

Exemplos de Métodos Computacionais Aplicados a Problemas na Modelagem Matemática

Professor

Pedro Augusto Pereira Borges¹

(pborges@unijui.tche.br)

Edson L. Padoin²

(padoin@unijui.tche.br)

Resumo

Neste trabalho foi desenvolvida a solução do problema transiente de transferência de calor em uma placa plana homogênea retangular, com condições de fronteira não homogêneas e fonte de calor, usando o Método das Diferenças Finitas (MDF) com esquemas explícito e implícito. Foram implementadas soluções em processamento paralelo e analisado o número ótimo de nodos processadores para a solução do problema proposto. Como ilustrações de trabalhos que podem ser resolvidos pelo MDF foram apresentadas algumas aplicações em problemas de modelagem matemática em secagem de grãos e ciência solo.

¹Graduado em Matemática pela Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul – UNIJUÍ. Mestre em Educação pela Universidade de Campinas, UNICAMP e Mestre em Matemática pela UNIJUÍ, Doutor em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul, UFRGS. Professor na UNIJUÍ junto ao Departamento de Física, Estatística e Matemática – DeFEM, atuando nas disciplinas de Cálculo e Equações Diferenciais na graduação e na Linha de Pesquisa de Fenômenos de Transporte do Programa de Pós-Graduação de Mestrado em Modelagem Matemática da UNIJUÍ.

²Graduado em Informática pela Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul – UNIJUÍ. Mestre em Engenharia de Produção – Tecnologia da Informação pela Universidade Federal de Santa Maria nas áreas de Processamento Paralelo e Distribuído. Professor na Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul junto ao Departamento de Tecnologia – DeTEC atuando nas disciplinas de Sistemas Operacionais, Sistemas Distribuídos e Sistemas de Informações Distribuídas bem como atividades da chefia do Departamento.

3.1. Introdução

A utilização de símbolos e estruturas matemáticas para descrever fenômenos é uma prática comum nas Ciências, particularmente daquelas que estudam os fenômenos físicos e econômicos. A expressão de leis gerais na forma de equações, permite a descrição e o controle de uma série de fenômenos e o conseqüente desenvolvimento de tecnologias que resultam no aperfeiçoamento de máquinas, otimização de processos industriais, agricultura de alta precisão, estratégias de comércio, etc. Esse processo de conhecer os fenômenos, descrevê-los na forma de símbolos e estruturas matemáticas é a essência da Modelagem Matemática.

A Figura 3.1 apresenta um fluxograma com as principais etapas da Modelagem matemática.

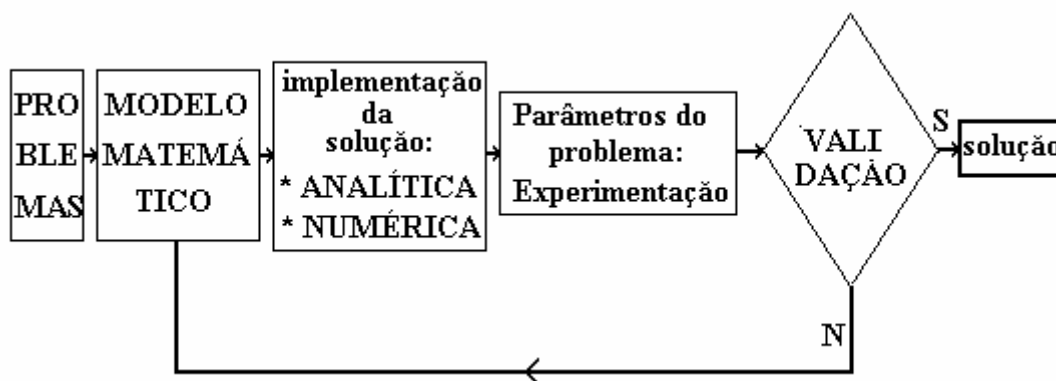


Figura 3.1 – Etapas da Modelagem Matemática

Os tipos de problemas resolvidos com modelagem podem ser de qualquer área de interesse do homem, desde que seja possível escrevê-los em linguagem matemática. Geralmente são problemas reais, associados à indústria, engenharia, comércio, economia, administração, agricultura, natureza, ciências básicas, etc. A realidade inerente a estes problemas, no entanto, é muito complexa. É praticamente impossível conhecer e monitorar todas as variáveis e parâmetros envolvidos no problema. Por isso, é necessário simplificar a realidade, escolhendo as variáveis com maior interferência no comportamento dos fenômenos e com elas construir o modelo matemático. O grau de simplificação depende da precisão desejada na solução. Para descrever o movimento de projéteis, um modelo simples levaria em conta apenas as variáveis espaciais no plano (x e y), o tempo, o ângulo de lançamento e a velocidade inicial: este modelo, conhecido como modelo de Galileu, é composto apenas por uma função vetorial e é suficientemente preciso para pequenos intervalos de tempo e pequenas distâncias, como uma pequena pedra jogada por uma criança de um lado para outro em uma rua estreita. Para tiros de longa distância outras variáveis devem ser levadas em conta: a resistência do ar, a variação da gravidade com a altura, o formato do projétil, a força, direção e sentido do vento e a rotação do projétil. Este modelo exige um sistema de equações diferenciais ordinárias com coeficientes variáveis, cuja solução só se viabiliza numericamente.

