delta t} \right] = -\mathcal{B}^\theta \left[\frac{T_P^\theta - T_S^\theta}{\Delta y} \right] + \mathcal{F}^\theta, \quad (4.1)$$

$$\mathcal{A}^\theta T_P^{n+1} = \mathcal{A}^\theta T_P^n - \mathcal{B}^\theta \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_P^\theta + \mathcal{B}^\theta \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^\theta + \mathcal{F}^\theta \Delta t, \quad (4.2)$$

onde:

$$\mathcal{A}^\theta = \rho_\sigma \left[c_g + c_W U_P^\theta \right] + \epsilon \rho_a \left[c_a + R_P^\theta \left(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T} \right) \right], \quad (4.3)$$

$$\mathcal{B}^\theta = u_a \rho_a \left[c_a + R_P^\theta \left(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T} \right) \right], \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^\theta = \mathcal{A}^\theta \left\{ \frac{1}{2} (T_C - T_I) \left[- \frac{2 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^4 t)^2}{t} \right] \left(- \frac{176,777(y-2,2 \times 10^{-4} t)}{t^{\frac{3}{2}}} - \frac{0,0777817}{\sqrt{t}} \right)}{\sqrt{\pi}} \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{2 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^4 t + y)^2}{t} \right] \left(\frac{0,0777817}{\sqrt{t}} - \frac{176,777(2,2 \times 10^{-4} t + y)}{t^{\frac{3}{2}}} \right)}{\sqrt{\pi}} \right] \right\} + \\ + \mathcal{B}^\theta \left\{ \frac{1}{2} (T_C - T_I) \left[27,5 \exp \left(27,5y \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{353,553(2,2 \times 10^{-4} t + y)}{\sqrt{t}} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{398,942 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^{-4} t)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} - \frac{398,942 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^{-4} t + y)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} \right] \right\}. \quad (4.5) \end{aligned}$$

Aproximando a derivada espacial de R por UDS (Eq. (2.7)) e a derivada temporal de U utilizando a Eq. (2.10), tem-se a discretização da Eq. (3.2):

$$\rho_\sigma \left[\frac{U_P^{n+1} - U_P^n}{\Delta t} \right] = -u_a \rho_a \left[\frac{R_P^\theta - R_S^\theta}{\Delta y} \right] + \frac{dm}{dt} (0,6 + U_P^\theta), \quad (4.6)$$

$$U_P^{n+1} = U_P^n - \frac{u_a \rho_a}{\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_P^\theta + \frac{u_a \rho_a}{\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_S^\theta + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} U_P^\theta + \frac{0,6 \Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma}. \quad (4.7)$$

As condições de contorno de Neumann, Eqs. (3.18) e (3.19), podem ser aproximadas por UDS (Eq. (2.7)), dessa forma a temperatura T e a umidade U em $y = L$ podem ser calculadas, respectivamente, por

$$T_{NC}^{n+1} = T_{NC-1}^n, \quad (4.8)$$

$$U_{NC}^{n+1} = U_{NC-1}^n, \quad (4.9)$$

onde NC representa o nó localizado no contorno, conforme a FIGURA 2.

4.1.1 UDS com Formulação Explícita (UDS - Explícito)

No caso de se usar $\theta = 0$, a Eq. (4.2) resulta em:

$$\mathcal{A}^n T_P^{n+1} = \left[\mathcal{A}^n - \mathcal{B}^n \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] T_P^n + \mathcal{B}^n \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^n + \mathcal{F}^n \Delta t, \quad (4.10)$$

onde:

$$\mathcal{A}^n = \rho_\sigma [c_g + c_W U_P^n] + \epsilon \rho_a \left[c_a + R_P^n \left(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T} \right) \right], \quad (4.11)$$

$$\mathcal{B}^n = u_a \rho_a \left[c_a + R_P^n \left(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T} \right) \right], \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^n = \mathcal{A}^n \left\{ \frac{1}{2} (T_C - T_I) \left[- \frac{2 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^4 t)^2}{t} \right] \left(- \frac{176,777(y-2,2 \times 10^{-4} t)}{t^{\frac{3}{2}}} - \frac{0,0777817}{\sqrt{t}} \right)}{\sqrt{\pi}} + \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{2 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^4 t + y)^2}{t} \right] \left(\frac{0,0777817}{\sqrt{t}} - \frac{176,777(2,2 \times 10^{-4} t + y)}{t^{\frac{3}{2}}} \right)}{\sqrt{\pi}} \right] \right\} + \\ + \mathcal{B}^n \left\{ \frac{1}{2} (T_C - T_I) \left[27,5 \exp(27,5y) \operatorname{erfc} \left(\frac{353,553(2,2 \times 10^{-4} t + y)}{\sqrt{t}} \right) + \right. \right. \end{aligned}$$

$$\left. - \frac{398,942 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^{-4}t)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} - \frac{398,942 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^{-4}t+y)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} \right] \Bigg\}. \quad (4.13)$$

Ao escrever a Eq. (4.10) no formato da Eq. (2.32), os seguintes coeficientes são obtidos:

$$a_S = 0, \quad (4.14a)$$

$$a_N = 0, \quad (4.14b)$$

$$a_P = \mathcal{A}^n, \quad (4.14c)$$

$$b_P = \left[\mathcal{A}^n - \mathcal{B}^n \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] T_P^n + \mathcal{B}^n \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^n + \mathcal{F} \Delta t. \quad (4.14d)$$

No caso de usar $\theta = 0$, a Eq. (4.7) resulta em:

$$U_P^{n+1} = \left[1 + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right] U_P^n - \frac{u_a \rho_a}{\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_P^n + \frac{u_a \rho_a}{\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_S^n + \frac{0,6 \Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma}. \quad (4.15)$$

4.1.2 UDS com Formulação Implícita (UDS - Implícito)

No caso de usar $\theta = 1$, a Eq. (4.2) resulta em:

$$\left[\mathcal{B}^{n+1} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) + \mathcal{A}^{n+1} \right] T_P^{n+1} = \mathcal{A}^{n+1} T_P^n + \mathcal{B}^{n+1} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^{n+1} + \mathcal{F}^{n+1} \Delta t, \quad (4.16)$$

onde:

$$\mathcal{A}^{n+1} = \rho_\sigma [c_g + c_W U_P^{n+1}] + \epsilon \rho_a \left[c_a + R_P^{n+1} \left(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T} \right) \right], \quad (4.17)$$

$$\mathcal{B}^{n+1} = u_a \rho_a \left[c_a + R_P^{n+1} \left(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T} \right) \right], \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{n+1} = & \mathcal{A}^{n+1} \left\{ \frac{1}{2} (T_C - T_I) \left[- \frac{2 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^{-4}t)^2}{t} \right] \left(- \frac{176,777(y-2,2 \times 10^{-4}t)}{t^{\frac{3}{2}}} - \frac{0,0777817}{\sqrt{t}} \right)}{\sqrt{\pi}} + \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{2 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^{-4}t+y)^2}{t} \right] \left(\frac{0,0777817}{\sqrt{t}} - \frac{176,777(2,2 \times 10^{-4}t+y)}{t^{\frac{3}{2}}} \right)}{\sqrt{\pi}} \right] \right\} + \\ & + \mathcal{B}^{n+1} \left\{ \frac{1}{2} (T_C - T_I) \left[27,5 \exp(27,5y) \operatorname{erfc} \left(\frac{353,553(2,2 \times 10^{-4}t+y)}{\sqrt{t}} \right) + \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{398,942 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^{-4}t)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} - \frac{398,942 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^{-4}t+y)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.19)$$

resultando nos seguintes coeficientes:

$$a_S = \mathcal{B}^{n+1} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right), \quad (4.20a)$$

$$a_N = 0, \quad (4.20b)$$

$$a_P = a_S + \mathcal{A}^{n+1} \mathcal{F}^{n+1}, \quad (4.20c)$$

$$b_P = \mathcal{A}^{n+1} T_P^n + \mathcal{F}^{n+1} \Delta t. \quad (4.20d)$$

No caso de usar $\theta = 1$, a Eq. (4.7) resulta em:

$$U_P^{n+1} = \left[\frac{\rho_\sigma}{\rho_\sigma - \Delta t \frac{dm}{dt}} \right] \left[U_P^n - \frac{u_a \rho_a}{\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_P^{n+1} + \frac{u_a \rho_a}{\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_S^{n+1} + \frac{0,6 \Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right]. \quad (4.21)$$

4.1.3 UDS com Formulação Crank-Nicolson (UDS - Crank-Nicolson)

No caso de usar $\theta = 0,5$, a Eq. (4.2) resulta em:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) + \mathcal{A}^{CN} \right] T_P^{n+1} = & \left[\mathcal{A}^{CN} - \frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] T_P^n + \\ & + \frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^{n+1} + \frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^n + \mathcal{F}^{CN} \Delta t, \end{aligned} \quad (4.22)$$

onde:

$$\mathcal{A}^{CN} = \rho_\sigma \left[c_g + c_W \frac{1}{2} (U_P^{n+1} + U_P^n) \right] + \epsilon \rho_a \left[c_a + \frac{1}{2} (R_P^{n+1} + R_P^n) \left(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T} \right) \right], \quad (4.23)$$

$$\mathcal{B}^{CN} = u_a \rho_a \left[c_a + \frac{1}{2} (R_P^{n+1} + R_P^n) \left(c_W + \frac{\partial h_v}{\partial T} \right) \right], \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{CN} = \mathcal{A}^{CN} \left\{ \frac{1}{2} (T_C - T_I) \left[- \frac{2 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^4 t)^2}{t} \right] \left(- \frac{176,777(y-2,2 \times 10^{-4} t)}{t^{\frac{3}{2}}} - \frac{0,0777817}{\sqrt{t}} \right)}{\sqrt{\pi}} \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{2 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^4 t + y)^2}{t} \right] \left(\frac{0,0777817}{\sqrt{t}} - \frac{176,777(2,2 \times 10^{-4} t + y)}{t^{\frac{3}{2}}} \right)}{\sqrt{\pi}} \right] \right\} + \\ + \mathcal{B}^{CN} \left\{ \frac{1}{2} (T_C - T_I) \left[27,5 \exp(27,5y) \operatorname{erfc} \left(\frac{353,553(2,2 \times 10^{-4} t + y)}{\sqrt{t}} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{398,942 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^{-4} t)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} - \frac{398,942 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^{-4} t + y)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.25)$$

resultando nos seguintes coeficientes:

$$a_S = \frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right), \quad (4.26a)$$

$$a_N = 0, \quad (4.26b)$$

$$a_P = a_S + \mathcal{A}^{CN}, \quad (4.26c)$$

$$b_P = \left[\mathcal{A}^{CN} - \frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] T_P^n + \frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^n + \mathcal{F}^{CN} \Delta t. \quad (4.26d)$$

No caso de usar $\theta = 0,5$, a Eq. (4.7) resulta em:

$$U_P^{n+1} = \left[\frac{2\rho_\sigma}{2\rho_\sigma - \Delta t \frac{dm}{dt}} \right] \left[\left(1 + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{2\rho_\sigma} \right) U_P^n - \frac{u_a \rho_a}{2\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) (R_P^{n+1} + R_P^n) + \right. \\ \left. + \frac{u_a \rho_a}{2\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) (R_S^{n+1} + R_S^n) + \frac{0,6 \Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right]. \quad (4.27)$$

4.2 Esquema com Diferença Central (CDS)

Aproximando a derivada espacial de T por CDS (Eq. (2.17)) e a derivada temporal de T utilizando a Eq. (2.10), tem-se a discretização da Eq. (3.30):

$$\mathcal{A}^\theta \left[\frac{T_P^{n+1} - T_P^n}{\Delta t} \right] = -\mathcal{B}^\theta \left[\frac{T_N^\theta - T_S^\theta}{2\Delta y} \right] + \mathcal{F}^\theta, \quad (4.28)$$

$$\mathcal{A}^\theta T_P^{n+1} = \mathcal{A}^\theta T_P^n - \frac{\mathcal{B}^\theta}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_N^\theta + \frac{\mathcal{B}^\theta}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^\theta + \mathcal{F}^\theta \Delta t, \quad (4.29)$$

onde \mathcal{A}^θ , \mathcal{B}^θ e \mathcal{F}^θ , são definidos da mesma forma que as Eqs. (4.3), (4.4) e (4.5), respectivamente.

Aproximando a derivada espacial de R por CDS (Eq. (2.17)) e a derivada temporal de U utilizando a Eq. (2.10), tem-se a discretização da Eq. (3.2):

$$\rho_\sigma \left[\frac{U_P^{n+1} - U_P^n}{\Delta t} \right] = -u_a \rho_a \left[\frac{R_N^\theta - R_S^\theta}{2\Delta y} \right] + \frac{dm}{dt} (0,6 + U_P^\theta), \quad (4.30)$$

$$U_P^{n+1} = U_P^n - \frac{u_a \rho_a}{2\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_N^\theta + \frac{u_a \rho_a}{2\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_S^\theta + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} U_P^\theta + 0,6 \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma}. \quad (4.31)$$

As condições de contorno de Neumann, Eqs. (3.18) e (3.19), podem ser aproximadas por CDS utilizando a técnica de ponto fictício (MALISKA, 2004), dessa forma a temperatura T e a umidade U em $y = L$ podem ser calculadas, respectivamente, por

$$T_{NC}^{n+1} = T_{NC}^n + \frac{\mathcal{F}^\theta \Delta t}{\mathcal{A}^\theta}, \quad (4.32)$$

$$U_{NC}^{n+1} = U_{NC}^n + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} U_P^\theta + 0,6 \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma}. \quad (4.33)$$

4.2.1 CDS com Formulação Explícita (CDS - Explícito)

No caso de se usar $\theta = 0$, a Eq. (4.29) resulta em:

$$\mathcal{A}^n T_P^{n+1} = \mathcal{A}^n T_P^n - \frac{\mathcal{B}^n}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_N^n + \frac{\mathcal{B}^n}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^n + \mathcal{F}^n \Delta t, \quad (4.34)$$

onde \mathcal{A}^n , \mathcal{B}^n e \mathcal{F}^n podem ser calculados através das Eqs. (4.11), (4.12) e (4.13), respectivamente.

Resultando nos seguintes coeficientes:

$$a_S = 0, \quad (4.35a)$$

$$a_N = 0, \quad (4.35b)$$

$$a_P = \mathcal{A}^n, \quad (4.35c)$$

$$b_P = \mathcal{A}^n T_P^n - \frac{\mathcal{B}^n}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_N^n + \frac{\mathcal{B}^n}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^n + \mathcal{F}^n \Delta t. \quad (4.35d)$$

No caso de usar $\theta = 0$, a Eq. (4.31) resulta em:

$$U_P^{n+1} = \left[1 + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right] U_P^n - \frac{u_a \rho_a}{2 \rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_N^n + \frac{u_a \rho_a}{2 \rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_S^n + 0,6 \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma}, \quad (4.36)$$

e no contorno ($y = L$), a temperatura e a umidade são obtidas, respectivamente, por

$$T_{NC}^{n+1} = T_{NC}^n + \frac{\mathcal{F}^n \Delta t}{\mathcal{A}^n}, \quad (4.37)$$

$$U_{NC}^{n+1} = \left[1 + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right] U_{NC}^n + 0,6 \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma}. \quad (4.38)$$

4.2.2 CDS com Formulação Implícita (CDS - Implícito)

No caso de se usar $\theta = 1$, a Eq. (4.29) resulta em:

$$\mathcal{A}^{n+1} T_P^{n+1} = \mathcal{A}^{n+1} T_P^n - \frac{\mathcal{B}^{n+1}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_N^{n+1} + \frac{\mathcal{B}^{n+1}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^{n+1} + \mathcal{F}^{n+1} \Delta t, \quad (4.39)$$

onde \mathcal{A}^{n+1} , \mathcal{B}^{n+1} e \mathcal{F}^{n+1} podem ser calculados através das Eqs. (4.17), (4.18) e (4.19), respectivamente.

