

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

JOTAIR ELIO KWIATKOWSKI JUNIOR

MÚLTIPLA EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON PARA REDUZIR E ESTIMAR O
ERRO DE DISCRETIZAÇÃO NA SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO DA
MASSA DE GRÃOS

CURITIBA

2023

JOTAIR ELIO KWIATKOWSKI JUNIOR

MÚLTIPLA EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON PARA REDUZIR E ESTIMAR O
ERRO DE DISCRETIZAÇÃO NA SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO DA
MASSA DE GRÃOS

Tese apresentada ao curso de doutorado em
Métodos Numéricos em Engenharia (PPGMNE),
Setores de Ciências Exatas e de Tecnologia,
Universidade Federal do Paraná, como requisito
parcial à obtenção do título de Doutor em Méto-
dos Numéricos em Engenharia.

Orientador: Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki
Coorientador: Prof. Dr. Marcio Augusto Villela
Pinto

CURITIBA

2023

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

Kwiatkowski Junior, Jotair Elio

Múltipla extrapolação de Richardson para reduzir e estimar o erro de discretização na simulação do processo de aeração da massa de grãos / Jotair Elio Kwiatkowski Junior. – Curitiba, 2023.

1 recurso on-line : PDF.

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

Orientador: Luciano Kiyoshi Araki

Coorientador: Marcio Augusto Villela Pinto

1. Grãos – Armazenamento. 2. Fluidodinâmica computacional. 3. Método dos volumes finitos. 4. Aeração. I. Universidade Federal do Paraná. II. Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia. III. Araki, Luciano Kiyoshi. IV. Pinto, Marcio Augusto Villela. V. 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 tese de Doutorado de **JOTAIR ELIO KWIATKOWSKI JÚNIOR** intitulada: **MÚLTIPLA EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON PARA REDUZIR E ESTIMAR O ERRO DE DISCRETIZAÇÃO NA SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO DA MASSA DE GRÃOS**, sob orientação do Prof. Dr. LUCIANO KIYOSHI ARAKI, 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 doutor 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, 06 de Julho de 2023.

Assinatura Eletrônica

07/07/2023 16:04:13.0

LUCIANO KIYOSHI ARAKI

Presidente da Banca Examinadora

Assinatura Eletrônica

11/07/2023 08:37:05.0

SEBASTIÃO ROMERO FRANCO

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE ESTADUAL DO CENTRO-OESTE)

Assinatura Eletrônica

07/07/2023 15:25:34.0

DANIELA DE CARVALHO LOPES

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL REI)

Assinatura Eletrônica

10/07/2023 15:58:33.0

MATEUS DAS NEVES GOMES

Avaliador Externo (INSTITUTO FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica

10/07/2023 14:43:13.0

MANUEL OSORIO BINELLO

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE REGIONAL DO NOROESTE DO ESTADO DO RIO GRANDE DO SUL)

*Dedico esta tese ao menino que começou
como chão de fábrica em madeiras
e hoje foi além dos seus sonhos,
à minha esposa Adriana,
à minha mãe Sonia de Fatima Ribeiro
e ao meu pai Jotair (in memória).*

AGRADECIMENTOS

A Deus, sem ele nada seria possível.

À minha esposa Adriana Aparecida Zeni, por estar sempre ao meu lado em todos os momentos me apoiando, quem acompanha um doutorando deveria ganhar um título por toda a paciência..."Você foi agora a coisa mais importante...Que já me aconteceu neste momento... Em toda a minha vida... (Uma Arlinda Mulher - Mamonas Assassinas)"

À minha mãe Sonia, pelo amor incondicional e ao seu esposo Jonas pela amizade.

Aos meus orientadores, Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki e Prof. Dr. Marcio Augusto Villela Pinto, pela dedicação, paciência, inteligência e disponibilidade em me orientar, os meus mais sinceros agradecimentos e minha eterna admiração.

Agradeço, em especial ao amigo e colega Sandro Rodrigues sempre pronto em ajudar, pelas contribuições, apoio e incentivo durante esta jornada.

Aos colegas e amigos Daniel Rigoni e Marcelo Henrique Sabatini, pelas conversar, estudos e contribuições.

Aos membros da banca examinadora, Profa. Dra. Daniela de Carvalho Lopes, Prof. Dr. Manuel Osorio Binelo, Prof. Dr. Sebastião Romero Franco e Prof. Dr. Mateus das Neves Gomes, pelo tempo dispensado à leitura deste trabalho e pelas sugestões apontadas.

Aos professores e técnicos administrativos do Departamento de Computação (DeCOMP/UNICENTRO), em especial ao Prof. Mauro Miazaki, pela compreensão e pelos laboratórios utilizados nas simulações, neste período de Doutorado.

Aos meus familiares em especial minha irmã Shelly Ribeiro Kwiatkowski, meus irmãos Sheyene Ribeiro Kwiatkowski e Patrick Ribeiro Kwiatkowski..."Qual é a situação 95% que a gente já era... e as outros 5%.... aventuras e glórias" (Madagascar-O Filme), e meus sobrinhos Emilly, Arthur, Braian e Isabela. Agora, poderei passar mais finais de semanas com vocês.

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

*Assim os Dias Passarão
"Dezembro vai, janeiro vem
O tempo passa veloz como um trem
No rádio a notícia, um amigo se foi
Atrás dos mistérios que sempre buscou
Mais uma pra estrada, mais um fim de show
Ao som das guitarras do bom rock 'n' roll
O tempo traz suas lições
E as grava em nossos corações
Contando a história, assim como foi
Mostrando os caminhos que irão nos levar
Como se fosse o rio correndo pro mar
Como se fossem pedras no rio a rolar
Assim os dias passarão
Virão as novas gerações
Outras perguntas, prováveis canções
Outro mundo, outra gente, outras dimensões
E na hora marcada, em algum lugar
Uma estrela virá pra lhe acompanhar"*

**Renato Teixeira de Oliveira,
Almir Eduardo Melke Sater
e Paulo Simões**

RESUMO

A escala de produção agrícola tem se intensificado a cada ano, desta forma se faz necessário o estudo de novas tecnologias e métodos tanto para a produção quanto para o pós-colheita. Dessa forma, o principal objetivo deste trabalho é estimar e reduzir o erro de discretização na simulação feita a partir da modelagem matemática do processo de aeração da massa de grãos utilizando o modelo proposto por Thorpe. Para a solução desse modelo, efetuamos a discretização pelo método dos volumes finitos (MVF), com diferentes malhas e variamos a razão espaço-tempo. Para a discretização do modelo, utilizamos aproximações de segunda ordem, CDS-CN (*Central Difference Scheme - Crank-Nicolson*) e LS (*Leith Scheme*), usando a viscosidade artificial para controlar as oscilações não físicas geradas pelos métodos, e as aproximações de primeira ordem UDS-CN (*Upwind Difference Scheme*), UDS-Explícito e UDS-Implícito. Inicialmente, comparamos o MVF com o método das diferenças finitas (MDF) amplamente utilizado na literatura, verificando-se que o MVF apresenta erro menor do que o MDF, utilizando-se como base a solução fabricada. Para a ordem de acurácia das aproximações de primeira ordem, verificamos que a ordem efetiva tende à ordem assintótica e que seus valores são coerentes, indiferente da razão espaço-tempo. Para as aproximações de segunda ordem o mesmo não ocorre, devido às oscilações não físicas e, portanto, à dependência de uma razão espaço-tempo elevada. Assim, utilizando-se viscosidade artificial, dependente da malha, obtivemos valores para a ordem efetiva satisfatório, mesmo para as razões espaço-tempo mais baixas. Para a aplicação da MER (Múltipla Extrapolação de Richardson), o LS teve melhor desempenho. Finalmente, analisamos cinco estimadores de erro para a MER, sendo eles, Richardson, Richardson corrigido, Δ , Ψ e Ψ^* , dentre todos os estimadores, o estimador Δ não é acurado nem confiável, independente do método de discretização e a razão espaço-tempo utilizadas. Com relação aos estimadores Richardson, Richardson corrigido, Ψ e Ψ^* : para baixas razões espaço-tempo, o método UDS-Explícito não teve nenhum estimador que fosse acurado e confiável simultaneamente. Entretanto, os métodos LS, UDS-CN e UDS-Implícito tiveram os respectivos estimadores Richardson, Ψ e Ψ^* , acurados e confiáveis. Para altas razões espaço-tempo, todos métodos tiveram estimadores não confiáveis. Entretanto, na busca por estimadores acurados e confiáveis para tais razões espaço-tempo, podemos usar qualquer um dos métodos (LS, UDS-CN, UDS-Explícito e UDS-Implícito), mas levando em consideração apenas as malhas mais grossas. Portanto, o modelo do processo de aeração da massa de grãos proposto por Thorpe é descrito muito bem pelo MVF, provando que o LS é a melhor aproximação a serem utilizada com e sem a aplicação da MER.