O modelo matemático é um conjunto de estruturas matemáticas (Equações, Sistemas de Equações Algébricas ou Diferenciais, Matrizes, Funções, Números, etc) que descrevem as relações entre as variáveis do problema. Neste trabalho serão

considerados apenas modelos na forma de equações diferenciais parciais. A implementação da solução do problema consiste na solução destas equações, que pode ser obtida na forma analítica ou na forma numérica. As soluções analíticas implicam em simplificações do problema, tanto nas condições de fronteira como na variabilidade dos coeficientes. Por isso seu uso é muito limitado na solução de problemas práticos. As soluções numéricas são mais versáteis e permitem extrapolar essas limitações com facilidade, porém exigem implementação computacional com algoritmos de solução muitas vezes complexos e alta velocidade de processamento.

A maior parte do tempo gasto pelo pesquisador no processo de modelagem esta na implementação numérica da solução. No entanto, a garantia de um bom modelo, não está na complexidade do modelo, ou do programa que implementa sua solução. Um modelo só é bom quando descreve o comportamento das variáveis do problema com a precisão desejada. Como verificar se o modelo é bom? Essa etapa é conhecida como validação do modelo. Pode ser feita de forma teórica ou de forma empírica (física). A validação teórica é a comparação dos resultados do modelo proposto com resultados obtidos por outros modelos, já validados de alguma forma total ou parcialmente. A validação empírica é a comparação dos resultados obtidos com o modelo proposto com resultados de experimentos. É necessário observar que se um modelo não produz dados coerentes com os dados experimentais ele deve ser reformulado quantas vezes for necessário até que atinja o nível de precisão desejado.

Enquanto que a proposição dos modelos depende mais da observação e análise do fenômeno, a implementação do modelo com todas as suas variações e não linearidades, depende fortemente da capacidade de processamento dos computadores. Por esse motivo, grande parte dos modelos utilizados atualmente teve sua origem na primeira metade do século XX, mas sua implementação só foi possível nos últimos 50 anos.

Mesmo com a evolução dos computadores e dos algoritmos de solução, muitas aplicações ainda exigem um tempo computacional incômodo para o programador fazer testes e exibir os resultados dos programas. O processamento paralelo é uma alternativa que se coloca pra resolver este tipo de problema.

Neste trabalho foi desenvolvida a solução do problema transiente de transferência de calor em uma placa plana homogênea retangular, com condições de fronteira não homogêneas e fonte de calor, usando o Método das Diferenças Finitas (MDF). Foram implementadas soluções em processamento paralelo e analisado o número ótimo de nodos processadores para a solução do problema proposto. Como ilustração de trabalhos que podem ser resolvidos pelo MDF foram apresentadas algumas aplicações em problemas de modelagem matemática em secagem de grãos e ciência solo.

3.2. Transferência de calor em uma placa plana

Um problema clássico de aplicação de métodos numéricos é a transferência de calor em uma placa plana. A solução deste problema é apresentada a seguir usando o método das diferenças finitas.

3.2.1. Modelo matemático de transferência de calor em uma placa plana homogênea e isotrópica

O processo de transferência de calor em uma placa plana retangular, cujos lados estão submetidos a diferentes temperaturas T_1 , T_2 , T_3 e T_4 e com uma fonte de calor F no centro, como ilustra a Figura 3.2, ocorre pela troca de energia entre as partículas do material de um ponto com mais energia para outro com menos. Esse processo é conhecido como condução do calor.

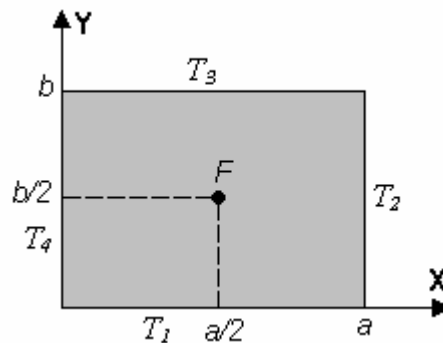


Figura 3.2 – Placa plana homogênea.

Considerando que todos os pontos da placa estejam a uma temperatura inicial T_o e sendo esta temperatura diferente das temperaturas das bordas e $F \neq 0$, o problema que se coloca é determinar a temperatura em qualquer ponto interno da placa em um dado instante de tempo.

Para uma placa isotrópica, as propriedades térmicas do material são as mesmas em qualquer direção. Nesse caso, o modelo matemático que relaciona as variáveis do problema é a equação da energia, cuja dedução pode ser encontrada em [ÖZI 93], [INC 92] entre outros.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{k} F(x, y, t), \text{ para } 0 < x < a \text{ e } 0 < y < b \text{ e } t > 0 \quad (1)$$

$$T(x, 0, t) = T_1, \text{ para } 0 < x < a \text{ e } t > 0 \quad (2)$$

$$T(a, y, t) = T_2, \text{ para } 0 < y < b \text{ e } t > 0 \quad (3)$$

$$T(x, b, t) = T_3, \text{ para } 0 < x < a \text{ e } t > 0 \quad (4)$$

$$T(0, y, t) = T_4, \text{ para } 0 < y < b \text{ e } t > 0 \quad (5)$$

$$T(x, y, 0) = T_o, \text{ para } 0 < x < a \text{ e } 0 < y < b \quad (6)$$

onde T é a temperatura ($^{\circ}\text{C}$)

x e y são as variáveis espaciais (m)

t é a variável temporal (s)

a e b são as dimensões da placa (m)

α é a difusividade térmica (m^2/s)

k é a condutividade térmica (W/mK) e

F é a fonte de calor (W/m s).