Resultando nos seguintes coeficientes:

$$a_S = \frac{\mathcal{B}^{n+1}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right), \quad (4.40a)$$

$$a_N = -\frac{\mathcal{B}^{n+1}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right), \quad (4.40b)$$

$$a_P = \mathcal{A}^{n+1}, \quad (4.40c)$$

$$b_P = \mathcal{A}^{n+1} T_P^n + \mathcal{F}^{n+1} \Delta t. \quad (4.40d)$$

No caso de usar $\theta = 1$, a Eq. (4.31) resulta em:

$$U_P^{n+1} = \left[\frac{\rho_\sigma}{\rho_\sigma - \Delta t \frac{dm}{dt}} \right] \left[U_P^n - \frac{u_a \rho_a}{2 \rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_N^{n+1} + \frac{u_a \rho_a}{2 \rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_S^{n+1} + 0,6 \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right], \quad (4.41)$$

e no contorno ($y = L$), a temperatura e a umidade são obtidas, respectivamente, por

$$T_{NC}^{n+1} = T_{NC}^n + \frac{\mathcal{F}^{n+1} \Delta t}{\mathcal{A}^{n+1}}, \quad (4.42)$$

$$U_{NC}^{n+1} = \left[\frac{\rho_\sigma}{\rho_\sigma - \Delta t \frac{dm}{dt}} \right] \left[U_{NC}^n + 0,6 \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right]. \quad (4.43)$$

4.2.3 CDS com Formulação Crank-Nicolson (CDS - Crank-Nicolson)

No caso de usar $\theta = 0,5$, a Eq. (4.29) resulta em:

$$\mathcal{A}^{CN} T_P^{n+1} = \mathcal{A}^{CN} T_P^n - \frac{\mathcal{B}^{CN}}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) (T_N^{n+1} + T_N^n) + \frac{\mathcal{B}^{CN}}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) (T_S^{n+1} + T_S^n) + \mathcal{F}^{CN} \Delta t, \quad (4.44)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{CN} T_P^{n+1} = \mathcal{A}^{CN} T_P^n - \frac{\mathcal{B}^{CN}}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_N^{n+1} + \frac{\mathcal{B}^{CN}}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^{n+1} - \frac{\mathcal{B}^{CN}}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_N^n + \\ + \frac{\mathcal{B}^{CN}}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^n + \mathcal{F}^{CN} \Delta t, \end{aligned} \quad (4.45)$$

onde \mathcal{A}^{CN} , \mathcal{B}^{CN} e \mathcal{F}^{CN} podem ser calculados através das Eqs. (4.23), (4.24) e (4.25), respectivamente.

Resultando nos seguintes coeficientes:

$$a_S = \frac{\mathcal{B}^{CN}}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right), \quad (4.46a)$$

$$a_N = -\frac{\mathcal{B}^{CN}}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right), \quad (4.46b)$$

$$a_P = \mathcal{A}^{CN}, \quad (4.46c)$$

$$b_P = \mathcal{A}^{CN} T_P^n - \frac{\mathcal{B}^{CN}}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_N^n + \frac{\mathcal{B}^{CN}}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^n + \mathcal{F}^{CN} \Delta t. \quad (4.46d)$$

No caso de usar $\theta = 0,5$, a Eq. (4.31) resultam em:

$$U_P^{n+1} = \left[\frac{2\rho_\sigma}{2\rho_\sigma - \Delta t \frac{dm}{dt}} \right] \left[\left[1 + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{2\rho_\sigma} \right] U_P^n - \frac{u_a \rho_a}{4\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) (R_N^{n+1} + R_N^n) + \right. \\ \left. + \frac{u_a \rho_a}{4\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) (R_S^{n+1} + R_S^n) + \frac{0,6\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right], \quad (4.47)$$

e no contorno ($y = L$), a temperatura e a umidade são obtidas, respectivamente, por

$$T_{NC}^{n+1} = T_{NC}^n + \frac{\mathcal{F}^{CN} \Delta t}{\mathcal{A}^{CN}}, \quad (4.48)$$

$$U_{NC}^{n+1} = \left[\frac{2\rho_\sigma}{2\rho_\sigma - \Delta t \frac{dm}{dt}} \right] \left[\left[1 + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{2\rho_\sigma} \right] U_{NC}^n + \frac{0,6\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right]. \quad (4.49)$$

4.3 UDS com Correção Adiada (UDS-C)

Aproximando a derivada espacial de T por UDS-C (Eq. (2.23)) e a derivada temporal de T utilizando a Eq. (2.10), tem-se a discretização da Eq. (3.30):

$$\mathcal{A}^\theta \left[\frac{T_P^{n+1} - T_P^n}{\Delta t} \right] = -\mathcal{B}^\theta \left[\frac{T_P^\theta - T_S^\theta}{\Delta y} + \beta \left[\frac{T_S^* - 2T_P^* + T_N^*}{2\Delta y} \right] \right] + \mathcal{F}^\theta, \quad (4.50)$$

$$\mathcal{A}^\theta T_P^{n+1} = \mathcal{A}^\theta T_P^n - \mathcal{B}^\theta \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_P^\theta + \mathcal{B}^\theta \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^\theta - \frac{\mathcal{B}^\theta \beta}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) [T_S^* - 2T_P^* + T_N^*] + \mathcal{F}^\theta \Delta t, \quad (4.51)$$

onde \mathcal{A}^θ , \mathcal{B}^θ e \mathcal{F}^θ são definidos da mesma forma que as Eqs. (4.3), (4.4) e (4.5), respectivamente.

Aproximando a derivada espacial de R por UDS-C (Eq. (2.23)) e a derivada temporal de U utilizando a Eq. (2.10), tem-se a discretização da Eq. (3.2):

$$\rho_\sigma \left[\frac{U_P^{n+1} - U_P^n}{\Delta t} \right] = -u_a \rho_a \left[\frac{R_P^\theta - R_S^\theta}{\Delta y} + \beta \left[\frac{R_S^* - 2R_P^* + R_N^*}{2\Delta y} \right] \right] + \frac{dm}{dt} (0,6 + U_P^\theta), \quad (4.52)$$

$$\begin{aligned} U_P^{n+1} = U_P^n - \frac{u_a \rho_a}{\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_P^\theta + \frac{u_a \rho_a}{\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_S^\theta - \frac{u_a \rho_a \beta}{2\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) [R_S^* - 2R_P^* + R_N^*] + \\ + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} U_P^\theta + \frac{0,6 \Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma}. \end{aligned} \quad (4.53)$$

As condições de contorno de Neumann, Eqs. (3.18) e (3.19), podem ser aproximadas utilizando as Eqs. (4.8) e (4.9).

4.3.1 UDS-C com Formulação Explícita (UDS-C - Explícito)

No caso de se usar $\theta = 0$, a Eq. (4.51) resulta em:

$$\mathcal{A}^n T_P^{n+1} = \left[\mathcal{A}^n - \mathcal{B}^n \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] T_P^n + \mathcal{B}^n \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^n - \frac{\mathcal{B}^n \beta}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) [T_S^* - 2T_P^* + T_N^*] + \mathcal{F}^n \Delta t, \quad (4.54)$$

onde \mathcal{A}^n , \mathcal{B}^n , \mathcal{F}^n podem ser calculados através das Eqs. (4.11, 4.12 e 4.13), respectivamente.

Resultando nos seguintes coeficientes:

$$a_S = 0, \quad (4.55a)$$

$$a_N = 0, \quad (4.55b)$$

$$a_P = \mathcal{A}^n, \quad (4.55c)$$

$$b_P = \left[\mathcal{A}^n - \mathcal{B}^n \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] T_P^n + \mathcal{B}^n \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^n - \frac{\mathcal{B}^n \beta}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) [T_S^* - 2T_P^* + T_N^*] + \mathcal{F}^n \Delta t. \quad (4.55d)$$

No caso de usar $\theta = 0$, a Eq. (4.53) resulta em:

$$\begin{aligned} U_P^{n+1} = \left[1 + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right] U_P^n - \frac{u_a \rho_a}{\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_P^n + \frac{u_a \rho_a}{\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_S^n + \\ - \frac{u_a \rho_a \beta}{2\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) [R_S^* - 2R_P^* + R_N^*] + \frac{0,6 \Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

4.3.2 UDS-C com Formulação Implícita (UDS-C - Implícito)

No caso de usar $\theta = 1$, a Eq. (4.51) resulta em:

$$\left[\mathcal{B}^{n+1} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) + \mathcal{A}^{n+1} \right] T_P^{n+1} = \mathcal{A}^{n+1} T_P^n + \mathcal{B}^{n+1} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^n$$

$$-\frac{\mathcal{B}^{n+1}\beta}{2}\left(\frac{\Delta t}{\Delta y}\right)\left[T_S^* - 2T_P^* + T_N^*\right] + \mathcal{F}^{n+1}\Delta t, \quad (4.57)$$

onde \mathcal{A}^{n+1} , \mathcal{B}^{n+1} e \mathcal{F}^{n+1} podem ser calculados através das Eqs. (4.17), (4.18) e (4.19), respectivamente.

Resultando nos seguintes coeficientes:

$$a_S = \mathcal{B}^{n+1}\left(\frac{\Delta t}{\Delta y}\right), \quad (4.58a)$$

$$a_N = 0, \quad (4.58b)$$

$$a_P = a_S + \mathcal{A}^{n+1}, \quad (4.58c)$$

$$b_P = \mathcal{A}^{n+1}T_P^n - \frac{\mathcal{B}^{n+1}\beta}{2}\left(\frac{\Delta t}{\Delta y}\right)\left[T_S^* - 2T_P^* + T_N^*\right] + \mathcal{F}^{n+1}\Delta t. \quad (4.58d)$$

No caso de usar $\theta = 1$, a Eq. (4.53) resulta em:

$$U_P^{n+1} = \left[\frac{\rho_\sigma}{\rho_\sigma - \Delta t \frac{dm}{dt}} \right] \left[U_P^n - \frac{u_a \rho_a}{\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_P^{n+1} + \frac{u_a \rho_a}{\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) R_S^{n+1} + \right. \\ \left. - \frac{u_a \rho_a \beta}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \left[R_S^* - 2R_P^* + R_N^* \right] + \frac{0,6 \Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right]. \quad (4.59)$$

4.3.3 UDS-C com Formulação Crank-Nicolson (UDS-C - Crank-Nicolson)

No caso de usar $\theta = 0,5$, a Eq. (4.51) resulta em:

$$\left[\frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) + \mathcal{A}^{CN} \right] T_P^{n+1} = \left[\mathcal{A}^{CN} - \frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] T_P^n + \frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^{n+1} + \frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^n + \\ - \frac{\mathcal{B}^{CN}\beta}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \left[T_S^* - 2T_P^* + T_N^* \right] + \mathcal{F}^{CN} \Delta t, \quad (4.60)$$

onde \mathcal{A}^{CN} , \mathcal{B}^{CN} e \mathcal{F}^{CN} podem ser calculados através das Eqs. (4.23), (4.24) e (4.25), respectivamente.

Resultando nos seguintes coeficientes:

$$a_S = \frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right), \quad (4.61a)$$

$$a_N = 0, \quad (4.61b)$$

$$a_P = \left[\frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) + \mathcal{A}^{CN} \right], \quad (4.61c)$$

$$b_P = \left[\mathcal{A}^{CN} - \frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] T_P^n + \frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^n - \frac{\mathcal{B}^{CN}\beta}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \left[T_S^* - 2T_P^* + T_N^* \right] + \mathcal{F}^{CN} \Delta t. \quad (4.61d)$$

No caso de usar $\theta = 0,5$, a Eq. (4.53) resulta em:

$$U_P^{n+1} = \left[\frac{2\rho_\sigma}{2\rho_\sigma - \Delta t \frac{dm}{dt}} \right] \left[\left[1 + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{2\rho_\sigma} \right] U_P^n - \frac{u_a \rho_a}{2\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) (R_P^{n+1} + R_P^n) + \right. \\ \left. + \frac{u_a \rho_a}{2\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) (R_S^{n+1} + R_S^n) - \frac{u_a \rho_a \beta}{2} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) [R_S^* - 2R_P^* + R_N^*] + \frac{0,6 \Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right]. \quad (4.62)$$

4.4 Esquema de Roberts e Weiss (RWS)

Aproximando a derivada espacial de T com a Eq. (2.26) e a derivada temporal de T pela Eq. (2.10), tem-se a discretização da Eq. (3.30):

$$\mathcal{A}^{CN} \left[\frac{T_P^{n+1} - T_P^n}{\Delta t} \right] = -\frac{\mathcal{B}^{CN}}{2} \left[\frac{T_P^{n+1} - T_S^{n+1}}{\Delta y} + \frac{T_N^n - T_P^n}{\Delta y} \right] + \mathcal{F}^{CN}, \quad (4.63)$$

$$\left[2\mathcal{A}^{CN} + \frac{\mathcal{B}^{CN} \Delta t}{\Delta y} \right] T_P^{n+1} = \left[2\mathcal{A}^{CN} + \frac{\mathcal{B}^{CN} \Delta t}{\Delta y} \right] T_P^n + \left(\frac{\mathcal{B}^{CN} \Delta t}{\Delta y} \right) T_S^{n+1} - \left(\frac{\mathcal{B}^{CN} \Delta t}{\Delta y} \right) T_N^n + 2\mathcal{F}^{CN} \Delta t, \quad (4.64)$$

onde \mathcal{A}^{CN} , \mathcal{B}^{CN} e \mathcal{F}^{CN} são definidos da mesma forma que nas Eqs. (4.23), (4.24) e (4.25), respectivamente.

Resultando nos seguintes coeficientes:

$$a_S = \frac{\mathcal{B}^{CN} \Delta t}{\Delta y}, \quad (4.65a)$$

$$a_N = 0, \quad (4.65b)$$

$$a_P = 2\mathcal{A}^{CN} + a_S, \quad (4.65c)$$

$$b_P = \left[2\mathcal{A}^{CN} + \frac{\mathcal{B}^{CN} \Delta t}{\Delta y} \right] T_P^n - \left(\frac{\mathcal{B}^{CN} \Delta t}{\Delta y} \right) T_N^n + 2\mathcal{F}^{CN} \Delta t. \quad (4.65d)$$

Aproximando a derivada espacial de R pela Eq. (2.26) e a derivada temporal de U pela Eq. (2.10), tem-se a discretização da Eq. (3.2):

$$\rho_\sigma \left[\frac{U_P^{n+1} - U_P^n}{\Delta t} \right] = -\frac{u_a \rho_a}{2} \left[\frac{R_P^{n+1} - R_S^{n+1}}{\Delta y} + \frac{R_N^n - R_P^n}{\Delta y} \right] + 0,6 \frac{dm}{dt} + \frac{1}{2} \frac{dm}{dt} (U_P^{n+1} + U_P^n), \quad (4.66)$$

$$U_P^{n+1} = \left[\frac{2\rho_\sigma}{2\rho_\sigma - \Delta t \frac{dm}{dt}} \right] \left[\left[1 + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{2\rho_\sigma} \right] U_P^n +, \right. \\ \left. - \frac{u_a \rho_a}{2\rho_\sigma} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) (R_P^{n+1} - R_S^{n+1} + R_N^n - R_P^n) + \frac{0,6 \Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right]. \quad (4.67)$$

As condições de contorno de Neumann, Eqs. (3.18) e (3.19), podem ser aproximadas utilizando a técnica de ponto fictício (MALISKA, 2004), dessa forma a temperatura T e a umidade U em $y = L$ podem ser calculadas pelas Eqs. (4.48) e (4.49), respectivamente.