Palavras-chaves: Armazenagem de Grãos. Dinâmica de Fluidos Computacional. Esquema de Leith. Método dos Volumes Finitos. Esquema *Upwind*. Modelo de Thorpe.

ABSTRACT

The scale of agricultural production has been intensifying every year, making it necessary to investigate new technologies and methods for both production and post-harvest processes. Consequently, the primary goal of this study is to assess and minimize discretization errors in the simulation based on the mathematical model of grain mass aeration, utilizing the model proposed by Thorpe. To address this model, we applied discretization using the finite volume method (FVM) with varying meshes and space-time ratios. In terms of model discretization, we employed second-order approximations, including CDS-CN (Central Difference Scheme - Crank-Nicolson) and LS (Leith Scheme), while integrating artificial viscosity to manage non-physical oscillations produced by the methods. We also utilized first-order approximations such as UDS-CN (Upwind Difference Scheme), UDS-Explicit, and UDS-Implicit. Initially, we compared the results of the finite volume method (FVM) with the more commonly used finite difference method (FDM) in the literature. We observed that the FVM demonstrated a lower error than the FDM, employing a manufactured solution as a reference. Assessing the order of accuracy for first-order approximations, we established that the effective order approaches the asymptotic order, maintaining consistency across various space-time ratios. However, the same consistency does not hold for second-order approximations due to non-physical oscillations, particularly when reliant on higher space-time ratios. By incorporating artificial viscosity dependent on the mesh, we achieved favorable outcomes for the effective order, even at lower space-time ratios. For the application of RRE (Repeated Richardson Extrapolation), the LS method outperformed the others. Finally, we evaluated five error estimators for RRE: Richardson, corrected Richardson, Δ , Ψ , and Ψ^* . Among these estimators, the Δ proved neither accurate nor reliable, regardless of the discretization method or space-time ratio employed. Regarding the Richardson, corrected Richardson, Ψ , and Ψ^* estimators, we observed that for low space-time ratios, the UDS-Explicit method lacked a consistently accurate and reliable estimator. However, the LS, UDS-CN, and UDS-Implicit methods exhibited accurate and reliable Richardson, Ψ , and Ψ^* estimators respectively. For high space-time ratios, all methods exhibited unreliable estimators. However, in the search for accurate and reliable estimators for such high space-time ratios, we can utilize any of the methods (LS, UDS-CN, UDS-Explicit, and UDS-Implicit), but considering only the coarser meshes. Therefore, the grain mass aeration process model proposed by Thorpe is well-described by the FVM, demonstrating that LS is the superior approximation to be employed both with and without the application of RRE.

Key-words: Grain Storage. Computational Fluid Dynamics. Leith Scheme. Finite Volume Method. Upwind Scheme. Thorpe's Model.

LISTA DE ALGORITMOS

1	APLICAÇÃO DA MER	61
2	CÁLCULO DA TEMPERATURA E DO TEOR DE ÁGUA DA MASSA DE GRÃOS COM O MÉTODO LS	81

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIGURA 1 – EXEMPLO DE TRANSFORMAÇÃO DO DOMÍNIO CONTÍNUO EM DOMÍNIO DISCRETIZADO.	29
FIGURA 2 – DISCRETIZAÇÃO EM VOLUMES FINITOS.	29
FIGURA 3 – TIPOS DE MALHAS ESTRUTURADAS.	30
FIGURA 4 – COMPONENTES DE UM SISTEMA DE AERAÇÃO.	33
FIGURA 5 – DISTRIBUIÇÃO DA CAPACIDADE ESTÁTICA DA PRODUÇÃO POR ESTADO.	36
FIGURA 6 – QUANTIDADE DA CAPACIDADE ESTÁTICA DA PRODUÇÃO POR ESTADO.	37
FIGURA 7 – VOLUME DE CONTROLE GENÉRICO, DE NÓ CENTRAL P , E SEUS VIZINHOS.	50
FIGURA 8 – REPRESENTAÇÃO DO VOLUME FICTÍCIO NA FRONTEIRA SUL.	53
FIGURA 9 – ESTRUTURA DE UMA MATRIZ TRIDIAGONAL.	55
FIGURA 10 – ANISOTROPIA GEOMÉTRICA.	56
FIGURA 11 – TIPO DE VARIÁVEL.	60
FIGURA 12 – DOMÍNIO DE CÁLCULO.	67
FIGURA 13 – DOMÍNIO DISCRETIZADO.	74
FIGURA 14 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO SEM O FATOR DE VISCOSIDADE ARTIFICIAL PARA CDS-CN.	83
FIGURA 15 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO SEM O FATOR DE VISCOSIDADE ARTIFICIAL PARA LS.	83
FIGURA 16 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO COM O FATOR DE VISCOSIDADE ARTIFICIAL PARA CDS-CN.	84
FIGURA 17 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO COM O FATOR DE VISCOSIDADE ARTIFICIAL PARA LS.	84
FIGURA 18 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO PARA DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM CDS-CN PELO MVF E MDF.	85
FIGURA 19 – ERRO EM DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM CDS-CN PELO MVF E MDF.	86
FIGURA 20 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO PARA DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM LS PELO MVF E MDF.	87

FIGURA 21 – ERRO EM DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM LS PELO MVF E MDF.	87
FIGURA 22 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO PARA DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM UDS-CN PELO MVF E MDF.	88
FIGURA 23 – ERRO EM DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM UDS-CN PELO MVF E MDF.	88
FIGURA 24 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO PARA DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM UDS-EXPLÍCITO PELO MVF E MDF.	89
FIGURA 25 – ERRO EM DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM UDS-EXPLÍCITO PELO MVF E MDF.	89
FIGURA 26 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO PARA DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM UDS-IMPLÍCITO PELO MVF E MDF.	90
FIGURA 27 – ERRO EM DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM UDS-IMPLÍCITO PELO MVF E MDF.	90
FIGURA 28 – DECAIMENTO DO ERRO ABSOLUTO <i>VERSUS</i> O REFINO DA MALHA NAS APROXIMAÇÕES ESTUDADAS DISCRETIZADAS PELO MDF COM $\tau = 2, t = 1800s$ E $y = 0,50m$	92
FIGURA 29 – DECAIMENTO DO ERRO ABSOLUTO <i>VERSUS</i> O REFINO DA MALHA NAS APROXIMAÇÕES ESTUDADAS DISCRETIZADAS PELO MVF COM $\tau = 2, t = 1800s$ E $y = 0,50m$	92
FIGURA 30 – DECAIMENTO DO ERRO ABSOLUTO <i>VERSUS</i> NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES ESTUDADOS DISCRETIZADAS PELOS MDF E MVF COM $\tau = 2, t = 1800s$ E $y = 0,50m$	93
FIGURA 31 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM $\tau = 2$	94
FIGURA 32 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM $\tau = 4$	95
FIGURA 33 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM $\tau = 8$	95
FIGURA 34 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM $\tau = 16$	96
FIGURA 35 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM $\tau = 32$	96
FIGURA 36 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM $\tau = 64$	97