A solução da equação diferencial parcial (1) com as condições de fronteira (2) a (5) é uma função $T(x,y,t)$ que dá a temperatura de cada ponto interno da placa, em cada instante de tempo. Existem métodos analíticos (Método de Separação de Variáveis, Transformadas de Laplace além de outros [ÖZI 93], [DUF 94] e numéricos (Método das Diferenças Finitas - MDF [SMI 85], Método dos Elementos Finitos [SEG 76], Método dos Volumes Finitos [PAT 80] e [MAL 85] para resolver este problema. O MDF é um dos mais conhecidos e será descrito resumidamente a seguir.

3.2.2. Soluções numéricas: Método das Diferenças Finitas

A aplicação do MDF para o problema proposto pode ser resumido em três etapas:

- 1ª) Discretização do domínio (malha espacial) e das derivadas
- 2ª) Escolha de um esquema temporal
- 3ª) Cálculo de $T(x,y,t)$.

A discretização do domínio consiste em considerar uma malha cuja distância entre os nós medem Δx na direção X e Δy na direção Y . O tamanho das células pode ser variável, porém neste trabalho será considerado constante. Os valores de $T(x,y,t)$ são calculados nos nós da malha para cada instante de tempo. A discretização das derivadas da equação (1) é feita com base no truncamento da Série de Taylor, considerando uma malha como ilustra a Figura 3.3.

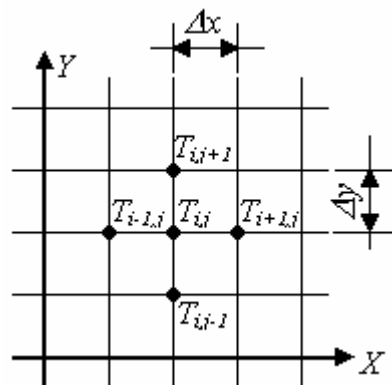


Figura 3.3 – Malha espacial de discretização.

Usando diferenças centrais para o cálculo das derivadas espaciais, diferenças adiantadas para a derivada temporal e levando tais discretizações na equação (1), obtém-se

$$\frac{T_i^l - T_i^o}{\Delta t} = \alpha \left(\frac{T_{i-1}^p - 2T_i^p + T_{i+1}^p}{\Delta x^2} + \frac{T_{j-1}^p - 2T_j^p + T_{j+1}^p}{\Delta y^2} \right) + \frac{1}{k} F(x, y, t) \quad (7)$$

onde os sub-índices i e j indicam a posição na malha espacial,
o sobre-índice p indica a posição na malha temporal.

Os valores do sub-índice p definem o esquema temporal: Se $p = 0$ o valor de T refere-se a iteração temporal anterior; se $p = 1$ o valor de T refere-se a iteração temporal presente. Se $p = 0$ na equação (7), o esquema temporal é chamado explícito, onde todos os valores de T^o são conhecidos da iteração anterior e T_i^l que é a incógnita da equação.

Nesse caso, todos os valores de temperatura da iteração presente são calculados com base nos valores de T da iteração anterior (por isso o nome explícito) e a equação (7) pode ser escrita como

$$T_{i,j}^l = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (T_{i-1,j}^o + T_{i+1,j}^o) + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta y^2} (T_{i,j-1}^o + T_{i,j+1}^o) + \left(1 - \frac{2\alpha \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{2\alpha \Delta t}{\Delta y^2} \right) T_{i,j}^o + \frac{\Delta t}{k} F(x, y, t) \quad (8)$$

A equação (8) é aplicada para todos os pontos internos da malha e assim, o campo de temperatura é calculado explicitamente para cada iteração temporal. O método explícito é facilmente implementado computacionalmente, mas apresenta problema de convergência. No caso em estudo, a convergência é garantida escolhendo Δx , Δy e Δt de tal forma que o coeficiente de $T_{i,j}^o$ seja positivo.

Se $p = 1$ na equação (7) o esquema temporal é chamado implícito, onde todos os valores das temperaturas (com exceção de $T_{i,j}^o$) são desconhecidos e devem ser calculados concomitantemente, nesse caso a equação (7) pode ser escrita como

$$\left(1 + \frac{2\alpha \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{2\alpha \Delta t}{\Delta y^2} \right) T_{i,j}^l = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (T_{i-1,j}^l + T_{i+1,j}^l) + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta y^2} (T_{i,j-1}^l + T_{i,j+1}^l) + \frac{\Delta t}{k} F(x, y, t) + T_{i,j}^o \quad (9)$$

Para cada ponto $T(i,j)$ da malha, a equação (9) dá uma equação algébrica de 1º grau, com 3, 4 ou 5 incógnitas, além dos valores da temperatura nas fronteiras, $T_{i,j}^o$ e fonte F conhecidos. Essas equações formam um sistema linear, com solução única (as linhas da matriz dos coeficientes do sistema são linearmente independentes e esta matriz é quadrada). A equação (10) ilustra um sistema linear correspondente a uma malha retangular de 5 nós (ou 4 células).