4.5 Esquema de Leith (LS)

Aproximando a derivada espacial de T com a Eq. (2.29) e a derivada temporal de T pela Eq. (2.10), tem-se a discretização da Eq. (3.30):

$$\left[\frac{T_P^{n+1} - T_P^n}{\Delta t} \right] = -\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \left(\left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \right) \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \left[\frac{T_P^n - T_S^n}{\Delta y} \right] + \left[1 - \left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \right) \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] \left[\frac{T_N^n - T_S^n}{2\Delta y} \right] \right) + \frac{\mathcal{F}^n}{\mathcal{A}^n}, \quad (4.68)$$

ou ainda,

$$\left[\frac{T_P^{n+1} - T_P^n}{\Delta t} \right] = -\left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \right)^2 \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \left[\frac{T_P^n - T_S^n}{\Delta y} \right] - \left[\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} - \left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \right)^2 \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] \left[\frac{T_N^n - T_S^n}{2\Delta y} \right] + \frac{\mathcal{F}^n}{\mathcal{A}^n}, \quad (4.69)$$

ou ainda,

$$T_P^{n+1} - T_P^n = -\left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 [T_P^n - T_S^n] - \left[\frac{1}{2} \frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 \right] [T_N^n - T_S^n] + \Delta t \frac{\mathcal{F}^n}{\mathcal{A}^n}, \quad (4.70)$$

e, finalmente,

$$T_P^{n+1} = \left[1 - \left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 \right] T_P^n + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 + \left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] T_S^n + \\ + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 - \left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] T_N^n + \Delta t \frac{\mathcal{F}^n}{\mathcal{A}^n}, \quad (4.71)$$

resultando nos seguintes coeficientes:

$$a_S = 0, \quad (4.72a)$$

$$a_N = 0, \quad (4.72b)$$

$$a_P = 1, \quad (4.72c)$$

$$b_P = \left[1 - \left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 \right] T_P^n + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 + \left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] T_S^n + \\ + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 - \left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] T_N^n + \Delta t \frac{\mathcal{F}^n}{\mathcal{A}^n}. \quad (4.72d)$$

O mesmo trabalho pode ser feito na Eq. (3.2), resultando na seguinte discretização:

$$U_P^{n+1} = \left[\frac{2\rho_\sigma}{2\rho_\sigma - \frac{dm}{dt}\Delta t} \right] \left[\left[1 + \frac{\frac{dm}{dt}\Delta t}{2\rho_\sigma} \right] U_P^n + \left[- \left(\frac{u_a\rho_a}{\rho_\sigma} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 \right] R_P^n + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{u_a\rho_a}{\rho_\sigma} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 + \left(\frac{u_a\rho_a}{\rho_\sigma} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] R_S^n + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{u_a\rho_a}{\rho_\sigma} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 - \left(\frac{u_a\rho_a}{\rho_\sigma} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] R_N^n + \frac{0,6\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right]. \quad (4.73)$$

As condições de contorno de Neumann, Eqs. (3.18) e (3.19) podem ser aproximadas utilizando a técnica de ponto fictício (MALISKA, 2004), dessa forma a temperatura T e a umidade U em $y = L$ podem ser calculadas pelas Eqs. (4.48) e (4.49), respectivamente.

4.6 Viscosidade Artificial

Neste trabalho, pretende-se utilizar a viscosidade artificial nos métodos de segunda ordem com o intuito de minimizar suas oscilações não-físicas. Conforme a TABELA 2, os métodos de segunda ordem são: CDS - Crank-Nicolson, RWS e LS. Portanto, pequenas alterações nos coeficientes devem ser feitas, basta adicionar a forma discretizada da viscosidade artificial (Eq. (2.42)) no termo fonte (b_P) dos métodos.

Para a aproximação CDS - Crank-Nicolson, as seguintes modificações devem ser feitas:

$$a_S = \frac{\mathcal{B}^{CN}}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right), \quad (4.74a)$$

$$a_N = -\frac{\mathcal{B}^{CN}}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right), \quad (4.74b)$$

$$a_P = \mathcal{A}^{CN}, \quad (4.74c)$$

$$b_P = \mathcal{A}^{CN} T_P^n - \frac{\mathcal{B}^{CN}}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_N^n + \frac{\mathcal{B}^{CN}}{4} \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_S^n + \mathcal{F}^{CN} \Delta t + \frac{D}{\Delta y} \left[\left| T_N^n - T_P^n \right| (T_N^n - T_P^n) - \left| T_P^n - T_S^n \right| (T_P^n - T_S^n) \right]. \quad (4.74d)$$

Para a aproximação RWS, as seguintes alterações devem ser feitas:

$$a_S = \frac{\mathcal{B}^{CN} \Delta t}{\Delta y}, \quad (4.75a)$$

$$a_N = 0, \quad (4.75b)$$

$$a_P = 2\mathcal{A}^{CN} + a_S, \quad (4.75c)$$

$$b_P = \left[2\mathcal{A}^{CN} + \frac{\mathcal{B}^{CN} \Delta t}{\Delta y} \right] T_P^n - \left(\frac{\mathcal{B}^{CN} \Delta t}{\Delta y} \right) T_N^n + 2\mathcal{F}^{CN} \Delta t + \frac{D}{\Delta y} \left[\left| T_N^n - T_P^n \right| (T_N^n - T_P^n) - \left| T_P^n - T_S^n \right| (T_P^n - T_S^n) \right]. \quad (4.75d)$$

Para a aproximação LS, as seguintes modificações devem ser feitas:

$$a_S = 0, \quad (4.76a)$$

$$a_N = 0, \quad (4.76b)$$

$$a_P = 1, \quad (4.76c)$$

$$\begin{aligned} b_P = & \left[1 - \left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 \right] T_P^n + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 + \left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] T_S^n + \\ & + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right)^2 - \left(\frac{\mathcal{B}^n}{\mathcal{A}^n} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) \right] T_N^n + \Delta t \frac{\mathcal{F}^n}{\mathcal{A}^n} \\ & + \frac{D}{\Delta y} \left[\left| T_N^n - T_P^n \right| (T_N^n - T_P^n) - \left| T_P^n - T_S^n \right| (T_P^n - T_S^n) \right]. \end{aligned} \quad (4.76d)$$

4.7 Algoritmo Base para a Implementação Computacional

Os passos básicos do algoritmo utilizado neste trabalho, para a implementação computacional do problema, são descritos no Algoritmo 1. Tal algoritmo leva em consideração a aproximação LS (e que aqui será indicada por LS em vermelho nos pontos específicos no algoritmo), mas para as demais discretizações, basta fazer uma pequena adaptação.

Algoritmo 1: CÁLCULO DA TEMPERATURA E UMIDADE - (LS)

Entrada: $u_a, c_W, c_a, Q_r, \epsilon, \rho_\sigma, c_g, A, B, C, u_r, u_i, P_{atm}, T_C, T_I, L, t_f, N_y, N_t$

Calcula-se os valores de Δy e Δt . [Eqs. (2.1) e (2.2)]

Inicializa-se $T(1 : N_y, 1 : N_t)$, $U(1 : N_y, 1 : N_t)$ e $R(1 : N_y, 1 : N_t)$.

for $(n = 1)$ e $(i = 1 : N_y)$ **do**

- $T(i, 1) = T_I$ [Eq. (3.12)]
- $U(i, 1) = U_I$ [Eq. (3.13)]

for $(i = 1 : N_y)$ e $(n = 1)$ **do**

- Calcula-se a pressão de vapor de saturação (p_s). [Eq. (3.10)]
- Calcula-se a umidade relativa de equilíbrio (r_u). [Eq. (3.11)]
- Calcula-se a razão de mistura inicial $R(i, 1)$. [Eq. (3.9)]

for $(n = 2 : N_t)$ e $(i = 1 : N_y)$ **do**

- if** $(i = 1)$ **then**
 - Calcula-se a densidade do ar (ρ_a). [Eq. (3.5)]
 - Calcula-se a umidade relativa do ar de aeração (r_a). [Eq. (3.16)]
 - Calcula-se a pressão de vapor de saturação (utilizando r_a) (p_{sa}). [Eq. (3.10)]
 - Calcula-se a razão de mistura em $y = 0$ ($R(1, n)$). [Eq. (3.17)]
 - Calcula-se a umidade em $y = 0$ ($U(1, n)$). [Eq. (3.15)]
 - Calcula-se a temperatura em $y = 0$ ($T(1, n)$). [Eq. (3.14)]
- for** $(i = 2 : N_y - 1)$ **do**
 - Calcula-se a perda de matéria seca em relação ao tempo ($\frac{dm}{dt}$). [Eq. (3.6)]
 - Calcula-se a pressão de vapor de saturação (p_s). [Eq. (3.10)]
 - Calcula-se a pressão de umidade relativa de equilíbrio (r_u). [Eq. (3.11)]
 - Calcula-se a razão de mistura ($R(i, n)$). [Eq. (3.9)]
 - Calcula-se a umidade ($U(i, n)$). [Eq. (4.73)] **LS**
 - Calcula-se a perda de matéria seca em relação ao tempo ($\frac{dm}{dt}$). [Eq. (3.6)]
 - Calcula-se entalpia específica de vaporização da água (h_v). [Eq. (3.4)]
 - Calcula-se a derivada da entalpia de vaporização da água em relação a temperatura ($\frac{\partial h_v}{\partial T}$). [Eq. (3.4)]^a
 - Calcula-se entalpia diferencial de sorção h_s . [Eq. (3.3)]
 - Calcula-se a temperatura ($T(i, n)$). [Eq. (4.71)] **LS**
- if** $(i = N_y)$ **then**
 - Calcula-se a pressão de vapor de saturação em $y = L$ (p_s). [Eq. (3.10)]
 - Calcula-se a umidade relativa de equilíbrio em $y = L$ (r_u). [Eq. (3.11)]
 - Calcula-se a razão de mistura em $y = L$ ($R(N_y, n)$). [Eq. (3.9)]
 - Calcula-se a umidade em $y = L$ ($U(N_y, n)$). [Eq. (4.49)] **LS**
 - Calcula-se a perda de matéria seca em relação ao tempo em $y = L$ ($\frac{dm}{dt}$). [Eq. (3.6)]
 - Calcula-se entalpia específica de vaporização da água em $y = L$ (h_v). [Eq. (3.4)]
 - Calcula-se entalpia diferencial de sorção em $y = L$ h_s . [Eq. (3.3)]
 - Calcula-se a temperatura em $y = L$ ($T(N_y, n)$). [Eq. (4.48)] **LS**

^a Corresponde a derivada da Eq. (3.4) em relação à temperatura.

5 RESULTADOS

Neste capítulo apresenta-se a verificação numérica de todos os métodos apresentados nos capítulos anteriores e efetua-se as comparações entre os métodos. Além disso, diversas simulações computacionais foram realizadas a fim de investigar as resoluções numéricas quando comparadas com a solução analítica proposta neste trabalho.

5.1 Verificação Numérica

Realizou-se a verificação dos modelos numéricos por meio de comparações das suas soluções e por meio da análise dos erros envolvidos, a qual, por sua vez, está associada principalmente ao monitoramento das ordens efetivas dos erros (ver seção 2.5), além da análise de seus decaimentos em relação ao refino de malha.

Para cada aproximação utilizada são apresentados os resultados referentes às ordens efetivas e os erros de discretização para a temperatura (T), nos seguintes pontos:

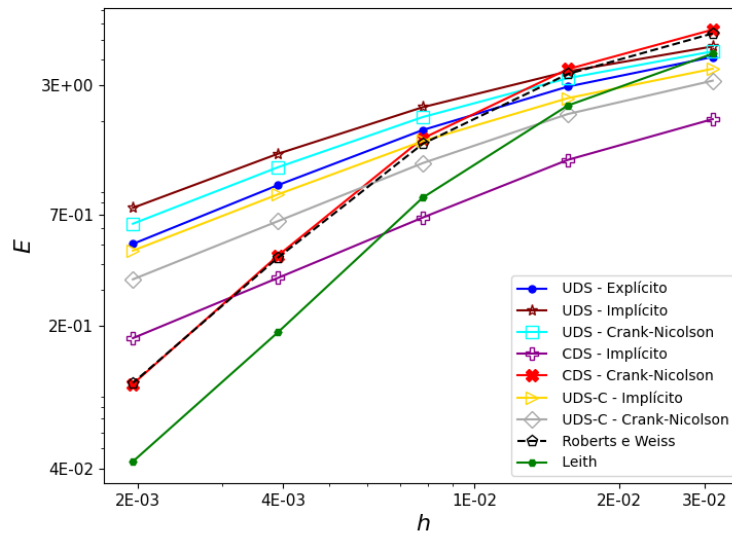
- $T_{0,15} = T(0,15; 450)$ - 0,15 m após 450 segundos;
- $T_{0,27} = T(0,27; 950)$ - 0,27 m após 950 segundos;
- $T_{0,40} = T(0,40; 1500)$ - 0,40 m após 1500 segundos.

Obteve-se resultados análogos para estes pontos pré-definidos utilizando-se outros tempos de simulação. Em todos os testes, calculou-se o tamanho representativo de malha, h , como $h = 2\Delta y = \Delta t$, onde Δy e Δt foram definidos, respectivamente, pelas Eqs. (2.1) e (2.2). Realizou-se os testes de verificação utilizando as seguintes malhas ($N_y \times N_t$): 32x64, 64x128, 128x256, 256x512 e 512x1024.

Segundo Dehghan (2005), a combinação da aproximação espacial CDS com a aproximação temporal explícita é instável para este tipo de problema, e esta combinação não tem utilidade prática. Sendo assim, os métodos CDS - Explícito e UDS-C - Explícito (combinação entre UDS - Explícito e CDS - Explícito) não foram utilizados.

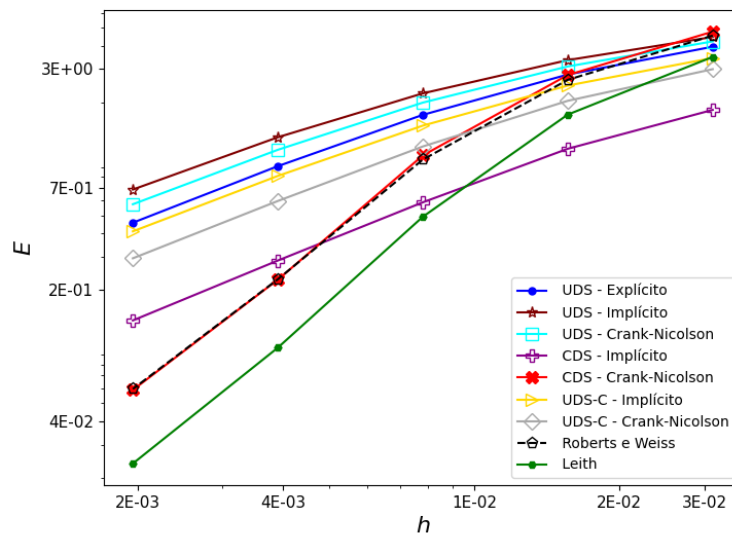
A seguir, os testes de verificação numérica são apresentados. Os comportamentos dos erros de discretização com o refino de malha, para todos os métodos utilizados em $T_{0,15}$, $T_{0,27}$ e $T_{0,40}$, podem ser analisados, respectivamente, nas FIGURAS 8, 9 e 10.

FIGURA 8 – DECAIMENTO DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM O REFINO DE MALHA PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES EM $T_{0,15}$.



FONTE: O autor(2022).

FIGURA 9 – DECAIMENTO DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM O REFINO DE MALHA PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES EM $T_{0,27}$.

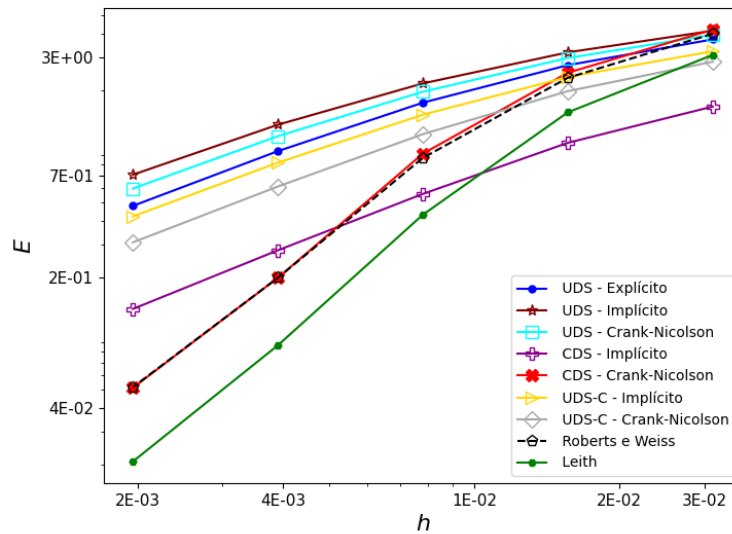


FONTE: O autor(2022).