FIGURA 37 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM $\tau = 2$ E VARIANDO O FATOR DE VISCO-SIDADE λ	98
FIGURA 38 – DECAIMENTO DO ERRO <i>VERSUS</i> NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES DISCRETIZADAS PELO MVF COM $\tau = 2$	99
FIGURA 39 – DECAIMENTO DO ERRO <i>VERSUS</i> NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES DISCRETIZADAS PELO MVF COM $\tau = 4$	100
FIGURA 40 – DECAIMENTO DO ERRO <i>VERSUS</i> NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES DISCRETIZADAS PELO MVF COM $\tau = 8$	101
FIGURA 41 – DECAIMENTO DO ERRO <i>VERSUS</i> NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES DISCRETIZADAS PELO MVF COM $\tau = 16$	101
FIGURA 42 – DECAIMENTO DO ERRO <i>VERSUS</i> NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES DISCRETIZADAS PELO MVF COM $\tau = 32$	102
FIGURA 43 – DECAIMENTO DO ERRO <i>VERSUS</i> NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES DISCRETIZADAS PELO MVF COM $\tau = 64$	103
FIGURA 44 – COMPARAÇÃO DO ERRO <i>VERSUS</i> O NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA O CDS-CN DISCRETIZADO PELO MVF PARA DIVERSOS VALORES DE τ	104
FIGURA 45 – COMPARAÇÃO DO ERRO <i>VERSUS</i> O NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA O LS DISCRETIZADO PELO MVF PARA DIVERSOS VALORES DE τ	104
FIGURA 46 – COMPARAÇÃO DO ERRO <i>VERSUS</i> O NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA O UDS-CN DISCRETIZADO PELO MVF PARA DIVERSOS VALORES DE τ	105
FIGURA 47 – COMPARAÇÃO DO ERRO <i>VERSUS</i> O NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA O UDS-EXPLÍCITO DISCRETIZADO PELO MVF PARA DIVERSOS VALORES DE τ	105
FIGURA 48 – COMPARAÇÃO DO ERRO <i>VERSUS</i> O NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA O UDS-IMPLÍCITO DISCRETIZADO PELO MVF PARA DIVERSOS VALORES DE τ	106
FIGURA 49 – EFEITO DO NÚMERO DE INCÓGNITAS SOBRE O TEMPO DE CPU PARA CADA APROXIMAÇÃO UTILIZADA COM $\tau = 2$	108

FIGURA 50 – EFEITO DO NÚMERO DE INCÓGNITAS SOBRE O TEMPO DE CPU PARA CADA APROXIMAÇÃO UTILIZADA COM $\tau = 4$	108
FIGURA 51 – EFEITO DO NÚMERO DE INCÓGNITAS SOBRE O TEMPO DE CPU PARA CADA APROXIMAÇÃO UTILIZADA COM $\tau = 8$	109
FIGURA 52 – EFEITO DO NÚMERO DE INCÓGNITAS SOBRE O TEMPO DE CPU PARA CADA APROXIMAÇÃO UTILIZADA COM $\tau = 16$	109
FIGURA 53 – EFEITO DO NÚMERO DE INCÓGNITAS SOBRE O TEMPO DE CPU PARA CADA APROXIMAÇÃO UTILIZADA COM $\tau = 32$	110
FIGURA 54 – EFEITO DO NÚMERO DE INCÓGNITAS SOBRE O TEMPO DE CPU PARA CADA APROXIMAÇÃO UTILIZADA COM $\tau = 64$	110
FIGURA 55 – ERRO NUMÉRICO COM E SEM MER PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES COM $\tau = 2$	112
FIGURA 56 – ERRO NUMÉRICO COM E SEM MER PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES COM $\tau = 4$	114
FIGURA 57 – ERRO NUMÉRICO COM E SEM MER PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES COM $\tau = 8$	115
FIGURA 58 – ERRO NUMÉRICO COM E SEM MER PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES COM $\tau = 16$	116
FIGURA 59 – ERRO NUMÉRICO COM E SEM MER PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES COM $\tau = 32$	116
FIGURA 60 – COMPARAÇÃO ENTRE O ERRO E_m E SUA ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 2$ COM O MÉTODO LS.	118
FIGURA 61 – COMPARAÇÃO ENTRE O ERRO (E_m) E SUA ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 2$ COM O MÉTODO UDS-CN.	119
FIGURA 62 – COMPARAÇÃO ENTRE O ERRO (E_m) E SUA ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 2$ COM O MÉTODO UDS-Explícito.	120
FIGURA 63 – COMPARAÇÃO ENTRE O ERRO (E_m) E SUA ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 2$ COM O MÉTODO UDS-IMPLÍCITO.	121
FIGURA 64 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 4$ COM LS.	143
FIGURA 65 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 4$ COM UDS-CN.	143
FIGURA 66 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 4$ COM UDS-EXPLÍCITO.	144
FIGURA 67 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 4$ COM UDS-IMPLÍCITO.	144
FIGURA 68 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 8$ COM LS.	145

FIGURA 69 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 8$ COM UDS-CN.	145
FIGURA 70 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 8$ COM UDS-EXPLÍCITO.	146
FIGURA 71 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 8$ COM UDS-IMPLÍCITO.	146
FIGURA 72 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 16$ COM LS.	147
FIGURA 73 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 16$ COM UDS-CN.	147
FIGURA 74 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 16$ COM UDS-EXPLÍCITO.	148
FIGURA 75 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 16$ COM UDS-IMPLÍCITO.	148
FIGURA 76 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 32$ COM LS.	149
FIGURA 77 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 32$ COM UDS-CN.	149
FIGURA 78 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 32$ COM UDS-EXPLÍCITO.	150
FIGURA 79 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 32$ COM UDS-IMPLÍCITO.	150

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DO EMPREGO DE MER.	60
TABELA 2 – REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DO EMPREGO DE $U_{\Delta}(\phi_{G,m})$	62
TABELA 3 – REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DO EMPREGO DE $U_{pm}(\phi_{g,m})$	62
TABELA 4 – REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DO EMPREGO DE U_{Ψ}	64
TABELA 5 – CONSTANTES DE ACORDO COM O TIPO DO GRÃO.	69
TABELA 6 – NÚMERO DE INCÓGNITAS E VALORES DE REFINO ESPACIAL PARA $\tau = 2$	91
TABELA 7 – NORMA 2 DO ERRO PARA MDF E MVF.	93
TABELA 8 – NÚMERO DE VARIÁVEIS NAS MALHAS EM RELAÇÃO A RAZÃO ESPAÇO-TEMPO (τ).	99
TABELA 9 – NORMA INFINITA DO ERRO E O MENOR ERRO PARA AS APRO- XIMAÇÕES COM $\tau = 2$ E $\tau = 4$	100
TABELA 10 – NORMA INFINITA DO ERRO E O MENOR ERRO PARA AS APRO- XIMAÇÕES COM $\tau = 8$ E $\tau = 16$	102
TABELA 11 – NORMA INFINITO DO ERRO E O MENOR ERRO PARA AS APRO- XIMAÇÕES COM $\tau = 32$ E $\tau = 64$	103
TABELA 12 – NORMA 2 DO ERRO PARA AS APROXIMAÇÃO PARA DIVERSOS VALORES DE τ	106
TABELA 13 – PARÂMETROS DO AJUSTE GEOMÉTRICO PARA OS MÉTODOS DE PRIMEIRA ORDEM.	111
TABELA 14 – PARÂMETROS DO AJUSTE GEOMÉTRICO PARA OS MÉTODOS DE SEGUNDA ORDEM.	111
TABELA 15 – E_h/E_m COM $\tau = 2$ PARA OS MÉTODOS ESTUDADOS.	113
TABELA 16 – E_h/E_m COM $\tau = 4$ PARA OS MÉTODOS ESTUDADOS.	113
TABELA 17 – E_h/E_m COM $\tau = 8$ PARA OS MÉTODOS ESTUDADOS.	114
TABELA 18 – E_h/E_m COM $\tau = 16$ PARA OS MÉTODOS ESTUDADOS.	115
TABELA 19 – E_h/E_m COM $\tau = 32$ PARA OS MÉTODOS ESTUDADOS.	117
TABELA 20 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 2$ COM O MÉ- TODO LS.	118
TABELA 21 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 2$ COM O MÉ- TODO UDS-CN.	119
TABELA 22 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 2$ COM O MÉ- TODO UDS-EXPLÍCITO.	120
TABELA 23 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 2$ COM O MÉ- TODO UDS-IMPLÍCITO.	121