$$\begin{pmatrix}
 Ap & -Ax & 0 & -Ay & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 -Ax & Ap & -Ax & 0 & -Ay & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & -Ax & Ap & 0 & 0 & -Ay & 0 & 0 & 0 \\
 -Ay & 0 & 0 & Ap & -Ax & 0 & -Ay & 0 & 0 \\
 0 & -Ay & 0 & -Ax & Ap & -Ax & 0 & -Ay & 0 \\
 0 & 0 & -Ay & 0 & -Ax & Ap & 0 & 0 & -Ay \\
 0 & 0 & 0 & -Ay & 0 & 0 & Ap & -Ax & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & -Ay & 0 & -Ax & Ap & -Ax \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -Ay & 0 & -Ax & Ap
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 T_{2,2} \\
 T_{2,3} \\
 T_{2,4} \\
 T_{3,2} \\
 T_{3,3} \\
 T_{3,4} \\
 T_{4,2} \\
 T_{4,3} \\
 T_{4,4}
 \end{pmatrix}
 =
 \begin{pmatrix}
 S + T_{2,2} + AxT_{2,1} + AyT_{1,2} \\
 S + T_{2,3} + AyT_{1,3} \\
 S + T_{2,4} + AxT_{2,5} + AyT_{1,4} \\
 S + T_{3,2} + AxT_{3,1} \\
 S + T_{3,3} \\
 S + T_{3,4} + AxT_{3,5} \\
 S + T_{4,2} + AxT_{4,1} + AyT_{5,2} \\
 S + T_{4,3} + AyT_{5,3} \\
 S + T_{4,4} + AxT_{4,5} + AyT_{5,4}
 \end{pmatrix}
 \quad (10)$$

onde Ap é o coeficiente de $T_{i,j}^I$ na equação (9)

Ax é o coeficiente de $T_{i+1,j}^I$ e $T_{i-1,j}^I$ na equação (9)

Ay é o coeficiente de $T_{i,j+1}^I$ e $T_{i,j-1}^I$ na equação (9) e

S o termo fonte com seu respectivo coeficiente na equação (9).

A precisão do resultado (campo de temperatura) aumenta na medida que os incrementos Δx , Δy e Δt tendem a zero. Do ponto de vista computacional e prático, é necessário encontrar um tamanho de malha que produza resultados com a precisão desejada. Para isso, pode-se fazer dois tipos de testes:

1º) Comparar o resultado numérico com o resultado de uma solução analítica (se houver) e

2º) Supondo que a solução numérica e a implementação computacional estejam corretas, verificar se o resultado tende para um determinado valor constante, na medida que a malha é refinada.

O trabalho de refinamento da malha espacial implica em aumentar o número de nós (N). Para cada número de nós da malha corresponde um sistema semelhante ao (11) com $(N-2)^2$ equações (ordem da matriz do sistema). Ou seja, o tamanho do sistema aumenta com potência 2, exigindo mais esforço computacional, visto que para cada iteração temporal é necessário resolver um sistema.

A solução das equações (8) e (9) usando a construção de sistemas lineares exige que para cada geometria seja feito um algoritmo para geração da matriz dos coeficientes e do vetor dos termos independentes. Para resolver de modo geral este problema existem outros métodos de implementação computacional, como por exemplo, o método das linhas, que resolve ponto a ponto para o caso explícito e iterativamente para o caso implícito.

3.2.3. Implementação computacional e análise da precisão do resultado numérico

Foi realizada inicialmente a implementação computacional da solução do problema proposto em (1) em MATLAB, usando o método explícito. Foi resolvido o

caso homogêneo (temperatura das fronteiras iguais zero) para testar o programa comparando os resultados com uma solução analítica. A Figura 3.4 mostra os valores da temperatura para $y=b/2$, obtidos pelas soluções numéricas e analítica. Observa-se que na medida que N aumenta os valores da solução numérica tendem para os da solução analítica, ficando praticamente coincidentes quando $N \geq 47$, o que significa que a solução numérica está correta.

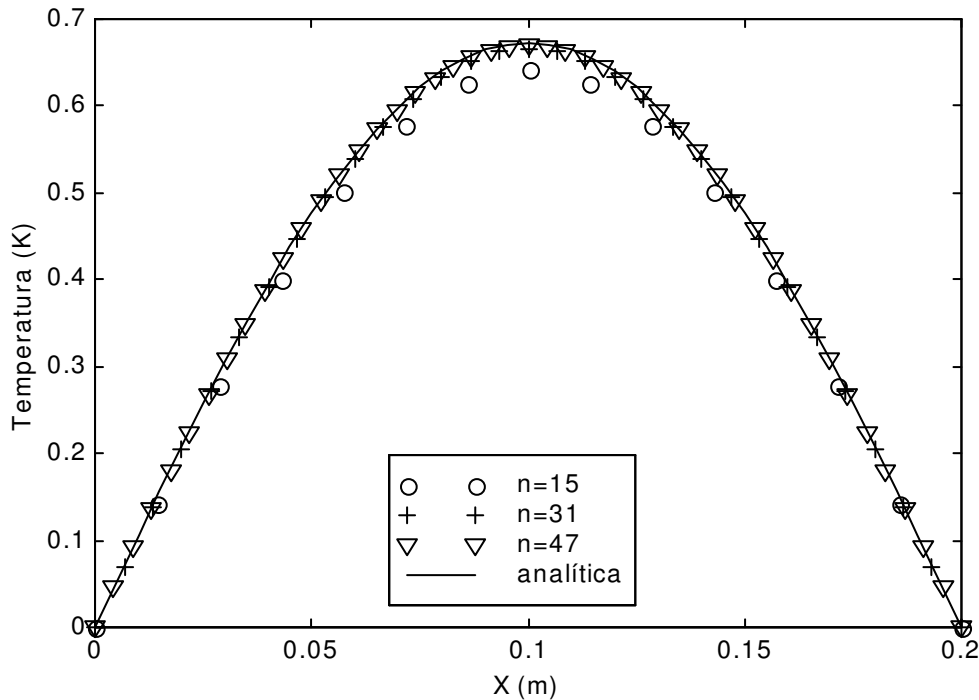


Figura 3.4 – Comparação entre a solução numérica com diferentes números de células e a solução analítica, para o problema homogêneo (tempo=50s, $\alpha=0.0000971 \text{ W/m}^2\text{K}$, $y=b/2$, $a=b=0.2\text{m}$)