Observa-se nas FIGURAS 8, 9 e 10 que, com o refinamento da malha, para todos os pontos em análise ($T_{0,15}$, $T_{0,27}$ e $T_{0,40}$), o erro de discretização diminuiu para todos os métodos em estudo.

Além disso, as inclinações das curvas dos métodos de primeira ordem são aproximadamente iguais, indicando que os erros decaem sob as mesmas taxas. É possível ver a diferença de inclinação entre as curvas das aproximações de primeira ordem e as curvas das aproxima-

FIGURA 10 – DECAIMENTO DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM O REFINO DE MALHA PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES EM $T_{0,40}$.

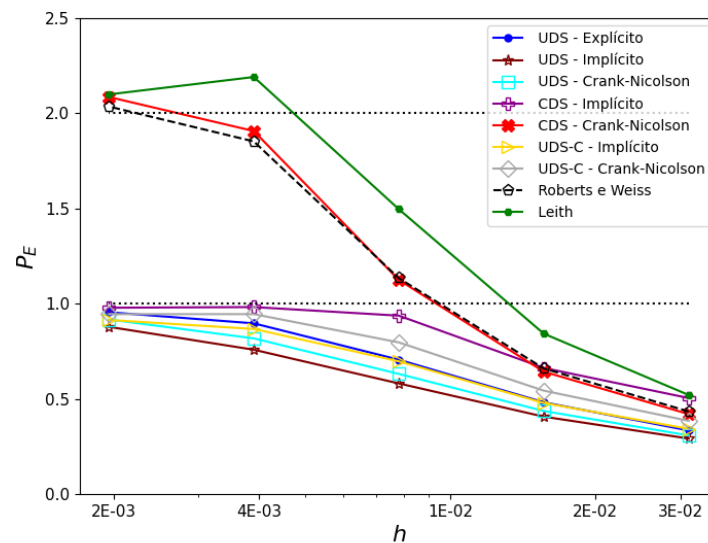


FONTE: O autor(2022).

ções de segunda ordem, indicando que os métodos de segunda ordem apresentam melhor desempenho, conforme esperado.

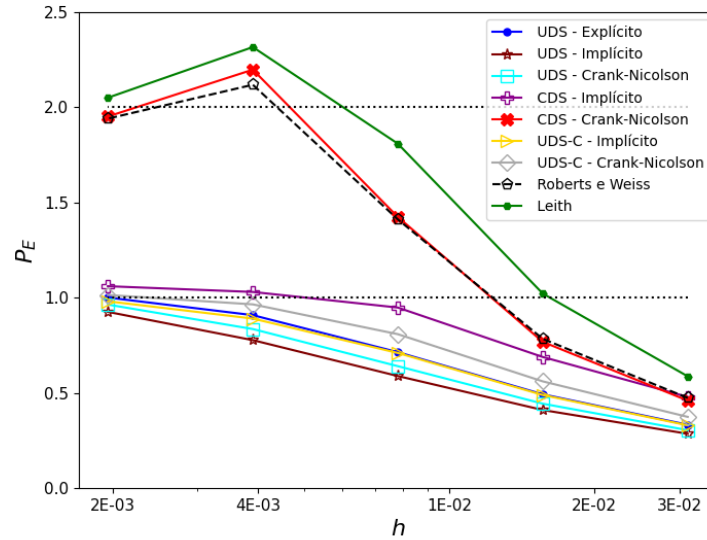
As FIGURAS 11, 12 e 13 ilustram, respectivamente, as ordens efetivas (p_E) com o refino de malha para todos os métodos em estudo nos pontos $T_{0,15}$, $T_{0,27}$ e $T_{0,40}$.

FIGURA 11 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM O REFINO DE MALHA EM $T_{0,15}$ PARA TODAS OS MÉTODOS EM ESTUDO.



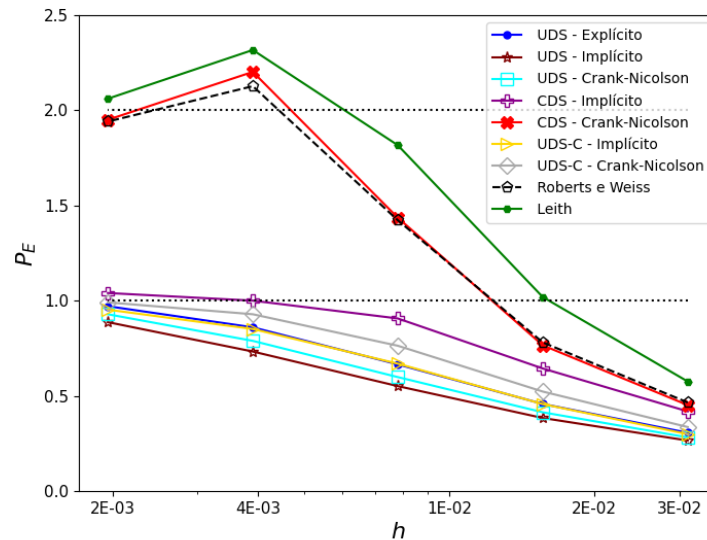
FONTE: O autor(2022).

FIGURA 12 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM O REFINO DE MALHA EM $T_{0,27}$ PARA TODAS OS MÉTODOS EM ESTUDO.



FONTE: O autor(2022).

FIGURA 13 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM O REFINO DE MALHA EM $T_{0,40}$ PARA TODAS OS MÉTODOS EM ESTUDO.



FONTE: O autor(2022).

A TABELA 7 apresenta as ordens efetivas (p_E), obtidas em uma malha de dimensão 512×1024 , ou seja, correspondem aos pontos com $h = 1/1024$ (a malha mais refinada) das FIGURAS 11, 12 e 13 comparadas com as respectivas ordens assintóticas (p_L) da TABELA 2.

TABELA 7 – ORDENS EFETIVAS DAS APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS UTILIZADAS.

Aproximação Numérica	$p_E(T_{0,15})$	$p_E(T_{0,27})$	$p_E(T_{0,40})$	p_L
UDS - Explícito	0,955131	1,000654	0,970914	1
UDS - Implícito	0,878338	0,925327	0,8871622	1
UDS - Crank-Nicolson	0,917002	0,963722	0,928635	1
CDS - Implícito	0,978672	1,060261	1,040256	1
CDS - Crank-Nicolson	2,085905	1,951828	1,950503	2
UDS-C Implícito ($\beta = \frac{1}{2}$)	0,914213	0,980993	0,952797	1
UDS-C Crank-Nicolson ($\beta = \frac{1}{2}$)	0,945063	1,014166	0,990999	1
Roberts e Weiss (RWS)	2,035717	1,940688	2,126867	2
Leith (LS)	2,099425	2,050493	2,061124	2

FONTE: O autor (2022).

Nota-se nas FIGURAS 11, 12 e 13 e na TABELA 7 que, com o refino de malha, as ordens efetivas de cada método tendem ao valor mostrado na TABELA 2, para todos os pontos em análise ($T_{0,15}$, $T_{0,27}$ e $T_{0,40}$), corroborando seus resultados.

5.2 Resultados Numéricos

As resoluções numéricas foram obtidas usando programas computacionais escritos em Fortran 95, usando o Microsoft Visual Studio Code v. 1.62.0 com precisão quádrupla e foram compilados em um computador com processador Intel Core i5 Quad-Core (3.4 GHz) com 8 GB DDR3 de memória RAM (1333 MHz) e uma placa de vídeo AMD Radeon 7850 2GB. Foram realizadas simulações variando o número de nós e passos no tempo para cada aproximação utilizada. Para calcular o erro entre as simulações numéricas e a solução analítica proposta, utilizou-se a norma L_2 do erro numérico, definida por

$$L_2(y) = \left\| T_{Num}^n(y) - T_{An}^n(y) \right\|_2, \quad (5.1)$$

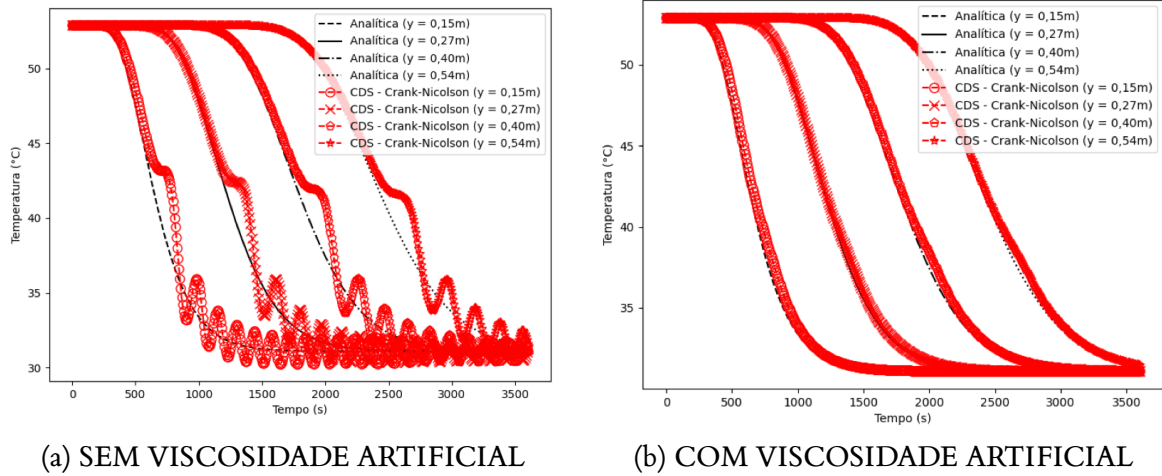
onde $\|\cdot\|_2$ representa a norma L_2 do erro para cada y fixo e n variando, $T_{Num}(y)$ e $T_{An}(y)$ representam as temperaturas obtidas numericamente e analiticamente, respectivamente. Nas próximas seções serão apresentadas as comparações entre os desempenhos dos métodos com o refinamento de malha quando comparados à solução analítica durante uma hora de aeração ($t_f = 3600s$).

5.2.1 Efeitos da Viscosidade Artificial

As FIGURAS 14, 15 e 16 e TABELAS 8, 9 e 10 mostram, com detalhes, o efeito do uso ou não da viscosidade artificial nos métodos de segunda ordem (CDS-Crank-Nicolson, RWS e LS).

As FIGURAS 14a e 14b mostram o comportamento da aproximação espacial CDS com a aproximação temporal Crank-Nicolson, respectivamente, sem a viscosidade artificial (Eq. (4.46d)) e com a utilização da viscosidade artificial (Eq. (4.74d)), utilizando-se $N_y = 256$ e $N_t = 512$.

FIGURA 14 – EFEITOS DA VISCOSIDADE ARTIFICIAL NO MÉTODO CDS - CRANK-NICOLSON.



Fonte: O autor (2022).

A TABELA 8 mostra a norma L_2 (Eq. (5.1)) aplicada aos pontos 0,15 m , 0,27 m , 0,40 m e 0,54 m do método CDS - Crank-Nicolson com e sem a utilização da viscosidade artificial.

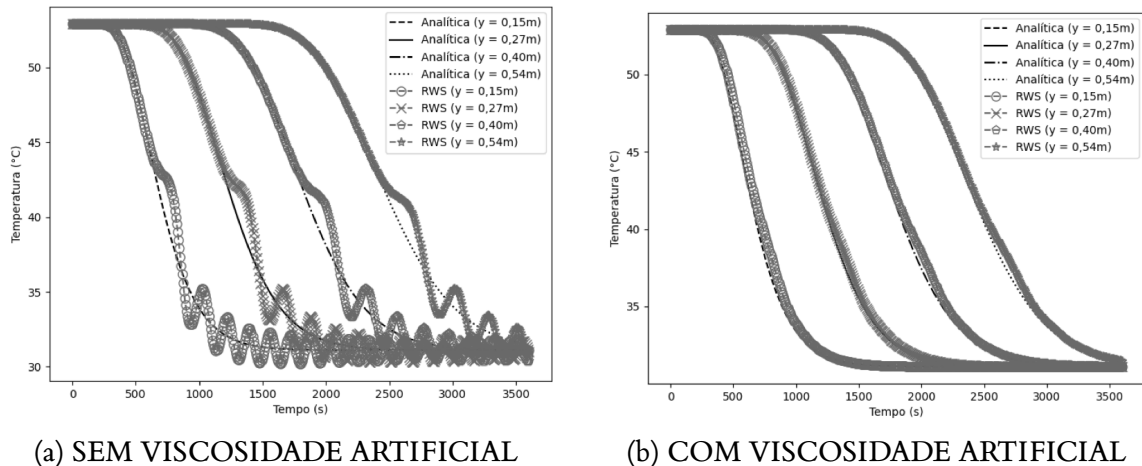
TABELA 8 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO A VISCOSIDADE ARTIFICIAL NO MÉTODO CDS - CRANK-NICOLSON E NÃO UTILIZANDO A VISCOSIDADE ARTIFICIAL COM $N_y = 256$ e $N_t = 512$.

CDS - Crank-Nicolson	0,15 m	0,27 m	0,40 m	0,54 m
SEM V. A.	0,46234E+02	0,37943E+02	0,33183E+02	0,29610E+02
COM V. A.	0,90104E+00	0,72498E+00	0,63062E+00	0,56777E+00

Fonte: O autor (2022).

As FIGURAS 15a e 15b mostram o comportamento do método RWS, respectivamente, sem a viscosidade artificial (Eq. (4.65d)) e com a utilização da viscosidade artificial (Eq. (4.75d)), utilizando-se $N_y = 256$ e $N_t = 512$.

FIGURA 15 – EFEITOS DA VISCOSIDADE ARTIFICIAL NO MÉTODO RWS.



Fonte: O autor (2022).

A TABELA 9 mostra a norma L_2 (Eq. (5.1)) aplicada aos pontos 0,15 m, 0,27 m, 0,40 m e 0,54 m do método RWS com e sem a utilização da viscosidade artificial.

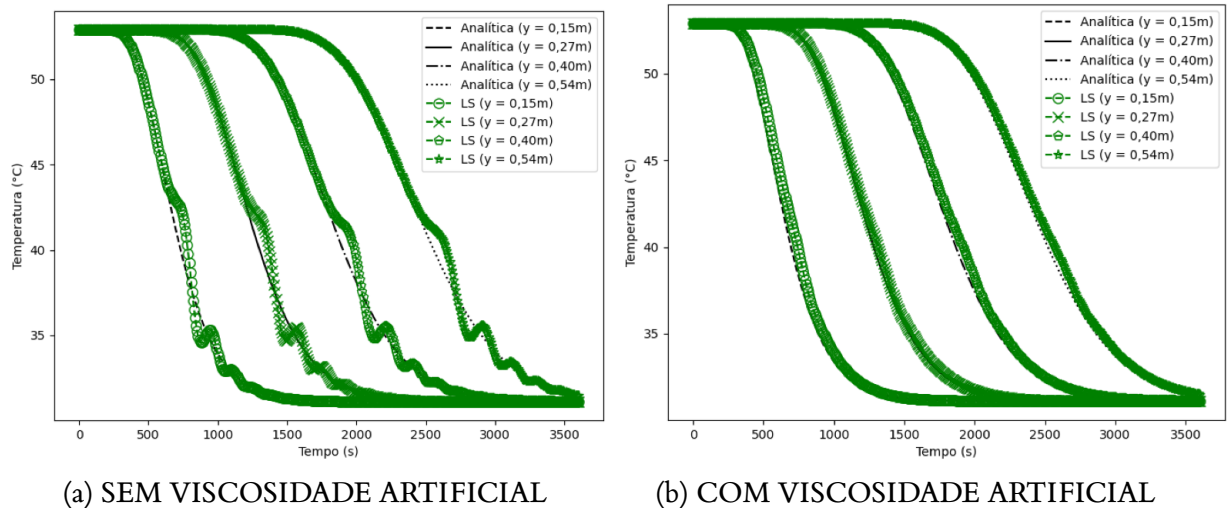
TABELA 9 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO A VISCOSIDADE ARTIFICIAL NO MÉTODO RWS E NÃO UTILIZANDO A VISCOSIDADE ARTIFICIAL COM $N_y = 256$ e $N_t = 512$.