TABELA 24 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 32$ COM O MÉTODO LS.	122
TABELA 25 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 32$ COM O MÉTODO UDS-CN.	122
TABELA 26 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 32$ COM O MÉTODO UDS-EXPLÍCITO.	122
TABELA 27 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 32$ COM O MÉTODO UDS-IMPLÍCITO.	123
TABELA 28 – TEMPO DE CPU EM RELAÇÃO À τ PARA O MÉTODO CDS-CN.	140
TABELA 29 – TEMPO DE CPU EM RELAÇÃO À τ PARA O MÉTODO LS. . . .	140
TABELA 30 – TEMPO DE CPU EM RELAÇÃO À τ PARA O MÉTODO UDS-CN.	141
TABELA 31 – TEMPO DE CPU EM RELAÇÃO À τ PARA O MÉTODO UDS-EXPLÍCITO.	141
TABELA 32 – TEMPO DE CPU EM RELAÇÃO À τ PARA O MÉTODO UDS-IMPLÍCITO.	142

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

<i>b.s.</i>	Base Seca
<i>b.u.</i>	Base Úmida
CDS	<i>Central Difference Scheme</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CN	Crank-Nicolson
CPU	<i>Central Processing Unit</i>
ER	Extrapolação de Richardson
IDE	<i>Integrated Development Environment</i>
LS	<i>Leith Scheme</i>
MDF	Métodos das Diferenças Finitas
MEF	Métodos dos Elementos Finitos
MER	Múltipla Extrapolação de Richardson
MVF	Métodos dos Volumes Finitos
NC	Volume no Contorno
RWS	<i>Roberts e Weiss Scheme</i>
TDMA	<i>TriDiagonal Matrix Algorithm</i>
UDS	<i>Upwind Difference Scheme</i>
VC	Volume de Controle

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Matriz banda tridiagonal
A	Constante que varia de acordo com o tipo de grão
\mathcal{A}	Parâmetro utilizado para simplificar a notação
a	Localização da coordenada
a_N	Coeficiente associado à variável do volume norte
a_P	Coeficiente associado à variável do volume central (VC)
a_S	Coeficiente associado à variável do volume sul
A_{xz}	Área (m^2)
B	Constante que varia de acordo com o tipo de grão
\mathcal{B}	Parâmetro utilizado para simplificar a notação
b	Termo independente do sistema
b_p	Termo fonte no ponto central
C	Constante que varia de acordo com o tipo de grão
\mathcal{C}	Parâmetro utilizado para simplificar a notação
c	Constante que depende do método
c_a	Calor específico do ar ($Jkg^{-1} \text{ } ^\circ C$)
C_i	Coeficientes que não dependem da malha
C_t	Diferença entre o tempo final e inicial do processo
c_W	Calor específico da água ($Jkg^{-1} \text{ } ^\circ C^{-1}$)
C_x	Diferença entre o ponto final e inicial na direção x
C_y	Diferença entre o ponto final e inicial na direção y
c_σ	Calor específico dos grãos ($Jkg^{-1} \text{ } ^\circ C^{-1}$)
\mathcal{D}	Parâmetro utilizado para simplificar a notação
$\frac{dm}{dt}$	Derivada da perda de matéria seca em relação ao tempo ($kg s^{-1}$)

E	Erro
\mathcal{E}	Parâmetro utilizado para simplificar a notação
E_h	Erro de discretização
E_m	Erro da MER
$erfc$	Função erro complementar
\mathcal{F}	Parâmetro utilizado para simplificar a notação
f	Variável arbitrária para a equação da viscosidade artificial
f_a	Parâmetro utilizado para simplificar a notação
G	Número inteiro positivo que corresponde ao número de malhas adotadas
H	Entalpia específica dos grãos úmidos (Jkg^{-1})
h	Tamanho representativo da malha
h_a	Entalpia específica do ar seco, (Jkg^{-1})
h_a^o	Entalpia específica do ar na temperatura de referência (Jkg^{-1})
h_s	Entalpia diferencial de sorção (Jkg^{-1})
H_W	Calor de umedecimento dos grãos (Jkg^{-1})
h_W	Entalpia específica do vapor de água ($Jkg^{-1}C$)
h_W^o	Entalpia específica da água na temperatura de referência T_W^o (Jkg^{-1})
h_θ	Entalpia específica da umidade (Jkg^{-1})
h_θ^o	Entalpia específica da umidade na temperatura de referência (Jkg^{-1})
h_σ^o	Entalpia específica dos grãos na temperatura de referência (Jkg^{-1})
h_φ	Entalpia específica de vaporização da água (Jkg^{-1})
h_1	Tamanho representativo da malha fina
h_2	Tamanho representativo da malha grossa
h_3	Tamanho representativo da malha super grossa
Int	Representa a parte inteira de um número real (σ)

L	Altura do local de armazenamento da massa de grãos (m)
k_{eff}	Condutividade térmica da massa de grãos ($Wm^{-1}s^{-1}$)
K_i	Representam equações auxiliares para calcular r_a
M	Número inteiro positivo que corresponde ao número máximo de aplicações da MER
\dot{m}_n	Fluxo de massa na face norte
m_p	Massa de volume de controle P
M_S	Parâmetro utilizado para simplificar a notação
\dot{m}_s	Fluxo de massa na face sul
M_T	Parâmetro utilizado para ajustar o tempo de aeração de acordo com a temperatura dos grãos
M_U	Parâmetro utilizado para ajustar o tempo de aeração de acordo com o teor de água dos grãos
N	Número total de volumes
N_f	Número total de volumes considerando os fictícios
N_t	Número de volumes na variável temporal t
N_x	Número de volumes na direção x
N_y	Número de volumes na direção y
p	Ordem do algoritmo
p_a	Ordem de acurácia
P_{atm}	Pressão atmosférica (kPa)
p_E	Ordem efetiva
p_L	Ordem assintótica
p_s	Pressão de vapor de saturação (kPa)
p_U	Ordem aparente
p_V, p_i	Ordens verdadeiras
Q_r	Calor de oxidação dos grãos ($J s^{-1} m^{-3}$)

R	Razão de mistura (g (vapor da água) g^{-1} (ar seco))
r	Razão de refinamento da malha
r_a	Umidade relativa do ar de aeração (%)
r^{pm}	Fator de correção
r_u	Teor de água de equilíbrio (%)
R_∞	Série geométrica
S	Termo fonte
S_P	Termo fonte no ponto P
$sign$	Função que retorna o sinal matemático da variável
T	Temperatura dos grãos ($^{\circ}C$)
t	Tempo (s)
T°	Temperatura de referência ($0^{\circ}C$)
T_{amb}	Temperatura ambiente ($^{\circ}C$)
T_B	Temperatura do ar de aeração ($^{\circ}C$)
t_{CPU}	Tempo de CPU (s)
t_f	Tempo final (s)
T_I	Temperatura inicial ($^{\circ}C$)
t_i	Tempo inicial (s)
T_W°	Temperatura de referência ($0^{\circ}C$) com relação ao vapor de água nos grãos ($^{\circ}C$)
\hat{T}	Solução fabricada ($^{\circ}C$)
U	Teor de água da massa de grãos (kg (água) kg^{-1} (grão seco))
u_a	Velocidade do ar de aeração (ms^{-1})
U_B	Teor de água em $y = 0$ (kg (água) kg^{-1} (grão seco))
U_E	Estimativa do erro de discretização que depende da escolha do estimador
U_h	Estimativa de E_h

U_I	Teor de água inicial (kg (água) kg^{-1} (grão seco))
U_P	Teor de água inicial dos grãos (% b.u.)
U_{pm}, U_{Ri}	Estimador de Richardson
U_{pmc}	Estimador de Richardson corrigido
u_r	Umidade relativa do ar ambiente (%)
u_v	Velocidade de Darcy do vapor da água (ms^{-1})
U_{Δ}	Estimador Δ
U_{Ψ}	Estimador Ψ
U_{Ψ^*}	Estimador Ψ^*
u_{φ}	Velocidade de Darcy do vapor da água (ms^{-1})
Y	Variável arbitrária para a equação da viscosidade artificial
v	Velocidade na direção y (ms^{-1})
V_A	Viscosidade artificial
v_n	Velocidade na face norte (ms^{-1})
v_s	Velocidade na face sul (ms^{-1})
x	Coordenada na direção horizontal (m)
x_0	Ponto inicial na direção x
x_f	Ponto final na direção x
y	Coordenada na direção vertical (m)
y_0	Ponto inicial na direção y
y_f	Ponto final na direção y