Foi implementada também a solução do problema proposto usando o método implícito, em linguagem C. Os resultados obtidos para os mesmos tempos e posições na placa foram os mesmos das soluções analítica e numérica explícita. Usando a solução implícita foi montado um Cluster com 10 nodos processadores Celeron D 2,6 Ghz, 256 MB de RAM e HD de 40 GB rodando sistema operacional SuSE 9.1, PVM 3.4.4, interconectados com Fast Ethernet 100 baseT. Os tempos de execução obtidos são apresentados na Figura 3.5, onde observa-se que o melhor tempo obtido é na execução com 7 nodos, considerando uma matriz de 40 nós ou ordem 1444.

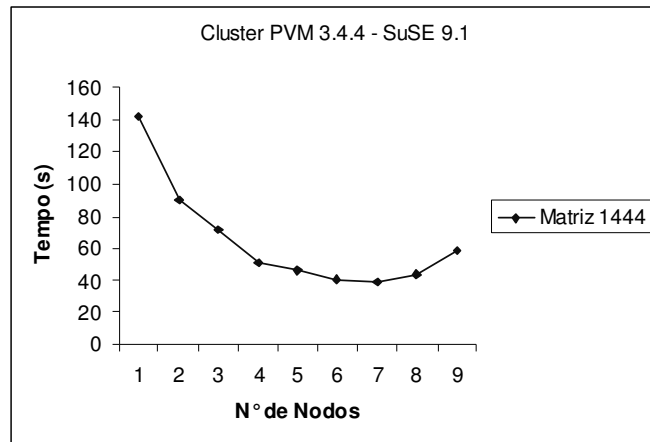


Figura 3.5 – Tempos de execução do cluster

A solução do problema não homogêneo (condições de fronteira não nulas e com fonte) é mostrada na Figura 3.6, como ilustração da versatilidade da solução numérica em relação a variabilidade das condições de fronteira e inclusão do termo fonte. Observa-se claramente a influência da fonte no centro da placa e as condições de fronteira não homogêneas (diferentes de zero). É importante observar que tais inclusões tornariam a solução analítica bem mais complexa em comparação com a solução do problema (1) homogêneo. Na solução numérica estas inclusões podem ser feitas sem acréscimo de complexidade ou esforço computacional significativo.

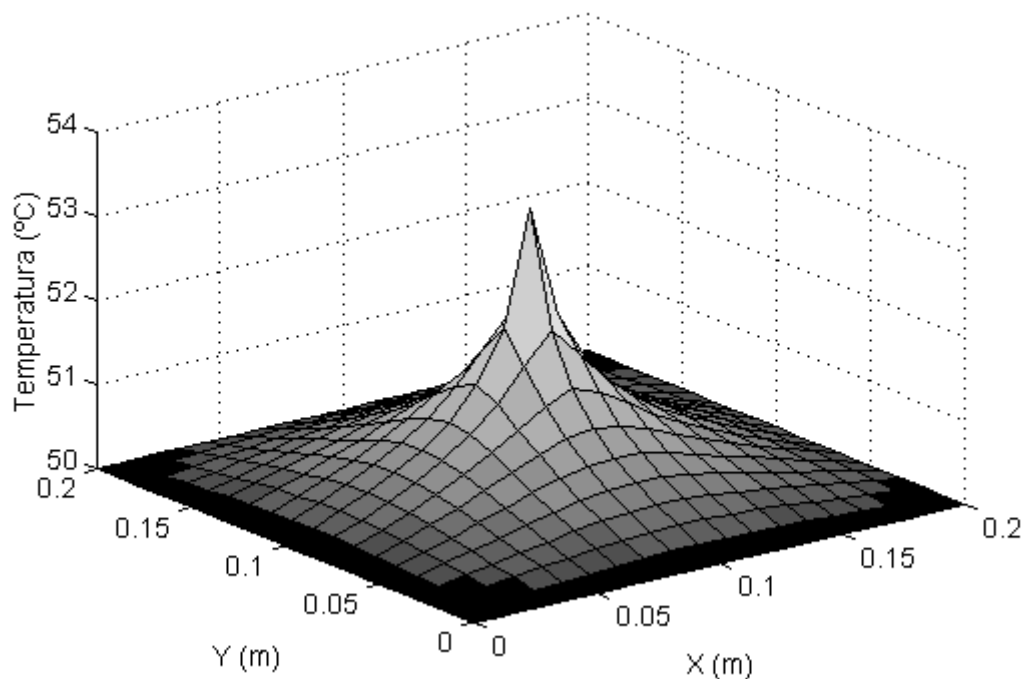


Figura 3.6 – Distribuição da temperatura na placa. $T = 50^{\circ}\text{C}$ nas fronteiras, $T_0 = 50^{\circ}\text{C}$ e $t=100\text{s}$, $\alpha = 0,0000971 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ e $k = 237 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$.