RWS	0,15 m	0,27 m	0,40 m	0,54 m
SEM V. A.	0,39721E+02	0,32612E+02	0,28411E+02	0,25212E+02
COM V. A.	0,79835E+00	0,69449E+00	0,64035E+00	0,60269E+00

Fonte: O autor (2022).

As FIGURAS 16a e 16b mostram o comportamento do método LS, respectivamente, sem a viscosidade artificial (Eq. (4.72d)) e com a utilização da viscosidade artificial (Eq. (4.76d)), utilizando-se $N_y = 256$ e $N_t = 512$.

FIGURA 16 – EFEITOS DA VISCOSIDADE ARTIFICIAL NO MÉTODO LS



Fonte: O autor (2022).

A TABELA 10 mostra a norma L_2 (Eq. (5.1)) aplicada aos pontos 0,15 m, 0,27 m, 0,40 m e 0,54 m do método LS com e sem a utilização da viscosidade artificial.

TABELA 10 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO A VISCOSIDADE ARTIFICIAL NO MÉTODO LS E NÃO UTILIZANDO A VISCOSIDADE ARTIFICIAL COM $N_y = 256$ e $N_t = 512$.

LS	0,15 m	0,27 m	0,40 m	0,54 m
SEM V. A.	0,19426E+02	0,15137E+02	0,12822E+02	0,11252E+02
COM V. A.	0,38558E+00	0,27057E+00	0,21759E+00	0,18492E+00

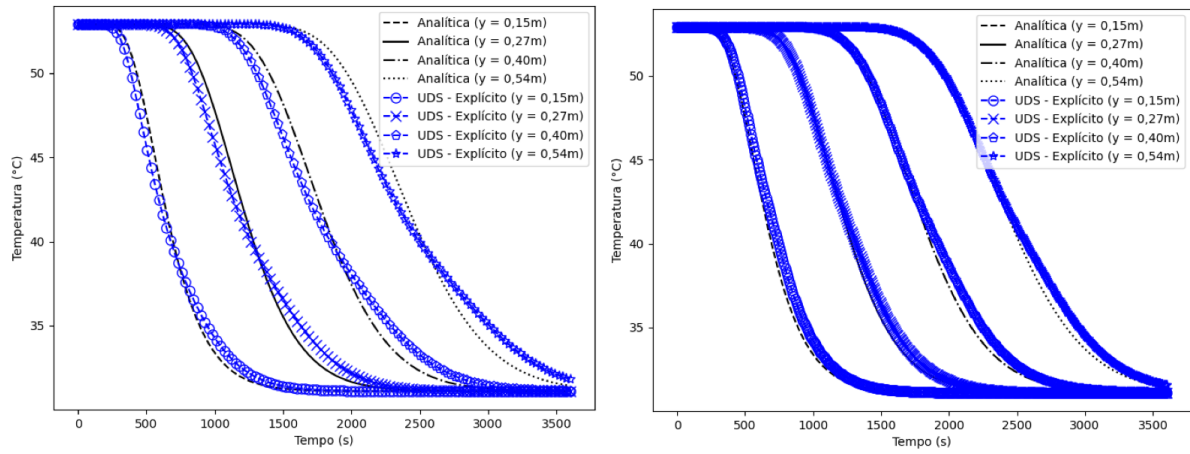
Fonte: O autor (2022).

Observa-se que nos métodos CDS – Crank-Nicolson, RWS e LS, a viscosidade artificial tem um efeito fundamental no controle das oscilações nas soluções numéricas. Em virtude disso, na sequência da dissertação, os dados referentes aos métodos CDS – Crank-Nicolson, RWS e LS, levam em consideração o uso da viscosidade artificial.

5.2.2 Esquema com Um Ponto a Montante (UDS)

As FIGURAS 17, 18 e 19 mostram o comportamento da aproximação espacial UDS com as aproximações temporais: explícita (FIGURA 17), implícita (FIGURA 18) e Crank-Nicolson (FIGURA 19), utilizando-se (a) $N_y = 64$ e $N_t = 128$ e (b) $N_y = 256$ e $N_t = 512$.

FIGURA 17 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO UDS - EXPLÍCITO.

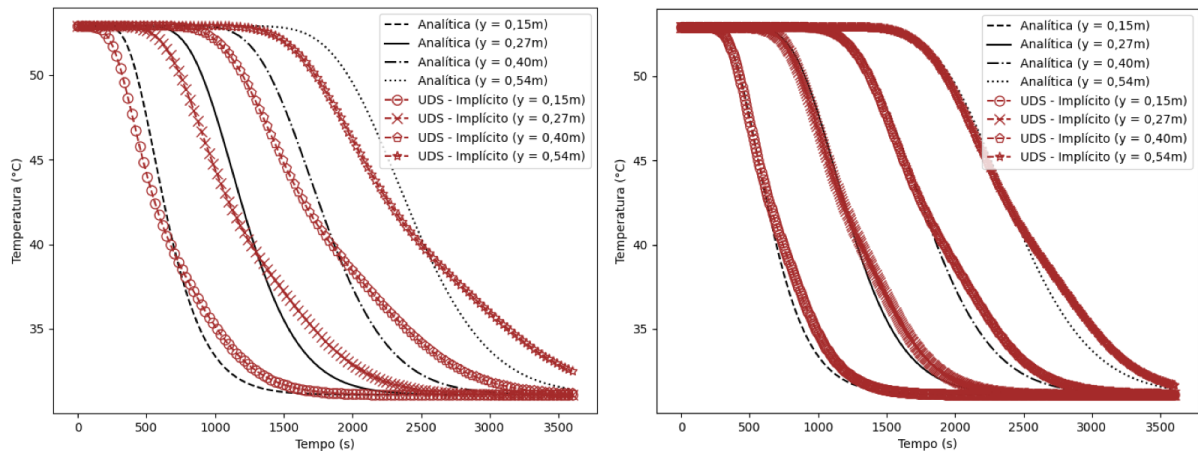


(a) $N_y = 64$ e $N_t = 128$

(b) $N_y = 256$ e $N_t = 512$

Fonte: O autor (2022).

FIGURA 18 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO UDS - IMPLÍCITO.

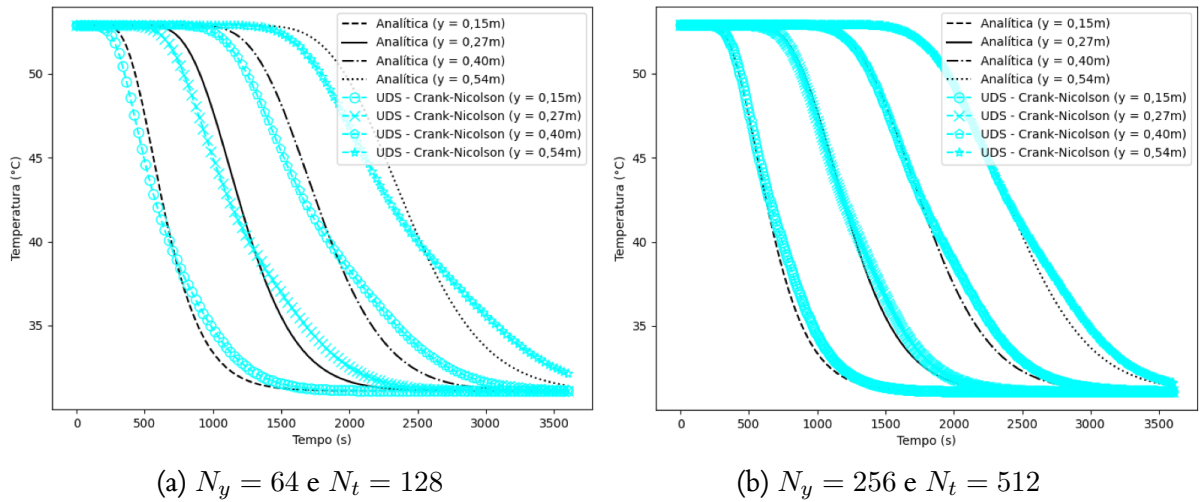


(a) $N_y = 64$ e $N_t = 128$

(b) $N_y = 256$ e $N_t = 512$

Fonte: O autor (2022).

FIGURA 19 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO UDS – CRANK-NICOLSON.



Fonte: O autor (2022).

A TABELA 11 mostra a norma L_2 (Eq. (5.1)) aplicada aos pontos 0,15 m, 0,27 m, 0,40 m e 0,54 m das aproximações: UDS – Explícito, UDS – Implícito e UDS – Crank-Nicolson.

TABELA 11 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO UDS – EXPLÍCITO, UDS – IMPLÍCITO E UDS – CRANK-NICOLSON.

Aproximação	$N_y \times N_t$	0,15 m	0,27 m	0,40 m	0,54 m
UDS – Explícito	64x128	0,79739E+01	0,11484E+02	0,13623E+02	0,15364E+02
	256x512	0,17062E+01	0,24806E+01	0,30938E+01	0,36074E+01
UDS – Implícito	64x128	0,32112E+02	0,38754E+02	0,43225E+02	0,47039E+02
	256x512	0,98588E+01	0,12216E+02	0,13951E+02	0,15386E+02
UDS – Crank-Nicolson	64x128	0,19445E+02	0,24758E+02	0,28163E+02	0,31010E+02
	256x512	0,51925E+01	0,68008E+01	0,79779E+01	0,89451E+01

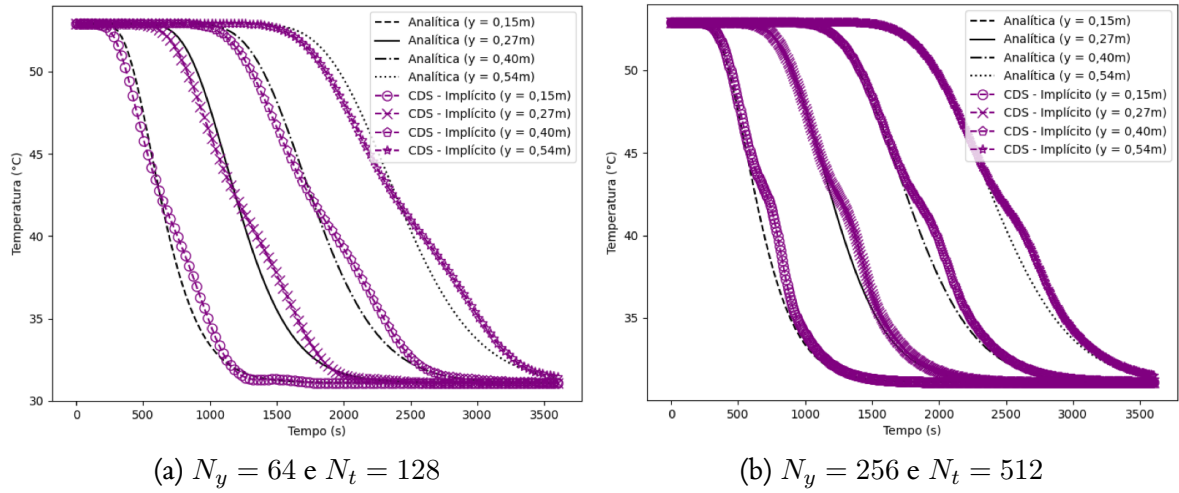
Fonte: O autor (2022).

Pode-se observar que com o refino da malha os resultados numéricos se aproximam do resultado analítico. Nota-se também que, devido ao fato das malhas utilizadas respeitarem a condição de estabilidade da formulação explícita, o método UDS – Explícito foi mais eficiente que os métodos UDS – Implícito e UDS – Crank-Nicolson.

5.2.3 Esquema com Diferença Central (CDS)

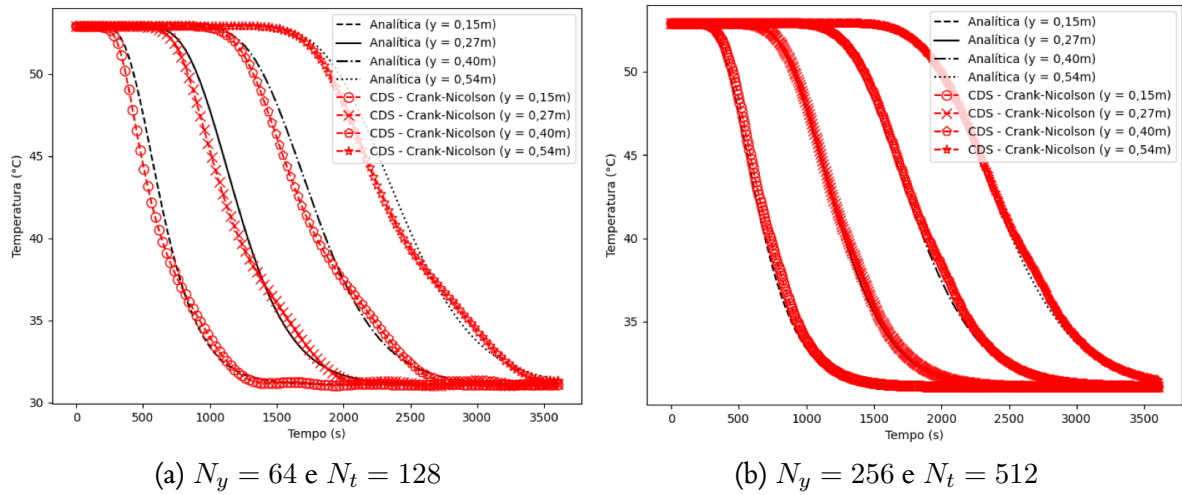
As FIGURAS 20 e 21 mostram o comportamento da aproximação espacial CDS com as aproximações temporais implícita (FIGURA 20) e Crank-Nicolson (FIGURA 21), utilizando-se (a) $N_y = 64$ e $N_t = 128$ e (b) $N_y = 256$ e $N_t = 512$.

FIGURA 20 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO CDS - IMPLÍCITO.



Fonte: O autor (2022).

FIGURA 21 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO CDS - CRANK-NICOLSON.



Fonte: O autor (2022).

A TABELA 12 mostra a norma L_2 (Eq. (5.1)) aplicada aos pontos 0,15 m, 0,27 m, 0,40 m e 0,54 m das aproximações: CDS - Implícito e CDS - Crank-Nicolson.

TABELA 12 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO CDS - IMPLÍCITO E CDS - CRANK-NICOLSON.