Letras Gregas

α_n	Sinal da velocidade na face norte (v_n)
α_s	Sinal da velocidade na face sul (v_s)
α, β, γ	Parâmetros utilizados para simplificar as notações
Γ	Efetividade de uma estimativa de erro

δ	Coeficiente usado na derivação de Y
Δt	Tamanho do passo de tempo
Δx	Espaçamento espacial na direção x (m)
Δy	Espaçamento espacial na direção y ou altura da camada (m)
Δz	Espaçamento espacial na direção z (m)
ε	Porosidade da massa de grãos (decimal)
η	Parâmetros utilizados para simplificar as notações
Λ	Variável arbitrária
λ	Constante adimensional ajustável
Λ_c	Condição de contorno
ρ	Massa específica do fluido (kgm^{-3})
ρ_a	Massa específica do ar intergranular (kgm^{-3})
ρ_φ	Densidade do vapor da umidade do ar intersticial (kgm^{-3})
ρ_σ	Densidade dos grãos (kgm^{-3})
σ	Número real
τ	Razão espaço-tempo
τ_{ty}	Fator de anisotropia temporal espacial
τ_{xy}	Fator de anisotropia geométrico
Φ	Solução analítica
ϕ_∞	Solução analítica estimada
ϕ	Solução numérica
ϕ_1	Solução numérica na malha fina
ϕ_2	Solução numérica na malha grossa
ϕ_3	Solução numérica na malha super grossa
Ψ	Razão de convergência da série
Ω	Domínio contínuo

Ω^h Domínio discreto, ou malha computacional, ou simplesmente malha

Outros

$\|\cdot\|_\infty$ Norma infinita

$\|\cdot\|_2$ Norma 2

↑ Representa o sentido do fluxo de ar de sul para norte

Subíndice

f Indica a face, norte (n) ou sul (s)

i Contador, $i = 1, 2, 3, \dots$

n Face norte do volume de controle P

s Face sul do volume de controle P

P Localização espacial do ponto ou nó central do VC

g Nível da malha

m Número de aplicações da ER

N Ponto ou nó cardinal norte do VC

S Ponto ou nó cardinal sul do VC

Superíndice

j Localizações temporais do volumes

θ Representação genérica das formulações CN, explícita e implícita

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	27
1.1	GENERALIDADES EM DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL	28
1.2	MOTIVAÇÃO	31
1.3	PROCESSO DE AERAÇÃO DA MASSA DE GRÃOS	32
1.4	OBJETIVOS	37
1.5	DELINEAMENTO DO TEXTO	38
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	39
2.1	AERAÇÃO E O MODELO PROPOSTO	39
2.2	ANISOTROPIA E MEIOS POROSOS	42
2.3	EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON	44
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	47
3.1	ERRO NUMÉRICO	47
3.2	MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS E CONDIÇÕES DE CONTORNO	49
3.2.1	Condições de contorno	52
3.3	VISCOSIDADE ARTIFICIAL	53
3.4	MÉTODO PARA SOLUÇÃO DOS SISTEMAS LINEARES	55
3.5	ANISOTROPIA E RAZÃO DE ASPECTO	56
4	MÚLTIPLA EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON E ESTIMADORES	58
4.1	MÚLTIPLA EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON	58
4.2	ESTIMADORES	61
4.2.1	Estimador Δ	61
4.2.2	Estimadores de Richardson e Richardson Corrigido	62
4.2.3	Estimadores Ψ e Ψ^*	63
4.2.4	Efetividade de uma estimativa de erro	64
5	MODELO MATEMÁTICO	66
5.1	MODELO DE THORPE	66
5.2	CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO	70
5.3	SOLUÇÃO FABRICADA	71
6	MODELO NUMÉRICO	74
6.1	ESQUEMA <i>UPWIND</i> (UDS)	75
6.1.1	Formulação Explícita	76
6.1.2	Formulação Implícita	77

6.1.3	Formulação Crack-Nicolson (CN)	77
6.2	ESQUEMA DE LEITH (LS)	78
6.3	ESQUEMA DE DIFERENÇA CENTRAL (CDS)	79
6.4	ALGORITMO DO PROCESSO DE AERAÇÃO	80
7	RESULTADOS	82
7.1	RESULTADOS NUMÉRICOS COM SOLUÇÃO ANALÍTICA FABRICADA	82
7.2	COMPARAÇÃO ENTRE MDF E MVF	85
7.3	VERIFICAÇÃO DAS ORDENS EFETIVAS	94
7.4	INFLUÊNCIA DA RAZÃO ESPAÇO-TEMPO	98
7.4.1	Comparação entre os métodos empregando a mesma razão espaço-tempo	99
7.4.2	Comparação entre os métodos para cada razão espaço-tempo	104
7.5	O ESFORÇO COMPUTACIONAL	107
7.6	MÚLTIPLA EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON (MER)	112
7.7	ANÁLISE DOS ESTIMADORES PARA A MER	117
8	CONCLUSÃO	125
8.1	OBSERVAÇÕES GERAIS	125
8.2	PRINCIPAIS CONTRIBUIÇÕES	126
8.3	PROPOSTAS DE TRABALHOS FUTUROS	127
	REFERÊNCIAS	128
	APÊNDICES	139
	APÊNDICE A	140
A.1	TEMPO DE CPU EM RELAÇÃO AS RAZÕES ESPAÇO-TEMPO $\tau = 2, 4,$ 8, 16, 32 E 64	140
	APÊNDICE B	143
B.1	COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA DE RICHARDSON U_{pm} PARA AS RAZÕES ESPAÇO-TEMPO $\tau = 4, 8, 16$ E 32 COM OS DIVER- SOS MÉTODOS	143
	ANEXOS	151
	ANEXO A	152
A.1	DETALHES DO MODELO MATEMÁTICO	152

1 INTRODUÇÃO

A agricultura é a principal atividade econômica para a maior parte da população dos países em desenvolvimento, respondendo por um quarto do produto interno bruto, constituindo a maior parte da produção de alimentos com grãos, dominada principalmente por pequenos agricultores (LOPES *et al.*, 2006).

Segundo Faoro (2018), o produtor rural dedica vários meses ao cultivo com o intuito de sempre melhorar a qualidade de seus produtos para garantir um melhor preço. Após, o produto é armazenado e comercializado. Se houver falhas em algumas dessas fases, o prejuízo poderá ser significativo.

O grão é uma cultura sazonal frequentemente cultivada uma vez por ano, enquanto a demanda é distribuída uniformemente ao longo do ano; assim, o grão é armazenado para garantir um abastecimento constante (LOPES *et al.*, 2006). Durante o armazenamento, os grãos são vulneráveis ao ataque de diversos insetos-praga, sendo estes a principal causa de perdas pós-colheita e insegurança alimentar. A magnitude das perdas varia significativamente de cultura para cultura e de região para região. As perdas anuais de grãos variam de 20% a 50% para os países em desenvolvimento (SULEIMAN; ROSENTRATER, 2022).

A perda pode resultar da deterioração do produto por causas como podridão, crescimento de fungos, danos causados por insetos, brotação, perda de germinação e perda de matéria seca pela respiração. Tal como acontece com outros produtos agrícolas, a qualidade do grão é mantida por mais tempo em temperaturas mais baixas (HELLEVANG; CASADA, 2022).

Portanto, a qualidade e a conservação dos grãos dependem diretamente do sistema de armazenamento. Problemas de armazenamento e ineficiência podem levar a perdas significativas do produto armazenado e alto gasto de energia e recursos. Para minimizar essas perdas, é importante um sistema adequado e eficiente, abrangendo um fluxo de ar uniforme em todo o domínio da massa de grãos (BINELO *et al.*, 2019). Portanto, o controle da temperatura e teor de água dos grãos é fundamental para preservar os aspectos econômicos e nutricionais da massa de grãos, desde a colheita até o consumo (PANIGRAHI *et al.*, 2020a).