3.3. Problemas de modelagem matemática

Com o objetivo de ilustrar o uso dos métodos computacionais serão apresentados dois exemplos de problemas de Modelagem Matemática: um em secagem de grãos e outro em ciência do solo.

3.3.1. Secagem de grãos

O secador de leito fixo é constituído por uma caixa completamente cheia de grãos, pela qual passa um fluxo de ar ambiente aquecido e seco. Ao passar entre os grãos úmidos, o ar seco provoca um gradiente de umidade na superfície do grão, gerando um fluxo de vapor de água, do grão para o ar. Esta água é transportada pelo ar, para fora do secador.

Em [KHA 01] encontra-se a dedução das equações do modelo matemático para secagem de soja, baseado em dados empíricos dos fluxos de massa (Φ_m) e calor (Φ_h).

$$\frac{\partial M}{\partial t} = - \frac{\Phi_m a}{\rho_g} \quad (11)$$

$$\frac{\partial T_g}{\partial t} = - \frac{a \{ \Phi_h + \Phi_m [H_v + (C_{p_v} - C_{p_w}) T_g] \}}{\rho_g (C_{p_g} + M C_{p_w})} \quad (12)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + W_a \frac{\partial Y}{\partial z} = \frac{\Phi_m a (1 - \varepsilon)}{\rho_a \varepsilon} \quad (13)$$

$$\frac{\partial T_a}{\partial t} + W_a \frac{\partial T_a}{\partial z} = \frac{a (1 - \varepsilon)}{\varepsilon \rho_a (C_{p_a} + Y C_{p_v})} [\Phi_m C_{p_v} (T_g - T_a) + \Phi_h] \quad (14)$$

onde M é o teor de umidade do grão (adimensional)

Y é o teor de umidade do ar (adimensional)

T_g e T_a são as temperaturas do grão e do ar, respectivamente. ($^{\circ}\text{C}$)

Φ_m e Φ_h são os fluxos de massa e calor, respectivamente ()

a é a razão entre a área da superfície externa e o volume do grão (m^{-1})

V_a é a velocidade do ar de secagem (m s^{-1})

H_v é o calor latente de vaporização da água (J kg^{-1})

ρ_g é a massa específica do grão (kg m^{-3})

ε é a porosidade (adimensional)

C_p é o calor específico a pressão constante ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$)

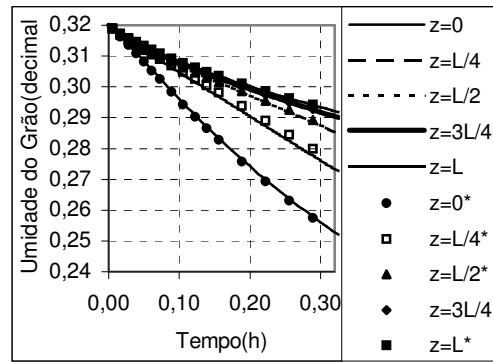
C_v é o calor específico do vapor de água ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$)

As condições iniciais são: $X = X_0$; $T_g = T_{g0}$; $Y = Y_0$ e $T_a = T_{a0}$ em $(0, z)$ para $0 < z < L$ e condições de fronteira $Y = Y(t, 0)$ e $T_a = T(t, 0)$ para $0 < t < \infty$.

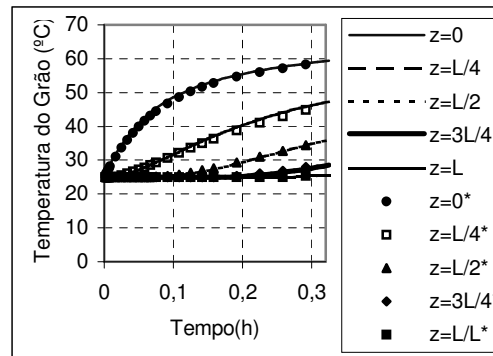
Os fluxos de massa e calor são termos variáveis no tempo e no espaço e dependem das quatro variáveis principais, determinando um forte acoplamento entre as

equações, o que cria problema de convergência, tal como a exigência de passo temporal muito pequeno ($\sim 0,01s$) no método explícito, por exemplo.

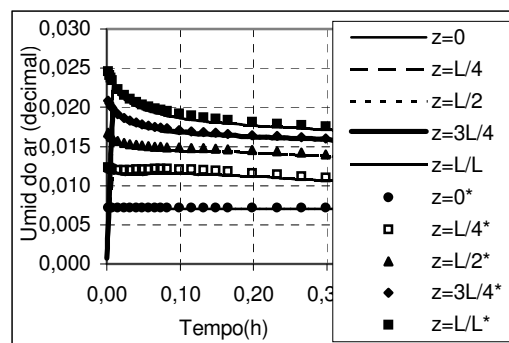
O sistema das equações (10) a (14) foi resolvido usando o Método das Diferenças finitas e o Método dos Volumes Finitos em [BOR 01] e os resultados são apresentados nas Figuras 3.7 a 3.10.