Aproximação	$N_y \times N_t$	0,15 m	0,27 m	0,40 m	0,54 m
CDS - Implícito	64x128	0,15214E+02	0,15019E+02	0,14964E+02	0,15020E+02
	256x512	0,16843E+02	0,12500E+02	0,10486E+02	0,92868E+01
CDS - Crank-Nicolson	64x128	0,24121E+02	0,18853E+02	0,16212E+02	0,14350E+02
	256x512	0,90104E+00	0,72498E+00	0,63062E+00	0,56777E+00

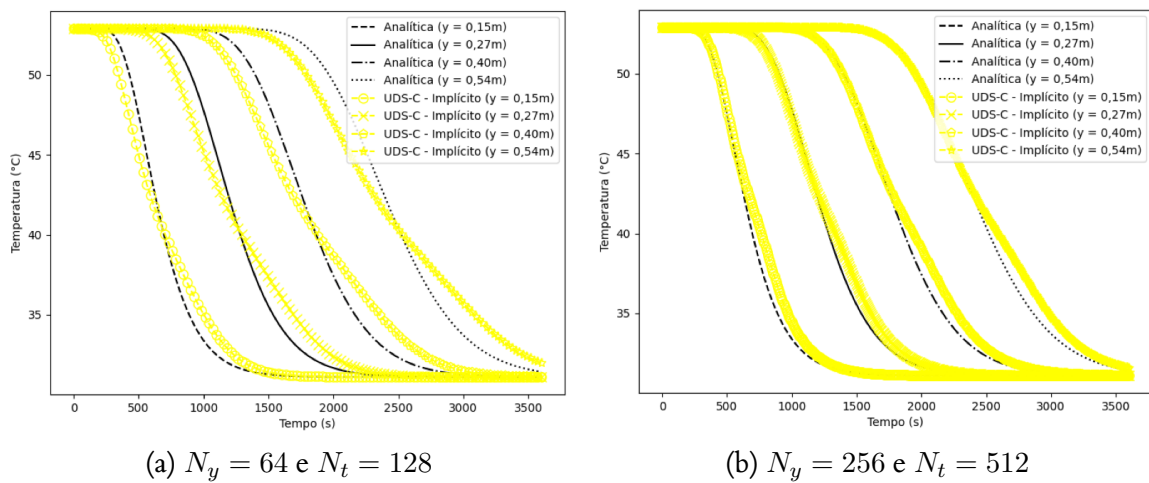
Fonte: O autor (2022).

Visualiza-se que para a camada de $0,15\text{ m}$, o método CDS - Implícito não apresentou melhora com o refino de malha. Isto se deve ao fato do método, embora de primeira ordem, apresentar oscilações não-físicas na solução numérica.

5.2.4 UDS com Correção Adiada (UDS-C)

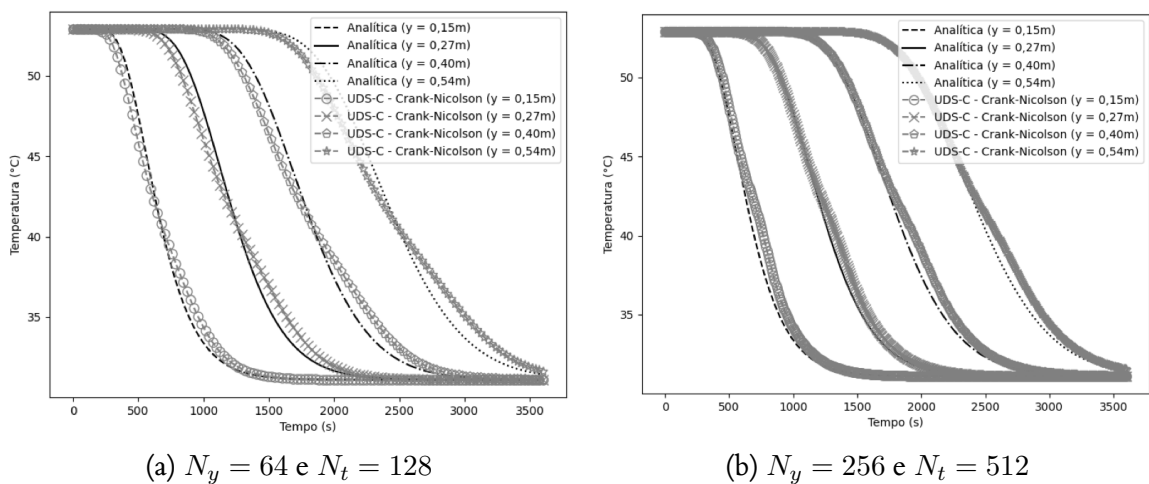
As FIGURAS 22 e 23 mostram o comportamento da aproximação espacial UDS-C com as aproximações temporais implícita (FIGURA 22) e Crank-Nicolson (FIGURA 23), utilizando-se (a) $N_y = 64$ e $N_t = 128$ e (b) $N_y = 256$ e $N_t = 512$.

FIGURA 22 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO UDS-C - IMPLÍCITO.



Fonte: O autor (2022).

FIGURA 23 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO UDS-C - CRANK-NICOLSON.



Fonte: O autor (2022).

A TABELA 13 mostra a norma L_2 (Eq. (5.1)) aplicada aos pontos $0,15\text{ m}$, $0,27\text{ m}$, $0,40\text{ m}$ e $0,54\text{ m}$ das aproximações: UDS-C - Implícito e UDS-C - Crank-Nicolson.

TABELA 13 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO UDS-C - IMPLÍCITO E UDS-C - CRANK-NICOLSON.

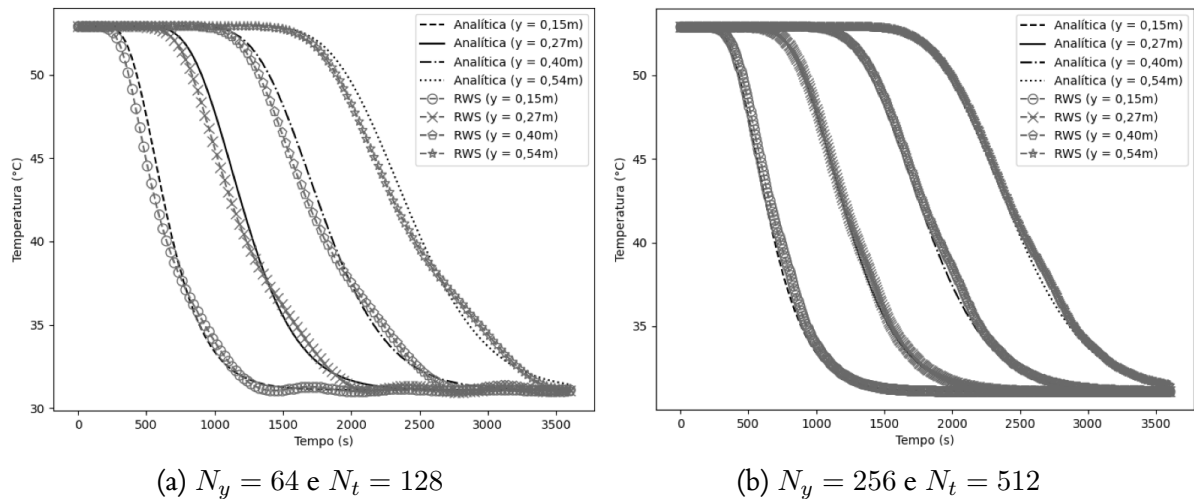
Aproximação	$N_y \times N_t$	0,15 m	0,27 m	0,40 m	0,54 m
UDS-C - Implícito	64x128	0,19535E+02	0,23449E+02	0,26123E+02	0,28420E+02
	256x512	0,69867E+01	0,76702E+01	0,83632E+01	0,89985E+01
UDS-C - Crank-Nicolson	64x128	0,78813E+01	0,10224E+02	0,11722E+02	0,12971E+02
	256x512	0,48818E+01	0,42649E+01	0,42108E+01	0,43017E+01

Fonte: O autor (2022).

5.2.5 Esquema de Roberts e Weiss (RWS)

A FIGURA 24 mostra o comportamento da aproximação RWS utilizando-se (a) $N_y = 64$ e $N_t = 128$ e (b) $N_y = 256$ e $N_t = 512$.

FIGURA 24 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO RWS.



Fonte: O autor (2022).

A TABELA 14 mostra a norma L_2 (Eq. (5.1)) aplicada aos pontos 0,15 m, 0,27 m, 0,40 m e 0,54 m da aproximação RWS.

TABELA 14 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO RWS.

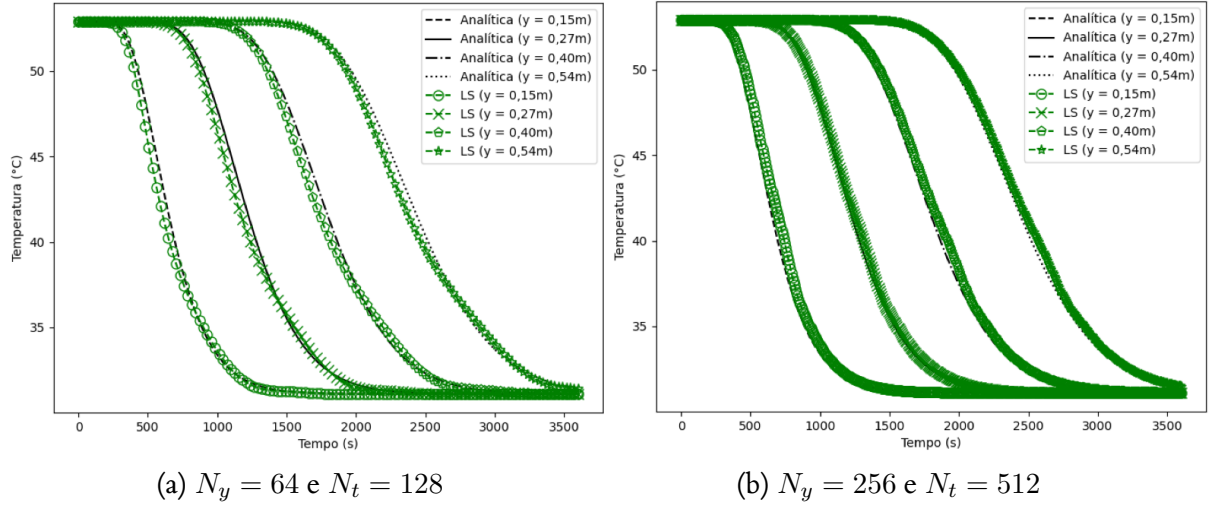
Aproximação	$N_y \times N_t$	0,15 m	0,27 m	0,40 m	0,54 m
RWS	64x128	0,17201E+02	0,16575E+02	0,15772E+02	0,14538E+02
	256x512	0,79835E+00	0,69449E+00	0,64035E+00	0,60269E+00

Fonte: O autor (2022).

5.2.6 Esquema de Leith (LS)

A FIGURA 25 mostra o comportamento da aproximação LS utilizando-se (a) $N_y = 64$ e $N_t = 128$ e (b) $N_y = 256$ e $N_t = 512$.

FIGURA 25 – COMPARATIVO ENTRE AS SOLUÇÕES NUMÉRICAS E ANALÍTICAS UTILIZANDO LS.



Fonte: O autor (2022).

A TABELA 15 mostra a norma L_2 (Eq. (5.1)) aplicada aos pontos 0,15 m, 0,27 m, 0,40 m e 0,54 m da aproximação LS.

TABELA 15 – NORMA L_2 DO ERRO NUMÉRICO APLICADA AOS PONTOS DE INTERESSE UTILIZANDO LS.

Aproximação	$N_y \times N_t$	0,15 m	0,27 m	0,40 m	0,54 m
LS	64x128	0,86454E+01	0,69525E+01	0,60400E+01	0,53747E+01
	256x512	0,38558E+00	0,27057E+00	0,21759E+00	0,18492E+00

Fonte: O autor (2022).

5.3 Comparativo Entre as Aproximações

Nesta seção apresenta-se as comparações entre o desempenho das aproximações numéricas, com foco especial na comparação entre o método preferido pela literatura, UDS – Explícito, e os demais métodos. Primeiramente são comparados os erros em relação ao número de incógnitas usados. Em seguida, os tempos computacionais são exibidos e discutidos.

Com o objetivo de comparar os métodos utilizados, a TABELA 16 mostra as normas L_2 das normas $L_2(y)$ definida como

$$L_2 = \left\| L_2(y) \right\|_2, \quad (5.2)$$

para todos os métodos em relação ao número de incógnitas ($N = N_y \times N_t$) utilizadas, onde $\|\cdot\|_2$ representa a norma L_2 para y variando, ou seja, $y_1 = 0,15 \text{ m}$, $y_2 = 0,27 \text{ m}$, $y_3 = 0,40 \text{ m}$ e $y_4 = 0,54 \text{ m}$.

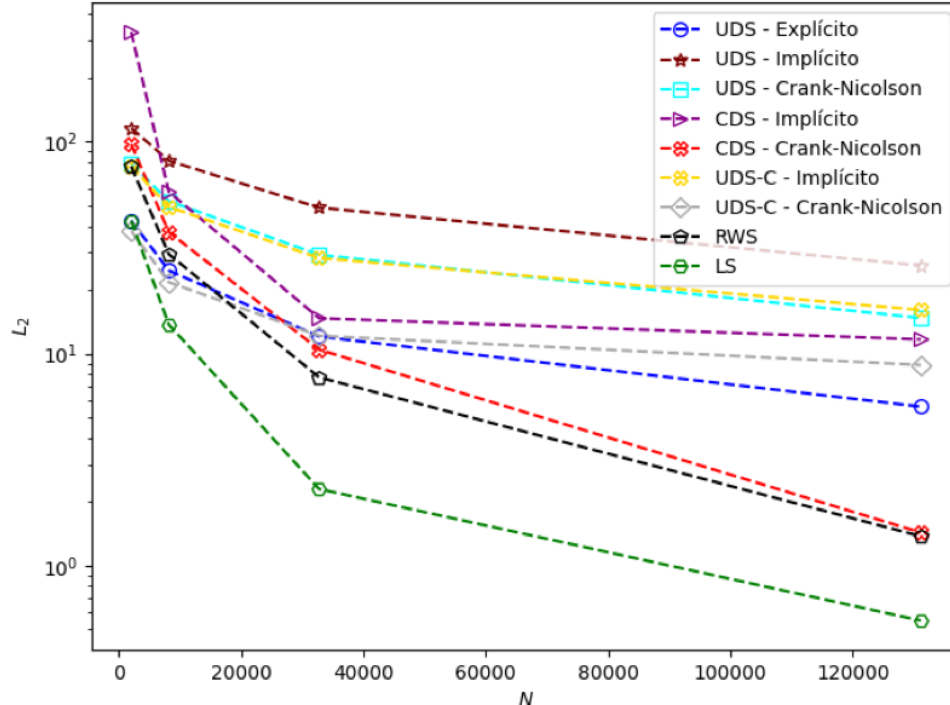
TABELA 16 – NORMAS L_2 DO ERRO NUMÉRICO EM RELAÇÃO AO NÚMERO DE INCÓGNITAS PARA CADA MÉTODO UTILIZADO.

N	2048	8192	32768	131072
UDS - Explícito	0,423953E+02	0,246870E+02	0,120533E+02	0,562578E+01
UDS - Implícito	0,115970E+03	0,813272E+02	0,488517E+02	0,260343E+02
UDS - Crank-Nicolson	0,788805E+02	0,524008E+02	0,292950E+02	0,147267E+02
CDS - Implícito	0,329772E+03	0,580427E+02	0,146876E+02	0,116746E+02
CDS - Crank-Nicolson	0,974650E+02	0,374968E+02	0,104454E+02	0,143440E+01
UDS-C - Implícito	0,766608E+02	0,492095E+02	0,282868E+02	0,160799E+02
UDS-C - Crank-Nicolson	0,379368E+02	0,217324E+02	0,121467E+02	0,884629E+01
RWS	0,764881E+02	0,295019E+02	0,772825E+01	0,137585E+01
LS	0,424803E+02	0,137277E+02	0,229758E+01	0,550837E+00

Fonte: O autor (2022).

A FIGURA 26 mostra os dados da TABELA 16 em um gráfico L_2 versus o número de incógnitas para todos os métodos utilizados.

FIGURA 26 – NORMA L_2 DO ERRO VERSUS O NÚMERO DE INCÓGNITAS.