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, sendo uma técnica preventiva (LOPES, 2006).

A aeração consiste na movimentação forçada de ar ambiente ou refrigerado

adequado através da massa de grãos, com o objetivo geral de diminuir e uniformizar a temperatura, propiciando a essa massa, condições favoráveis para conservação da qualidade durante um período de tempo prolongado (PEREIRA, 1995).

Entre os vários objetivos da utilização da aeração, os principais são: o resfriamento e a manutenção da massa de grãos a uma temperatura suficientemente baixa para assegurar uma boa conservação; e secundariamente, a secagem para prevenir o aquecimento e o umedecimento da massa de grãos, promover a remoção de odores na massa de grãos e inibir as atividades de insetos e o desenvolvimento da microflora, evitando o aparecimento de fungos que deterioram o produto (LOPES, 2006).

Os desenvolvimentos modernos em aeração começaram após a Segunda Guerra Mundial, em uma época de excedentes de cereais, que comumente resultou em tempos de armazenamento de mais de 1 ano. No mesmo período, silos maiores e armazéns planos começaram a ser usados para reduzir os custos de armazenagem, uma tendência que continua até os dias atuais em diferentes locais de estocagem do grão (HELLEVANG; CASADA, 2022).

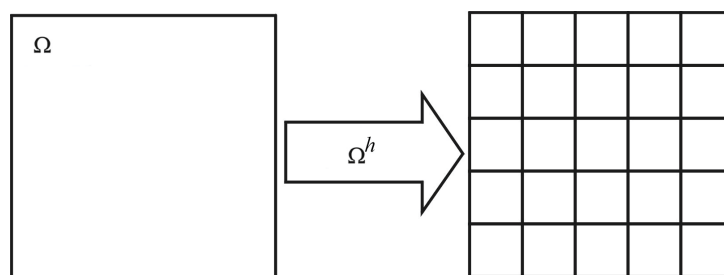
1.1 GENERALIDADES EM DINÂMICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL

No intuito reduzir os custos de armazenagem, têm sido desenvolvidos modelos matemáticos para descrever e melhorar o processo de aeração por meio de métodos numéricos, tais como: Thompson (1972), Muir *et al.* (1980), Alagusundaram *et al.* (1990), Chang *et al.* (1993, 1994), Jia *et al.* (2000), Thorpe (2001b), Khatchaturian e Savicki (2004), Liu *et al.* (2016) e Novoa–Muñoz (2019). Tais modelos ajudam na previsão do comportamento dos grãos e auxiliam na redução de perdas por parte de produtores.

Existem alguns métodos que podem ser usados na discretização de um modelo matemático contínuo. Os métodos mais utilizados são: Método das Diferenças Finitas (MDF) (TANNEHILL *et al.*, 1997; FORTUNA, 2000; BURDEN; FAIRES, 2016), Método dos Elementos Finitos (MEF) (HUGHES, 2000) e o Método dos Volumes Finitos (MVF) (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007; MALISKA, 2017).

Esses métodos numéricos consistem na substituição dos termos das derivadas parciais envolvidas na equação diferencial por aproximações numéricas. Com isso, o problema contínuo é transformado em um problema discreto, em que o domínio espacial é particionado em um número finito de subdomínios que recebe o nome de malha computacional, ou simplesmente malha (Ω^h), Fig. 1 (SANTIAGO, 2010). Essa transformação é conhecida como discretização do domínio.

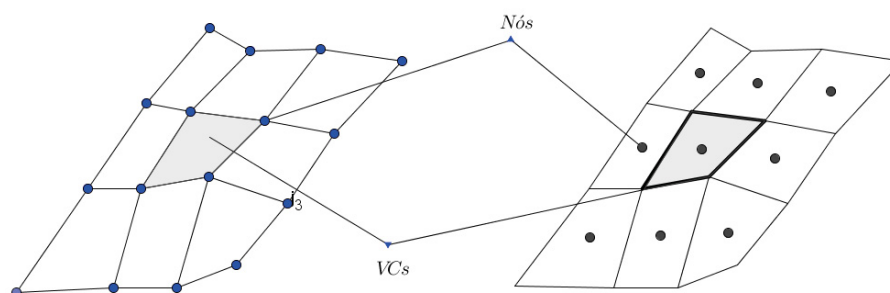
FIGURA 1 – EXEMPLO DE TRANSFORMAÇÃO DO DOMÍNIO CONTÍNUO EM DOMÍNIO DISCRETIZADO.



FONTE: Santiago (2010).

O MVF é um método de discretização de equações diferenciais que é baseado no balanço de certas quantidades físicas em um volume de controle (VC) pertencente ao domínio, representado pela Fig. 2.

FIGURA 2 – DISCRETIZAÇÃO EM VOLUMES FINITOS.



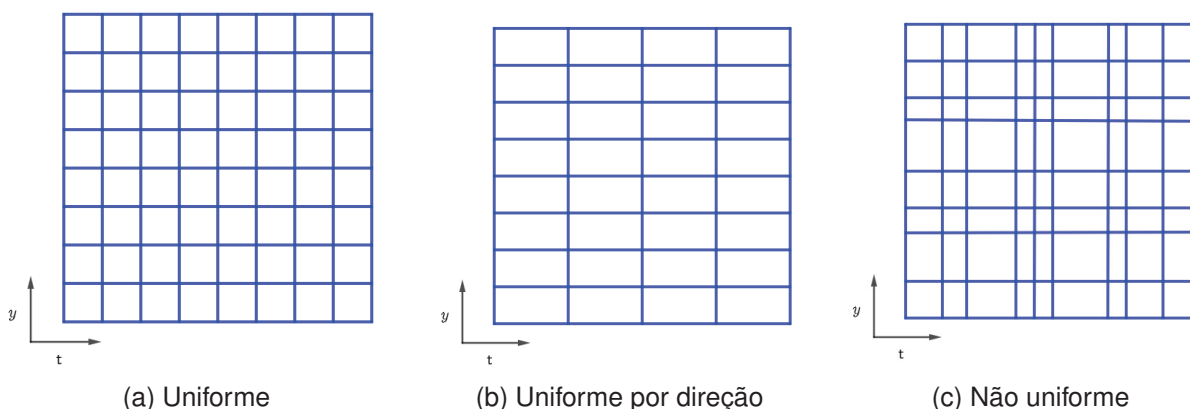
FONTE: O autor (2023).

No modelo que vamos tratar neste trabalho, teremos mais de uma quantidade para ser armazenada em um dado volume de controle da malha. Em particular, essas quantidades serão dadas pela temperatura (T) e pelo teor de água da massa de grãos (U).

De acordo com Maliska (2017), os arranjos colocalizados possuem maior facilidade de implementação, pois todas as variáveis são armazenadas no mesmo ponto e, portanto, apenas um tipo de VC pode ser utilizado para todas as integrações das equações do modelo matemático.

Ao discretizar uma equação diferencial transformamos um domínio contínuo (Ω) em domínio discreto (Ω^h), conforme a Fig. 1. E dependendo da distribuição dos volumes discretos no domínio, as malhas podem ser classificadas em ortogonais e não-ortogonais; estruturadas e não-estruturadas; uniformes ou não-uniformes (MALISKA, 2017). A Fig. 3 apresenta, os tipos de malhas ortogonais estruturadas uniforme e não uniforme.

FIGURA 3 – TIPOS DE MALHAS ESTRUTURADAS.



FONTE: O autor (2023).

Anisotropia é uma característica frequente nos fenômenos naturais e representa a não homogeneidade direcional de um determinado evento, ou seja, a variabilidade espacial dos elementos ocorre mais intensamente em uma direção preferencial (OLIVEIRA *et al.*, 2015). A anisotropia é classificada em dois tipos: física (também conhecida como anisotropia de coeficientes) e anisotropia geométrica (também conhecida como anisotropia de malha). Neste trabalho será abordada a anisotropia geométrica, considerando uma malha ortogonal estruturada uniforme por direção, veja a Fig. 3b. O parâmetro que mede tal quantidade é chamado de fator de anisotropia, que no caso da anisotropia geométrica, é conhecido como razão de aspecto.

A Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD-*Computational Fluid Dynamics*) pode ser considerada a área que estuda os fenômenos físicos ou físico-químicos em escoamentos de fluidos, transferência de calor e fenômenos relacionados por meio de simulações numéricas.

Em CFD, a anisotropia ocorre naturalmente, onde se tem a simulação de fenômenos físicos de pequena escala (MONTERO *et al.*, 2001).

De modo geral, as soluções numéricas podem ser afetadas por erros numéricos, cujas fontes são: erros de truncamento, erros de iteração e erros de arredondamento. Quando as demais fontes são minimizadas ou inexistentes, o erro de truncamento passa a ser denominado erro de discretização (MARCHI, 2001).

Segundo Roy e Oberkampf (2011), entre as fontes de erro numérico, o erro de discretização (E_h) é considerado o mais significativo. Tal erro pode ser definido como a diferença entre a solução analítica e a solução numérica obtida para as equações discretizadas (ROY; BLOTTNER, 2006).

Na área de CFD, um desafio é o nível de acurácia das soluções numéricas, causada pelos erros numéricos. Portanto, a utilização de métodos que minimizem tais erros é de extrema importância.

Na literatura, a extrapolação de Richardson (ER) é utilizada com o objetivo de se minimizar o erro de discretização E_h e aumentar a sua ordem de acurácia (p_a). Considerando a aplicação de ER de forma recursiva é possível potencializar a sua eficácia. Tal procedimento é conhecido por Múltipla Extrapolação de Richardson (MER) (MARCHI *et al.*, 2013b).

A primeira aplicação de MER foi apresentada no trabalho de Richardson e Gaunt (1927), os quais consideraram dois níveis de extrapolação e aplicaram essa técnica a equações na forma integral, como a equação de Volterra; e diferencial, como as derivadas no Teorema de Leibnitz. Aplicações com apenas dois níveis de ER resultam em um aumento significativo na ordem de acurácia das soluções numéricas (RICHARDSON; GAUNT, 1927; ERTUK *et al.*, 2005). O emprego de ER com mais de dois níveis de extrapolação, são observados em Roy (2005), Martins (2013) e Rodrigues *et al.* (2022), os quais tem como objetivo a redução do erro de discretização.

Dessa forma, este trabalho propõe aprofundar o estudo sobre processo de aeração de massa de grãos, dado pelo modelo de Thorpe (2001b), a fim de aplicar a MER para estimar e reduzir o erro de discretização com diferentes razões espaço-tempo. Para isto, discretizaram-se as equações pelo MVF, empregando as aproximações espaço-tempo LS (*Leith scheme*), CDS-CN (*Central difference scheme-Crank-Nicolson*), UDS-CN (*Upwind Difference Scheme-Crank-Nicolson*), UDS-Explícito e UDS-Implícito, utilizou-se viscosidade artificial (VON NEUMANN; RICHTMYER, 1950) para evitar as oscilações não físicas e uma solução fabricada por Rigoni *et al.* (2022).

1.2 MOTIVAÇÃO

De acordo com Lopes (2006), nas últimas décadas, tem-se discutido a utilização de processos e métodos que garantam a qualidade dos produtos armazenados e não prejudiquem a saúde dos consumidores. Além da preocupação com os danos visíveis aos grãos, a autora relata que se tem trabalhado no sentido de implementar medidas que garantam a sua qualidade, evitando-se a degradação nutricional e a contaminação do produto armazenado.

Assim, a eficiência dos métodos utilizados para descrever os comportamentos dos fenômenos físicos estão sendo verificados para descrever melhor tais comportamentos e em muitos casos, estes resultados ainda não são satisfatórios comparados com os elementos naturais ou processos de Engenharia. Dessa forma, é de suma importância pesquisar novas técnicas para descrever estes fenômenos físicos e mesclar técnicas existentes para melhorar o desempenho tanto computacional quanto ao erro gerado.

As técnicas mais frequentemente utilizadas na resolução destes modelos são

os MDF e o MEF (NAVARRO; NOYES, 2001). No modelo matemático estudado, o principal método de discretização descrito na literatura é o MDF com aproximação espacial do tipo UDS (THORPE, 2001a; LOPES *et al.*, 2006; KWIATKOWSKI JR., 2011; LOPES *et al.*, 2015; RIGONI *et al.*, 2022). Ainda não consta na literatura um estudo detalhado com outro método numérico para discretizar as equações diferenciais para o modelo de Thorpe (2001b).

Por outro lado, as soluções numéricas são afetadas por erros numéricos, em particular, o erro de discretização (E_h), considerado o mais significativo (ROY; OBERKAMPF, 2011).

As alternativas disponíveis para se reduzir tal erro são: refinamento de malha, cuja desvantagem é o aumento de memória e tempo computacionais; emprego de métodos de alta ordem, cuja desvantagem é o aumento da complexidade do modelo numérico; e por último, mas não menos importante, a utilização de técnicas de extrapolação (MARTINS, 2013).

Neste contexto, a principal motivação deste trabalho consiste no aperfeiçoamento de métodos adotados para reduzir e estimar erros de discretização aplicado ao modelo proposto. Com esse propósito, faz-se necessária a aplicação de uma técnica de extrapolação. Neste trabalho adotaremos a MER, analisando seu desempenho para diferentes razões espaço-tempo a fim de se obter soluções numéricas de alta ordem.

1.3 PROCESSO DE AERAÇÃO DA MASSA DE GRÃOS

O sistema de aeração é composto por elementos que visam a distribuição uniforme de ar através da massa de grãos (BILOBROVEC, 2005). Os principais componentes são: i) um ventilador para movimentar o ar através da massa de grãos; ii) condutos perfurados para conduzir e distribuir o ar através da massa de grãos; iii) tubos de conexão que ligam o ventilador com os condutos. A Fig. 4 representa a estrutura e os componentes de um sistema de aeração.

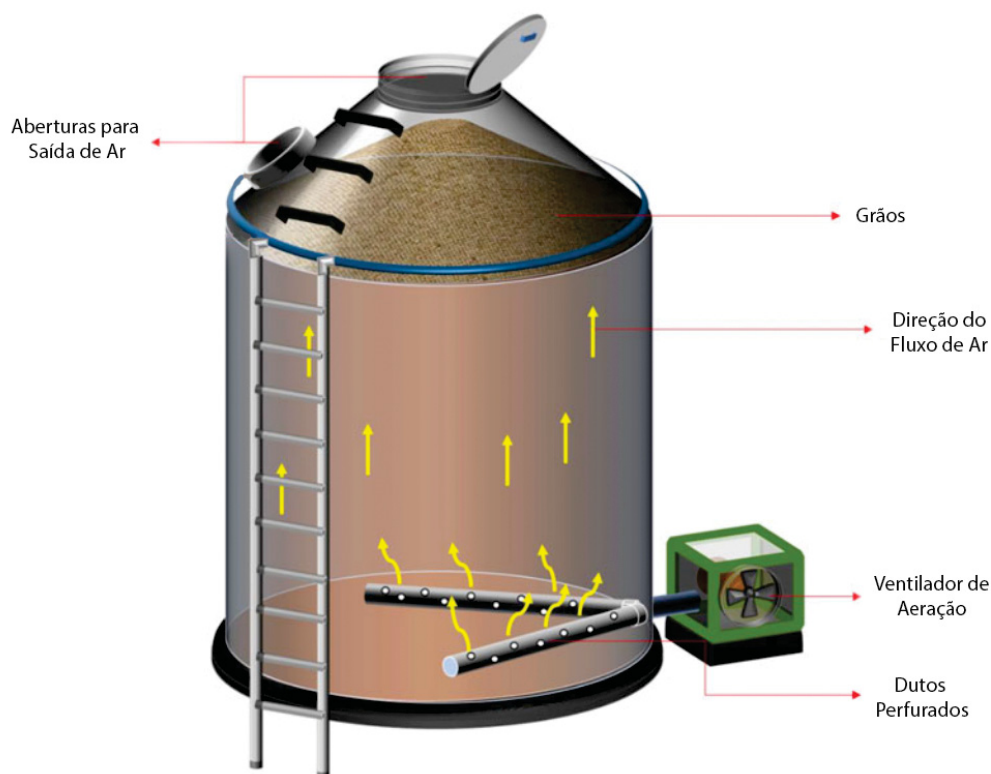
O sistema de aeração deve operar até que a frente de temperatura tenha se movido completamente através da massa de grãos, garantindo que a camada superior do produto tenha sido resfriada ou homogeneizada (SILVA *et al.*, 2000).