**Figura 3.7 – Comparação entre Diferenças Finitas(*) e Volumes Finitos (—):
Umidade do Grão**



**Figura 3.8 - Comparação entre Diferenças Finitas(*) e Volumes Finitos (—):
Temperatura do Grão**



**Figura 3.9 – Comparação entre Diferenças Finitas(*)e Volumes Finitos (—):
Umidade do Ar**

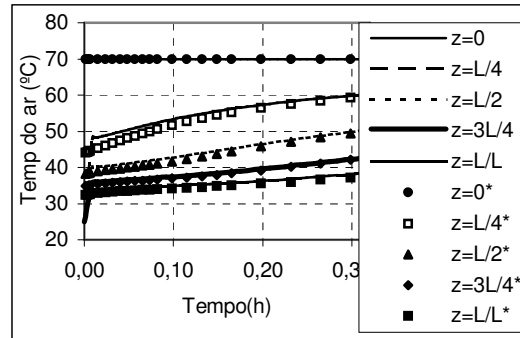


Figura 3.10 - Comparação entre Diferenças Finitas(*) e Volumes Finitos (—): Temperatura do Ar

3.3.2. Movimento de água no solo

O movimento da água no solo ocorre devido à existência de gradientes de potencial total (ψ). Este potencial é a soma dos potenciais matricial (ψ_m) e gravitacional (ψ_g), para solos não saturados, e gravitacional e de pressão (ψ_p) para os solos saturados. O potencial osmótico também interfere no movimento da água, mas não será considerado neste trabalho, pois está associado à presença de películas (por exemplo, raízes ou a ação de potenciais químicos).

A equação de Richards relaciona as variações do teor de umidade com as variações do potencial total em um solo isotrópico e homogêneo. A dedução desta equação é encontrada em [REI 90] e [LIB 95] com base na Lei de Darcy e no princípio de conservação de massa. Em coordenadas cilíndricas esta equação tem a forma.

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[k_r(\Theta) r \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \phi} \left[k_\phi(\Theta) \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[k_z(\Theta) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] \quad (15)$$

onde Θ é o teor de umidade volumétrico do solo (adimensional)

Ψ é o potencial total (Pa)

r e z são as variáveis espaciais (m)

ϕ é o ângulo polar (rad)

t é o tempo (s), e

K_r , K_ϕ e K_z são as condutividades hidráulicas nas direções r e z , respectivamente. (m^2/sPa).

Para um problema de eixo simétrico a variação do potencial em relação a ϕ é nula e a equação (2) torna-se.

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[k_r(\Theta) r \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[k_z(\Theta) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right] \quad (16)$$

As condições de fronteira para o caso bi-dimensional utilizadas neste trabalho, são:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial z}(r, 0, t) = \Phi_i \text{ para } 0 < r < r_i \text{ e } t < t_i \quad (17)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial z}(r, 0, t) = 0 \text{ para } r_i < r < R \text{ se } t > t_i \text{ e } 0 < r < R \text{ se } t > t_i \quad (18)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial z}(r, H, t) = 0 \text{ para } 0 < r < R \text{ e } t > 0 \quad (19)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial r}(R, z, t) = 0 \text{ para } 0 < z < H \text{ e } t > 0 \quad (20)$$

$$\Theta(r, z, 0) = \Theta_o \text{ para } 0 < r < R \text{ e } 0 < z < H. \quad (21)$$

onde R é o raio do tubo de solo (m)

H é a altura do tubo (m)

r_i é o raio de irrigação (m)

t_i é o tempo de irrigação (s)

Φ_i é o fluxo de água na fronteira (m^3/s).

A condutividade hidráulica varia em função do teor de umidade do solo. De acordo com [MUA 76] e [VAN 80] ela pode ser calculada pela equação

$$K(\Theta) = K_o \Theta^l \left[1 - \left(1 - \Theta^{1/m} \right)^m \right]^2 \quad (22)$$

onde m é o parâmetro da curva característica do solo (adimensional)

l é um parâmetro de ajuste (adimensional) e

K_o é a condutividade hidráulica do solo saturado. (m^2/sPa).

A dependência entre condutividade hidráulica e teor de umidade do solo torna a equação de Richards não linear, o que inviabiliza o uso de soluções analíticas. Neste trabalho, foram implementadas soluções numéricas dos problemas uni e bidimensionais descritos pela equação (16), com condições de fronteira (17) a (21).

Foi usado o Método das Diferenças Finitas com diferenças centrais, por se tratar de um problema praticamente difusivo, devido à reduzida velocidade com que a água se desloca no solo. Como é um problema de eixo simétrico, o domínio de integração foi definido somente em função de r e z , sendo que os volumes considerados em cada célula correspondem a anéis de raio r_i , espessura Δr e altura Δz .

A simulação da irrigação foi realizada considerando um fluxo de água (Φ_i) na superfície dos cilindros. Foi irrigado um círculo de raio $r_i = 0,06 m$. Para implementar a simulação da irrigação na superfície, foi considerada uma condição de fronteira de segunda espécie.

Foi utilizada uma malha de 21 pontos, nas direções r e z e um intervalo de tempo de $1s$, obtendo-se pequena variação nos valores das variáveis para malhas mais refinadas. As Figuras 3.11 e 3.12 mostram a distribuição do teor de umidade do solo em uma seção longitudinal do tubo para $t = 1000 s$ e $t = 2500 s$, respectivamente, depois de efetuada a irrigação em $r = 0 m$. Observa-se claramente o deslocamento da frente de umidade na medida que passa o tempo.