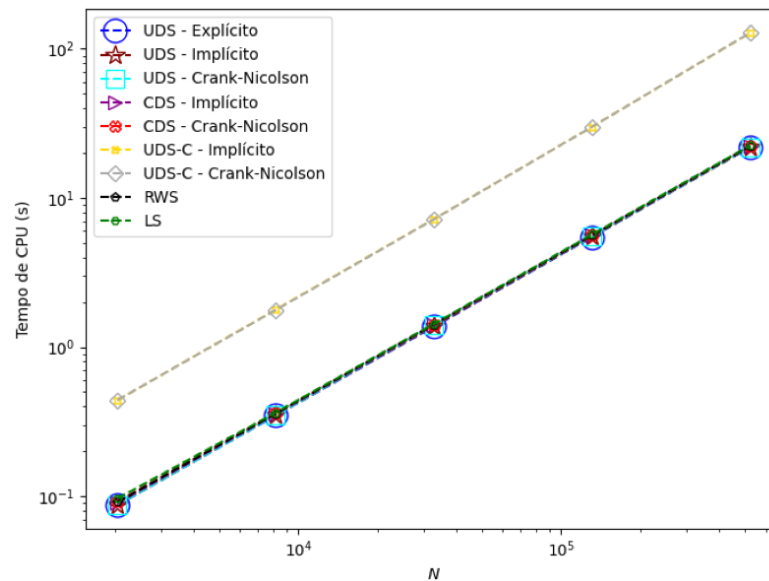
FONTE: O autor (2022).

Verifica-se inicialmente que a norma L_2 do erro decai com o aumento no número de incógnitas para todos os métodos usados, como esperado. Além disso, observa-se com a TABELA 16 e a FIGURA 26 que os métodos que apresentam os menores erros em relação a solução analítica são: UDS - Explícito, CDS - Crank-Nicolson, RWS e LS.

Para o maior número de incógnitas testado ($N = 131072$), a diferença entre o método UDS - Explícito (melhor método de primeira ordem e preferido pela literatura) com CDS - Crank-Nicolson, RWS e LS é de, respectivamente, 4,19138 °C, 4,24993 °C e 5,074943 °C; mostrando que os métodos de segunda ordem apresentam resultados consideravelmente melhores se comparado ao melhor método de primeira ordem.

A FIGURA 27 ilustra o efeito do número de incógnitas (N) sobre o tempo de CPU, para cada aproximação utilizada.

FIGURA 27 – EFEITO DO NÚMERO DE INCÓGNITAS SOBRE O TEMPO DE CPU PARA CADA APROXIMAÇÃO UTILIZADA



FONTE: O autor (2022)

Pode-se observar na FIGURA 27 que o tempo de CPU dos métodos UDS - Explícito, UDS - Implícito, UDS - Crank-Nicolson, CDS - Implícito, CDS - Crank-Nicolson, RWS e LS são menores com o aumento no número de incógnitas do que os métodos UDS-C - Implícito e UDS-C Crank-Nicolson.

A TABELA 17 resume os tempos de CPU obtidos para os métodos que apresentaram melhores comportamentos na FIGURA 26 (UDS - Explícito, CDS - Crank-Nicolson, RWS e LS) para diversos valores de $N = N_y \times N_t$.

TABELA 17 – TEMPO DE CPU (SEGUNDOS) DAS APROXIMAÇÕES UTILIZADAS EM RELAÇÃO AO NÚMERO DE INCÓGNITAS.

N	UDS - Explícito	CDS - Crank-Nicolson	RWS	LS
2048	8,73209E-02	9,17998E-02	9,12019E-02	9,64619E-02
8192	0,347722	0,35931	0,35766	0,36324
32768	1,3726	1,40793	1,41547	1,42788
131072	5,48489	5,59400	5,60301	5,68517

Fonte: O autor (2022).

Observa-se que o método UDS - Explícito apresenta um tempo de CPU menor que os demais métodos, porém com a máxima diferença 0,10911s, 0,11812s e 0,20028s, respectivamente para CDS - Crank-Nicolson, RWS e LS.

Nota-se que os tempos de CPU estão muito próximos, isto se deve ao fato do método TDMA ser muito eficiente e apresentar excelente complexidade. Além disso, existe um elevado número de elementos nos coeficientes e termo fonte de todos os métodos, o que acaba nivelando a complexidade da resolução do sistema.

Levando em consideração as seguintes expressões:

$$E_M = \frac{L_2 \text{ (UDS - Explícito)}}{L_2}, \quad (5.3)$$

$$t_{CPU}^M = \frac{t_{CPU} \text{ (UDS - Explícito)}}{t_{CPU}}, \quad (5.4)$$

na TABELA 18, compara-se o desempenho do método UDS - Explícito (amplamente utilizado na literatura) com os métodos CDS - Crank-Nicolson, RWS e LS. É possível observar que, se o valor obtido for maior que a unidade, o método teve desempenho melhor que UDS - Explícito.

TABELA 18 – COMPARATIVO ENTRE OS MELHORES MÉTODOS

Método	E_M	t_{CPU}^M
UDS - Explícito	1,00000	1,00000
CDS - Crank-Nicolson	3,87797	0,98049
RWS	4,04300	0,97891
LS	10,0985	0,96477

FONTE: O autor (2022)

Dado a grande diferença entre as normas L_2 (coluna E_M), e a pequena diferença de tempos de CPUs (coluna t_{CPU}^M), os métodos CDS - Crank-Nicolson, RWS e LS mostraram ser melhores que o método UDS - Explícito, amplamente utilizado na literatura (THORPE, 2001b; LOPES *et al.*, 2006; RADTKE, 2009; KWIATKOWSKI JR, 2011; LOPES *et al.*, 2014, 2015; RIGONI; KWIATKOWSKI JR, 2020).

Portanto, este trabalho propõe a utilização destes três métodos, ainda não utilizados na literatura, CDS - Crank-Nicolson, RWS e LS, para solucionar numericamente o modelo proposto por Thorpe (2001b), com foco especial sobre o método LS (veja FIGURA 26).

6 CONCLUSÕES

6.1 Conclusões Gerais

Neste trabalho foi proposta uma solução analítica usando o MSF, fidedigna a dados experimentais, para o modelo matemático proposto por Thorpe (2001b) referente ao problema de aeração da massa de grãos. Tal solução, com pequenas modificações, atende a sistemas com diferentes geometrias, longos períodos de aeração e condições iniciais e de contorno distintas. Com relação a outros tipos de grãos, mudanças mais elaboradas são exigidas e essas modificações são objeto de estudos.

Utilizou-se o MDF para solucionar numericamente o modelo matemático, e foram realizados estudos sobre o comportamento de diversos tipos de aproximações numéricas, ainda não exploradas na literatura para este problema. Para os métodos de segunda ordem, CDS - Crank-Nicolson, RWS e LS, utilizou-se a viscosidade artificial a fim de evitar oscilações não-físicas nas soluções numéricas.

Verificou-se que os métodos CDS - Crank-Nicolson, RWS e LS, obtiveram menores erros se comparados ao método amplamente utilizado, UDS - Explícito. Observou-se também que a diferença de tempo de CPU entre os métodos propostos e o utilizado na literatura é muito pequena.

Portanto, este trabalho propõe a utilização dos três métodos, CDS - Crank-Nicolson, RWS e LS, para solucionar numericamente o modelo de aeração da massa de grãos proposto por Thorpe (2001b), com foco especial sobre o método LS.

6.2 Principais Contribuições

As principais contribuições desta dissertação são:

- Propôs-se uma solução analítica, com comportamento fidedigno a dados experimentais retirados da literatura, para o processo de aeração da massa de grãos.
- Solucionou-se o modelo matemático numericamente utilizando outras aproximações numéricas que se mostraram melhores que o método amplamente utilizado na literatura.
- Implementou-se a viscosidade artificial nos métodos de segunda ordem para tratar oscilações não-físicas nas soluções numéricas no modelo proposto por Thorpe (2001b).
- O trabalho é pioneiro em realizar uma verificação numérica das resoluções computacionais do modelo estudado.

6.3 Proposta de Trabalhos Futuros

Com a finalidade de complementar e expandir os estudos deste trabalho, são sugeridas as seguintes propostas de trabalhos futuros:

- Implementar a solução analítica proposta nesta dissertação em outros modelos matemáticos relacionados a aeração da massa de grãos.
- Investigar o efeito de diferentes métodos de discretização, por exemplo o método dos volumes finitos, para solucionar o modelo matemático.
- Considerar o modelo matemático sem as simplificações adotadas e comparar os modelos.
- Investigar e implementar o modelo matemático em 2D e 3D.
- Aplicar outros *solvers* para solucionar o sistema, como o método *multigrid*.

REFERÊNCIAS

ALAGUSUNDARAM, K.; JAYAS, D.; WHITE, N.; MUIR, W. Three-dimensional, finite element, heat transfer model of temperature distribution in grain storage bins. **Transactions of the ASAE**, American Society of Agricultural e Biological Engineers, v. 33, n. 2, p. 577–0584, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 21, 26.

ALÉ, J. V. **Sistemas de ventilação industrial: Ventiladores**. [S.l.]: PUCRS – Departamento de Engenharia Mecânica e Mecatrônica, 2001. v. 1. Citado 1 vez na página 47.

AMAR, A. J.; BLACKWELL, B. F.; EDWARDS, J. R. One-dimensional ablation using a full Newton's method and finite control volume procedure. **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 22, n. 1, p. 71–82, 2008. Citado 1 vez na página 28.

AMAR, A. J.; BLACKWELL, B.; EDWARDS, J. Development and verification of a one-dimensional ablation code including pyrolysis gas flow. **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 23, n. 1, p. 59–71, 2009. Citado 1 vez na página 28.

AMAR, A. J.; CALVERT, N.; KIRK, B. Development and verification of the charring ablating thermal protection implicit system solver. In: 49TH AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition. [S.l.: s.n.], 2011. P. 144. Citado 1 vez na página 28.

ANTUNES, A. M.; DEVILLA, I. A.; NETO, A. C. B.; ALVES, B. G. X.; ALVES, G. R.; SANTOS, M. M. Development of an automated system of aeration for grain storage. **African Journal of Agricultural Research**, Academic Journals, v. 11, n. 43, p. 4293–4303, 2016. Citado 1 vez na página 20.

ARAKI, L. K. **Verificação de soluções numéricas de escoamentos reativos em motores-foguete**. 2007. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brasil. Citado 1 vez na página 22.

AZEVEDO, L. F.; OLIVEIRA, T. P.; PORTO, A. G.; SILVA, F. A capacidade estática de armazenamento de grãos no Brasil. **Artigo do XXVIII Encontro Nacional de Engenharia de Produção**, RJ, p. 04–05, 2008. Citado 1 vez na página 23.

BILOBROVEC, M. **Sistema especialista em lógica fuzzy para o controle, gerencialmente e manutenção da qualidade em processo de aeração de grãos**. 2005. Diss. (Mestrado) – Univer-

sidade Tecnológica Federal do Paraná, Campus Ponta Grossa. Curso de Pós-Graduação em Engenharia de Produção. Ponta Grossa. Citado 1 vez na página 24.

BINELO, M. O.; FAORO, V.; KATHATOURIAN, O. A.; ZIGANSHIN, B. Airflow simulation and inlet pressure profile optimization of a grain storage bin aeration system. **Computers and Electronics in Agriculture**, Elsevier, v. 164, p. 104923, 2019. Citado 1 vez na página 20.

BOND, R. B.; OBER, C. C.; KNUPP, P. M.; BOVA, S. W. Manufactured solution for computational fluid dynamics boundary condition verification. **AIAA journal**, v. 45, n. 9, p. 2224–2236, 2007. Citado 1 vez na página 28.

BRADY, P.; HERRMANN, M.; LOPEZ, J. Code verification for finite volume multiphase scalar equations using the method of manufactured solutions. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 231, n. 7, p. 2924–2944, 2012. Citado 1 vez na página 28.

BROOKER, D. B.; BARKER-ARKEMA, F. W.; HALL, C. W. **Drying and storage of grains and oilseeds**. [S.l.]: AVI Book Van Nostrand Reinhold, 1992. ISBN 0-442-20515-5. Citado 1 vez na página 45.

CAMPBELL, J.; VIGNJEVIC, R. Artificial Viscosity Methods for Modelling Shock Wave Propagation. In: **PREDICTIVE Modeling of Dynamic Processes**. [S.l.]: Springer, 2009. P. 349–365. Citado 1 vez na página 39.

CAMPBELL, L.; YIN, B. On the stability of alternating-direction explicit methods for advection-diffusion equations. **Numerical Methods for Partial Differential Equations: An International Journal**, Wiley Online Library, v. 23, n. 6, p. 1429–1444, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 37, 42.

CENGEL, T. A.; BOLES, M. A. **Thermodynamics: An Engineering Approach**. [S.l.]: McGraw-Hill, Boston, 1998. Citado 1 vez na página 47.

CHAMBERLAND, É.; FORTIN, A.; FORTIN, M. Comparison of the performance of some finite element discretizations for large deformation elasticity problems. **Computers & Structures**, Elsevier, v. 88, n. 11–12, p. 664–673, 2010. Citado 1 vez na página 28.

CHANG, C.; CONVERSE, H.; STEELE, J. Modeling of moisture content of grain during storage with aeration. **Transactions of the ASAE**, American Society of Agricultural e Biological Engineers, v. 37, n. 6, p. 1891–1898, 1994. Citado 2 vezes nas páginas 21, 26.

CHANG, C.; CONVERSE, H.; STEELE, J. Modeling of temperature of grain during storage with aeration. **Transactions of the ASAE**, American Society of Agricultural e Biological Engineers, v. 36, n. 2, p. 509–519, 1993. Citado 2 vezes nas páginas 21, 26.

CHUNG, D.; PFOST, H. Adsorption and Desorption of Water Vapor by Cereal Grains and Their Products Part I: Heat and Free Energy Changes of Adsorption and Desorption. **Transactions of the ASABE**, v. 10, p. 549–0551, 1967. Citado 1 vez na página 48.

CURRAN, D.; SEAMAN, L.; AUSTIN, M. The use of artificial viscosity to compute one-dimensional wave propagation in composite materials. **Journal of Composite Materials**, Sage Publications Sage CA: Thousand Oaks, CA, v. 8, n. 2, p. 142–159, 1974. Citado 2 vezes nas páginas 21, 29.

DAUM, T. ICT applications in Agriculture. **Hans-Ruthenberg-Institute of Agricultural Science in the Tropics**, 2020. Citado 1 vez na página 20.

DEHGHAN, M. Quasi-implicit and two-level explicit finite-difference procedures for solving the one-dimensional advection equation. **Applied mathematics and computation**, Elsevier, v. 167, n. 1, p. 46–67, 2005. Citado 4 vezes nas páginas 37, 42, 69.

DONG, S.; YANG, L.; SHAO, X.; ZHONG, Y.; LI, Y.; QIAO, P. How can channel information strategy promote sales by combining ICT and blockchain? Evidence from the agricultural sector. **Journal of Cleaner Production**, Elsevier, v. 299, p. 126857, 2021. Citado 1 vez na página 20.

EÇA, L.; KLAIJ, C. M.; VAZ, G.; HOEKSTRA, M.; PEREIRA, F. S. On code verification of RANS solvers. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 310, p. 418–439, 2016. Citado 1 vez na página 28.

ELLIS, J. R.; HALL, C. D. Model development and code verification for simulation of electrodynamic tether system. **Journal of guidance, control, and dynamics**, v. 32, n. 6, p. 1713–1722, 2009. Citado 1 vez na página 28.

ÉTIENNE, S.; GARON, A.; PELLETIER, D. Some manufactured solutions for verification of fluid-structure interaction codes. **Computers & structures**, Elsevier, v. 106, p. 56–67, 2012. Citado 1 vez na página 28.

FAN, J.; ZHANG, Y.; WEN, W.; GU, S.; LU, X.; GUO, X. The future of Internet of Things in agriculture: Plant high-throughput phenotypic platform. **Journal of Cleaner Production**, Elsevier, v. 280, p. 123651, 2021. Citado 1 vez na página 20.

FERRASA, M.; BIAGGIONI, M. A. M.; DIAS, A. H. Sistema de monitoramento da temperatura e umidade em silos graneleiros via radiofrequencia. **Energia na Agricultura**, p. 139–156, 2010. Citado 1 vez na página 20.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. [S.l.]: Springer-Verlag, 2002. Citado 4 vezes nas páginas 21, 32, 41, 42.