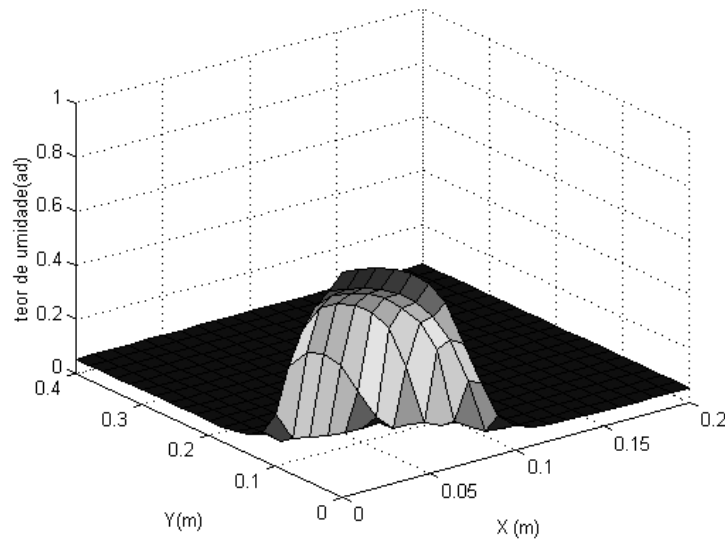


Figura 3.11 – Simulação da distribuição da umidade em uma seção longitudinal: tempo = 1000s.

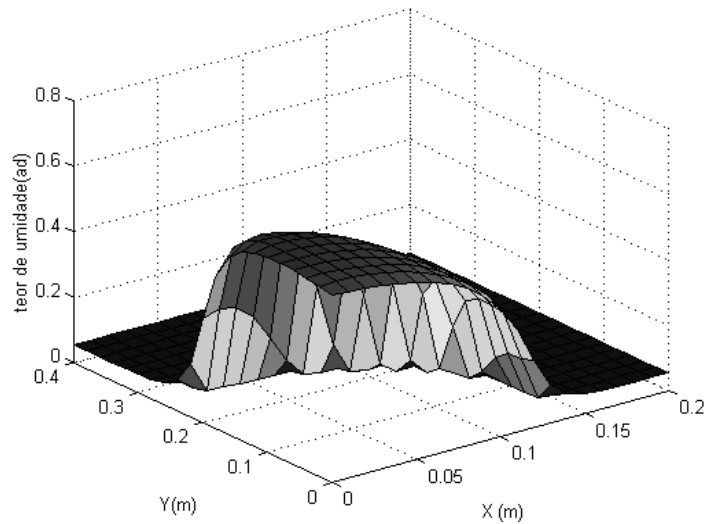


Figura 3.12 – Simulação da distribuição da umidade em uma seção longitudinal: tempo = 2500s.

3.4. Conclusão

Para o problema de difusão de calor na placa foi constatado que existe um número de células mínimo (mantida o mesmo intervalo de tempo) para o qual as soluções numéricas apresentam valores de temperatura praticamente iguais ao obtidos com soluções analíticas.

As soluções numéricas, apesar de demandarem razoável esforço computacional, são mais versáteis do que as analíticas no que se refere à inclusão de não homogeneidades – inclusive variáveis com o tempo e espaço - tanto nas condições de fronteira como nos termos fonte.

Foi observado que a execução da solução do problema de difusão com o uso de PAD diminuiu até 3,5 vezes o tempo de execução computacional, para as condições experimentadas.

Os problemas de secagem de grãos e distribuição da água no solo são modelos mais complexos do que a simples difusão do calor e foram apresentados neste trabalho como possíveis situações de aplicação de PAD em trabalhos futuros.

3.5. Bibliografia

- [BOR 01] Borges, P.A.P., Khatchatourian, O. A. e Viêlmo, H. A. Modelagem matemática de secagem de grãos: aplicação do método dos volumes finitos. XXIII CNMAC/2000, Santos, SP, 2000.
- [INC 92] Incropera, F. P. e Witt, D. P. de. Fundamentos de transferência de calor e de massa. Livros Técnicos e Científicos Editora, Rio de Janeiro, 1992.
- [DUF 94] Duffy, D.G. Transform Methods for solving partial differential equations. CRC Press, New York, 1994.
- [KHA 01] Khatchatourian, O.A.; Borges, P.A.P. and Petry, V.J. Mathematical model and numerical methods for simulation of dynamics of drying of soy grains in camera of fixed bed. In: *Proceedings of LACAFLUM 2001 - V Latin American and Caribbean Congress on Fluid Mechanics*, DHT-4, pp1-6, Universidad Simón Bolívar, May 14 – 17, 2001 , Caracas, Venezuela. 2001.
- [LIB 95] Libardi, P.L., Dinâmica da água no solo. Piracicaba 1995, 497p.
- [MAL 85] Maliska, C.R., 1985. Transferência do Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional, LTC, Rio de Janeiro.
- [MUA 76] Mualen, Y., A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated prous media. *Water Resour. Res.*;Washington. v.12, p. 513-522, 1976.
- [ÖZI 93] Özişik, M.N., Heat conduction. John Willey & Sons, New York, 1993.
- [PAT 80] Patankar, S.V.,1980. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, McGraw Hill, New York.
- [REI 90] Reichardt, K., A água em sistemas agrícolas. São Paulo: Editora Manoele Ltda, 1990.

- [SEG 76] Segerlind, L. J., Applied finite element analysis. New York, John Wiley & Sons, 1976.
- [SMI 85] Smith, G. D. Numerical solution of partial differential equations. Oxford University Press, Oxford, 1985.
- [VAN 80] Van Genuchten, M. T., Closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils In: Soil Sci. Soc. Am. J.; Madison, v.44, p.892-898, 1980.