FLEURAT-LESSARD, F. Qualitative reasoning and integrated management of the quality of stored grain: a promising new approach. **Journal of Stored Products Research**, Elsevier, v. 38, n. 3, p. 191–218, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 24, 45.

FRENO, B. A.; CARNES, B. R.; MATULA, N. R. Nonintrusive manufactured solutions for ablation. **Physics of Fluids**, AIP Publishing LLC, v. 33, n. 1, p. 017104, 2021. Citado 1 vez na página 28.

FRENO, B. A.; CARNES, B. R.; WEIRS, V. G. Code-verification techniques for hypersonic reacting flows in thermochemical nonequilibrium. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 425, p. 109752, 2021. Citado 1 vez na página 28.

FRENO, B. A.; MATULA, N. R.; JOHNSON, W. A. Manufactured solutions for the method-of-moments implementation of the electric-field integral equation. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 443, p. 110538, 2021. Citado 1 vez na página 28.

GONÇALVES, S. F. T. **ESTUDO DE PARÂMETROS DO MÉTODO MULTIGRID GEOMÉTRICO PARA EQUAÇÕES 2D EM CFD E VOLUMES FINITOS**. 2013. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brasil. Citado 1 vez na página 42.

HARA, T.; CORRÊA, P. C. Silo de Alvenaria para armazenagem de milho a granel, na fazenda, com capacidade para 100 a 200 toneladas, com aeração. **Informe Técnico**. Viçosa: UFV. 10p, 1981. Citado 1 vez na página 24.

HUNTER, A. J. An isostere equation for some common seeds. **Journal of Agricultural Engineering Research**, Elsevier, v. 37, n. 3–4, p. 93–105, 1987. Citado 1 vez na página 48.

JAYAS, D. S.; CENKOWSKI, S. Grain Property Values and Their Measurement. In: **HAND-BOOK of industrial drying**. [S.l.]: Taylor Francis Group, LLC, 2006. cap. 24. Citado 0 vez na página 46.

JIA, C.; SUN, D.; CAO, C. Mathematical simulation of temperature fields in a stored grain bin due to internal heat generation. **Journal of Food Engineering**, Elsevier, v. 43, n. 4, p. 227–233, 2000. Citado 2 vezes nas páginas 21, 26.

KHATCHATOURIAN, O. A.; OLIVEIRA, F. A. Mathematical modelling of airflow and thermal state in large aerated grain storage. **Biosystems Engineering**, Elsevier, v. 95, n. 2, p. 159–169, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 49–51.

KHATCHATOURIAN, O. A.; VIELMO, H. A.; BORTOLAIA, L. A. Modelling and simulation of cross flow grain dryers. **Biosystems engineering**, Elsevier, v. 116, n. 4, p. 335–345, 2013. Citado 1 vez na página 24.

KREYSZIG, E. **Advanced engineering mathematics**, 10th eddition. [S.l.]: Wiley, 2009. Citado 1 vez na página 33.

KWIATKOWSKI JR, J. E. **Simulação e controle do sistema de aeração da massa de grãos de soja**. 2011. Diss. (Mestrado) – Universidade Regional do Noroeste do Rio Grande do Sul. Citado 4 vezes nas páginas 22, 27, 84.

LAX, P.; WENDROFF, B. Systems of conservation laws. **Communications on Pure and Applied Mathematics**, v. 13, p. 217, 1960. Citado 1 vez na página 40.

LEITH, C. E. Numerical simulation of the earth's atmosphere. **Methods Computational Physics**, v. 4, p. 1–28, 1965. Citado 2 vezes nas páginas 21, 37.

LIU, Q.; YANG, G.; ZHANG, Q.; DING, C. CFD simulations of aeration for cooling paddy rice in a warehouse-type storage facility. **Transactions of the ASABE**, American Society of Agricultural e Biological Engineers, v. 59, n. 6, p. 1873–1882, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 21, 27.

LOPES, D. C. **Simulação e controle em tempo real para sistemas de aeração de grãos**. 2006. Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Viçosa. Citado 3 vezes nas páginas 45, 46.

LOPES, D. C.; MARTINS, J. H.; MELO, E. C.; MONTEIRO, P. M. B. Aeration simulation of stored grain under variable air ambient conditions. **Postharvest Biology and Technology**, Elsevier, v. 42, n. 1, p. 115–120, 2006. Citado 7 vezes nas páginas 21, 22, 24, 26, 27, 44, 84.

LOPES, D. C.; NETO, A. J. S.; SANTIAGO, J. K. Comparison of equilibrium and logarithmic models for grain drying. **Biosystems Engineering**, v. 118, n. 1, p. 105–114, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 21, 84.

LOPES, D. C.; STEIDLE NETO, A. J.; VASCO JR, R. Comparison of equilibrium models for grain aeration. **Journal of Stored Products Research**, v. 60, n. 1, p. 11–18, 2015. Citado 3 vezes nas páginas 21, 27, 84.

MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, v. 2, 2004. Citado 3 vezes nas páginas 58, 65, 66.

MARCHI, C. H. *Verificação de Soluções Numéricas Unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos*. 2001. Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Santa Catarina. Citado 3 vezes nas páginas 41, 42.

MCCLARREN, R. G.; LOWRIE, R. B. Manufactured solutions for the P1 radiation hydrodynamics equations. **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, Elsevier, v. 109, n. 15, p. 2590–2602, 2008. Citado 1 vez na página 28.

MOUSA, M. M.; MA, W. Efficient modeling of shallow water equations using method of lines and artificial viscosity. **Modern Physics Letters B**, World Scientific, v. 34, n. 04, p. 2050051, 2020. Citado 2 vezes nas páginas 21, 29.

MUIR, W.; FRASER, B.; SINHA, R. Simulation model of two-dimensional heat transfer in controlled-atmosphere grain bins. In: **DEVELOPMENTS in Agricultural Engineering**. [S.l.]: Elsevier, 1980. v. 1. P. 385–398. Citado 2 vezes nas páginas 21, 25.

NAVARRO, S.; NOYES, R. T. **The mechanics and physics of modern grain aeration management**. [S.l.]: CRC Press, 2001. ISBN 0-8493-1355-4. Citado 3 vezes nas páginas 24, 46.

NOVOA-MUÑOZ, F. Simulation of the temperature of barley during its storage in cylindrical silos. **Mathematics and Computers in Simulation**, Elsevier, v. 157, p. 1–14, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 21, 27.

NUTTALL, J.; O'LEARY, G.; PANOZZO, J.; WALKER, C.; BARLOW, K.; FITZGERALD, G. Models of grain quality in wheat—A review. **Field crops research**, Elsevier, v. 202, p. 136–145, 2017. Citado 1 vez na página 21.

NYARKO, D. A.; KOZÁRI, J. Information and communication technologies (ICTs) usage among agricultural extension officers and its impact on extension delivery in Ghana. **Journal of the Saudi Society of Agricultural Sciences**, Elsevier, v. 20, n. 3, p. 164–172, 2021. Citado 1 vez na página 20.

OBERKAMPF, W. L.; BLOTTNER, F. G. Issues in Computational Fluid Dynamics Code Verification and Validation. **AIAA Journal**, v. 36, n. 5, 1998. Citado 1 vez na página 28.

OBERKAMPF, W. L.; TRUCANO, T. G. Verification and validation in computational fluid dynamics. **Progress in Aerospace Sciences**, v. 38, 2002. Citado 1 vez na página 40.

OLIVEIRA, F.; KHATCHATOURIAN, O. A.; BILHAIN, A. Estado térmico de produtos armazenados em silos com sistema de aeração: Estudo teórico e experimental. **Engenharia Agrícola**, v. 27, p. 247–258, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 49–51.

OLIVEIRA, J. M. B. Uma nova abordagem para a formulação multigrid-SIMPLEC das equações bidimensionais de Navier-Stokes incompressíveis em regime permanente. 2020. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Paraná. Citado 4 vezes nas páginas 21, 31, 38, 41.

OLIVER, T.; ESTACIO-HIROMS, K.; MALAYA, N.; CAREY, G. Manufactured solutions for the Favre-averaged Navier-Stokes equations with eddy-viscosity turbulence models. In: 50TH AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition. [S.l.: s.n.], 2012. P. 80. Citado 1 vez na página 28.

PANIGRAHI, S. S.; SINGH, C. B.; FIELKE, J. CFD modelling of physical velocity and anisotropic resistance components in a peaked stored grain with aeration ducting systems. **Computers and Electronics in Agriculture**, Elsevier, v. 179, p. 105820, 2020. Citado 2 vezes na página 20.

PANIGRAHI, S. S.; SINGH, C. B.; FIELKE, J.; ZARE, D. Modeling of heat and mass transfer within the grain storage ecosystem using numerical methods: A review. **Drying Technology**, Taylor & Francis, v. 38, n. 13, p. 1677–1697, 2020. Citado 3 vezes nas páginas 20, 21, 25, 31, 44.

PATANKAR, S. V. Numerical heat transfer and fluid flow. **Washington: Taylor Francis**, 1980. Citado 2 vez na página 39.

PFOST, H. B.; RENGIFO, G. E.; SAUER, D. B. High temperature, high humidity grain storage. **ASAE, St. Joseph, MI**, 1976. Citado 1 vez na página 46.

RADTKE, L. C. **Simulação da aeração de grãos armazenados variando as condições de ar ambiente**. 2009. Diss. (Mestrado) – Universidade Regional do Noroeste do Rio Grande do Sul. Citado 5 vezes nas páginas 21, 22, 27, 84.

RANJBARAN, M.; EMADI, B. A mathematical model of commodity wet-bulb temperature (CWBT) for grain storage applications. **Biosystems Engineering**, Elsevier, v. 139, p. 128–135, 2015. Citado 1 vez na página 27.

RIGONI, D.; KWIATKOWSKI JR, J. E. Using the multigrid method to improve the performance of aeration process simulation (in portuguese). **Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**, v. 7, n. 1, p. 010331-1 –010331-2, 2020. Citado 3 vezes nas páginas 21, 22, 84.

RIGONI, D.; PINTO, M. A.; KWIATKOWSKI JR, J. E. Comparison among numerical approximations in the simulation of the grain mass aeration process. **Proceedings of the XLII Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering and III Pan-American Congress on Computational Mechanics**, ABMEC-IACM, 2021. Citado 1 vez na página 22.

ROBERTS, K.; WEISS, N. Convective difference schemes. **Mathematics of Computation**, JSTOR, v. 20, n. 94, p. 272–299, 1966. Citado 2 vezes nas páginas 21, 37.

ROY, C. J. Review of code and solution verification procedures for computational simulation. **Journal of Computational Physics**, v. 205, p. 131–156, 2005. Citado 1 vez na página 28.

ROY, C. J.; SINCLAIR, A. J. On the Generation of Exact Solutions for Evaluating Numerical Schemes and Estimating Discretization Error. **Journal of Computational Physics**, v. 228, p. 1790–1802, 2009. Citado 1 vez na página 28.

ROY, C. J.; NELSON, C.; SMITH, T.; OBER, C. Verification of Euler/Navier–Stokes codes using the method of manufactured solutions. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, Wiley Online Library, v. 44, n. 6, p. 599–620, 2004. Citado 1 vez na página 28.

ROY, P.; ANAND, N.; DONZIS, D. A parallel multigrid finite-volume solver on a collocated grid for incompressible Navier-Stokes equations. **Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals**, Taylor & Francis, v. 67, n. 5, p. 376–409, 2015. Citado 1 vez na página 42.

SALARI, K.; KNUPP, P. **Code Verification by the Method of Manufactured Solutions**. [S.l.], 2000. Citado 1 vez na página 28.

SILVA, J. S.; CORRÊA, P. C. Estrutura, composição e propriedades dos grãos. In: SECAGEM e armazenagem de produtos agrícolas. [S.l.]: Editora Aprenda Fácil, Viçosa, MG, 2000. Citado 1 vez na página 45.

STEINBERG, S.; ROACHE, P. J. Symbolic Manipulation and Computational Fluid Dynamics. **Journal of Computational Physics**, v. 57, p. 251–284, 1985. Citado 1 vez na página 28.

TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. **Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer**. [S.l.: s.n.], 1982. v. 2. Citado 5 vezes nas páginas 32, 34, 41, 42.

THACKER, B. H.; DOEBLING, S. W.; HEMEZ, F. M.; ANDERSON, M. C.; PEPIN, J. E.; RODRIGUEZ, E. A. Concepts of model verification and validation. Los Alamos National Lab., 2004. Citado 1 vez na página 22.

THOMAS, L. H. Elliptic problems in linear difference equations over a network. **Watson Sci. Comput. Lab. Rept., Columbia University, New York**, v. 1, p. 71, 1949. Citado 1 vez na página 39.

THOMPSON, T.; PEART, R.; FOSTER, G. Matllematical simulation of corn drying a new model. **Transaction of the ASAE**, v. 11, n. 4, p. 582–586, 1968. Citado 1 vez na página 25.

THOMPSON, T. L. Temporary storage of high-moisture shelled corn using continuous aeration. **Transactions of the ASAE**, American Society of Agricultural e Biological Engineers, v. 15, n. 2, p. 333–0337, 1972. Citado 4 vezes nas páginas 21, 25, 27, 47.

THORPE, G. R. Modelling ecosystems in ventilated conical bottomed farm grain silos. **Ecological Modelling**, Elsevier, v. 94, n. 2-3, p. 255–286, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 26, 44.

THORPE, G. R. Ambient Air Properties in Aeration. In: **THE Mechanics and Physics of Modern Grain Aeration Management**. [S.l.]: CRC Press, 2001. cap. 3, p. 79–120. Citado 1 vez na página 47.

THORPE, G. R. Physical basic of aeration. In: THE Mechanics and Physics of Modern Grain Aeration Management. [S.l.]: CRC Press, 2001. cap. 4, p. 125–185. Citado 22 vezes nas páginas 21–23, 26, 27, 29, 44–49, 84, 85.

TRYGGVASON, G. **Computational Fluid Dynamics**. [S.l.: s.n.], 2017. University of Notre Dame. Disponível em: <http://www.nd.edu/gtryggva/CFD-Course/>. Acessado em: 2021–09–22. Citado 2 vezes nas páginas 39, 40.

VAN GENUCHTEN, M.; ALVES, W. J. **Analytical Solutions of the One-Dimensional Convective-Dispersive Solute Transport Equation**. [S.l.: s.n.], jun. 1982. v. 1661. Citado 2 vezes nas páginas 50, 51.

VARGAS, A. P. S. **Multiextrapolação de Richardson e esquemas de 1a e 2a ordens, mistos e Crank-Nicolson sobre as equações 2D de advecção-difusão e Fourier**. 2013. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba, Brasil. Citado 1 vez na página 33.

VEERARAGAVAN, A.; BERI, J.; GOLLAN, R. Use of the method of manufactured solutions for the verification of conjugate heat transfer solvers. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 307, p. 308–320, 2016. Citado 1 vez na página 28.

VELURI, S.; ROY, C.; LUKE, E. Comprehensive code verification for an unstructured finite volume CFD code. In: 48TH AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition. [S.l.: s.n.], 2010. P. 127. Citado 1 vez na página 28.

VON NEUMANN, J.; RICHTMYER, R. D. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. **Journal of applied physics**, American Institute of Physics, v. 21, n. 3, p. 232–237, 1950. Citado 3 vezes nas páginas 21, 29, 39.

WEBER, É. A. **Exelência em beneficiamento e armazenagem de grãos**. [S.l.]: Salles, 2005. Citado 1 vez na página 23.

XUAN, G.; ZHENG, H.; XIAOYU, S. *et al.* A Two-dimensional lattice Boltzmann method for compressible flows. **Acta Informatica Malaysia (AIM)**, Zibeline International Publishing, v. 1, n. 1, p. 32–35, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 21, 29.

ZIEGLER, V.; PARAGINSKI, R. T.; FERREIRA, C. D. Grain storage systems and effects of moisture, temperature and time on grain quality–A review. **Journal of Stored Products Research**, Elsevier, v. 91, p. 101770, 2021. Citado 1 vez na página 20.