A aeração é uma das principais técnicas de prevenção usada no gerenciamento de armazenamento seguro e econômico de grãos armazenados, que pode controlar o ambiente ecológico dos grãos armazenados para garantir o seu estado (ZESHENG; LING, 1997).

A aeração é utilizada para resfriar a massa de grãos, homogeneizar a temperatura, promover a secagem dentro de certos limites, distribuir fumigantes gasosos (controle de pragas realizado com compostos químicos) através do ar da aeração,

controlar pragas como insetos e fungos e remover maus odores.

FIGURA 4 – COMPONENTES DE UM SISTEMA DE AERAÇÃO.



FONTE: Adaptado de Panigrahi *et al.* (2020a).

Para que isto ocorra, emprega-se uma vazão mínima de ar, assim a massa de grãos alcançará a temperatura desejada dentro de um intervalo de tempo desejado e conveniente. De acordo com Navarro e Noyes (2001), a vazão específica mínima de ar requerida depende da espécie de grão armazenado, da espessura da massa de grãos, do tipo de instalação e do número de estruturas de armazenagem existentes no sistema.

Segundo Lopes (2006), se este processo demorar muito, os seus objetivos podem não ser alcançados, e se for muito rápido, será requerida uma vazão muito alta de ar, que poderá secar ou umedecer os grãos, sendo também economicamente inviável.

O resfriamento da massa de grãos é utilizado em grãos armazenados secos, porém com temperaturas elevadas, para serem resfriados no silo através da aeração após saírem dos secadores de grãos (WEBER, 2005).

A aeração com o objetivo de homogenizar a massa de grãos ocorre em regiões ou épocas quentes, quando o resfriamento até os níveis indicados como seguro não é

possível. Assim, buscando manter a massa de grãos com diferença máxima de temperatura de 3°C para evitar processos danosos aos grãos (LOPES *et al.*, 2006). Assim, o ar frio da aeração torna fria e homogênea a temperatura dos grãos armazenados utilizada para neutralizar o aquecimento espontâneo dos produtos e as correntes de convecção que se formam devido às diferenças de temperatura na massa de grãos. Este tipo de aeração é utilizada para armazenagem de grãos secos (KWIATKOWSKI JR., 2011).

Segundo Navarro e Noyes (2001), manter um baixo gradiente de temperatura no ambiente de armazenamento possibilita a prevenção da migração do teor de água, os focos de aquecimento e a condensação de água nos grãos armazenados.

A utilização da aeração pode ser realizada para manter a secagem dentro de certos limites. Vale ressaltar que a aeração não foi projetada para tal objetivo. As vazões empregadas na aeração são 15 a 25 vezes maiores que as aplicadas para o resfriamento, sendo economicamente inviável por atingir uma vazão de ar muito elevada (SILVA *et al.*, 2000). Assim, quando for aplicada com este objetivo, deve-se ter cuidado e observar todos os fatores envolvidos neste processo (KWIATKOWSKI JR., 2011).

No caso da distribuição de fumigantes gasosos, estes devem ser distribuídos, gerando concentração uniforme e resíduos dentro dos limites aceitáveis no ambiente de armazenamento (BOND, 1984). De acordo com Navarro e Noyes (2001), a circulação dos fumigantes, utilizando sistemas de aeração, requer conhecimentos avançados sobre efeitos e tempos de contato do fumigante com a massa de grãos. O mais comum é usar a aeração para circular o ar após o processo de fumigação.

O processo de aeração pode inibir a proliferação de insetos e fungos através do controle de temperatura e o teor de água da massa de grãos. Atualmente, os fungos são a maior causa de deterioração na armazenagem de sementes e grãos. Depois dos insetos, são a maior causa que leva à perda total.

A aeração possibilita a retirada de maus odores da massa de grãos, provenientes do crescimento de fungos e fermentação. A remoção desses odores são facilmente e totalmente removidos em caso de fermentação, porém, quando o produto está rançoso, os maus odores são dificilmente totalmente eliminados (KWIATKOWSKI JR., 2011).

A massa de grãos pode ser considerada um sistema ecológico composta por organismos vivos (componentes biológicos) e o meio ambiente do interior da massa, onde há componentes que não são organismos vivos (meio abiótico), integrando-se entre si (PEREIRA, 1995).

Segundo Lopes *et al.* (2006), a modificação das condições do ambiente de

armazenamento pode produzir diferentes efeitos, dependendo das características do ar de aeração e 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.

São fatores abióticos do ecossistema de armazenamento da massa de grãos: a temperatura e a umidade relativa do ar ambiente, a temperatura dos grãos, o teor de água dos grãos, a atmosfera do ambiente de armazenamento e os materiais estranhos existentes na massa de grãos (ANDRADE, 2001).

O principal fator biótico deste ecossistema é o grão, tendo como principais características a hidroscoopia dos grãos, porosidade, condutividade térmica, difusividade térmica, ângulo de repouso, massa específica, calor específico e latente, entalpia, teor de água dos grãos, temperatura, danos mecânicos, danos produzidos pelas impurezas, teor de água de equilíbrio e deterioração dos grãos. De acordo com Fleurat-Lessard (2002), todas as ações deste ecossistema envolvidas no sistema de armazenamento são executadas visando a preservação do grão.

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 teor de água 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). De acordo com Pereira (1995), a deterioração dos mesmos resulta da interação entre variáveis físicas, químicas e biológicas.

Segundo Puzzi (1977), dentre as mais importantes alterações químicas que se apresentam nos grãos armazenados, são aquelas que envolvem a respiração dos grãos úmidos. Pois, mesmo depois que os grãos são desligados biologicamente da planta, eles respiram, ficando sujeitos a pequenas, mas contínuas transformações. Os principais fatores que afetam o processo respiratório são: a temperatura, o teor de água dos grãos e os fungos associados à massa.

Quando se observam grãos úmidos associados aos fungos, temos o aquecimento destes grãos ocorrendo quando o teor de água dos grãos está acima do nível considerado satisfatório para o armazenamento. De acordo com Puzzi (1977), todos os fatores que envolvem a perda da qualidade dos grãos, causam um aumento de temperatura.

De acordo com Navarro e Noyes (2001), a aeração tem limitações, sendo a principal, a não eliminação imediata dos insetos e fungos, mas somente o impedimento de sua proliferação. Entretanto, suas vantagens são: a não utilização de produtos

químicos e sua segurança e econômica no controle do ambiente de armazenamento comparada a outras técnicas. De acordo com Sinicio e Muir (1995), o processo de aeração é inicializado ou finalizado com condições pré-estabelecidas e bem definidas para cumprir com seu objetivo.

A planta não é oleaginosa, mas o grão. Na verdade a soja é proteica, pois possui mais proteína em sua composição. O termo oleaginosa aparece com frequência por serem os lipídeos o segundo componente mais encontrado no grão.

Em nosso caso estudaremos a massa de grãos de soja (*Glycine max*), que é uma planta originária da China, com o grão da soja sendo considerado proteico, pois possui mais proteína em sua composição. O segundo componente mais encontrado no grão é o termo oleaginosa que são alimentos de origem vegetal que se caracterizam por serem ricos em gorduras monoinsaturadas. O grão também é rico em vitaminas A e C, e minerais, como cálcio e fósforo.

Os dois maiores produtores de soja do mundo são o Brasil (com 125,8 milhões de toneladas métricas) e os Estados Unidos (com 123,6 milhões de toneladas métricas). Entre os estados brasileiros, a concentração da produção agrícola ocorre no Mato Grosso, Paraná, Rio Grande do Sul e Goiás, que representam 67% da safra nacional de grãos (EMBRAPA, 2022; CONAB, 2023).

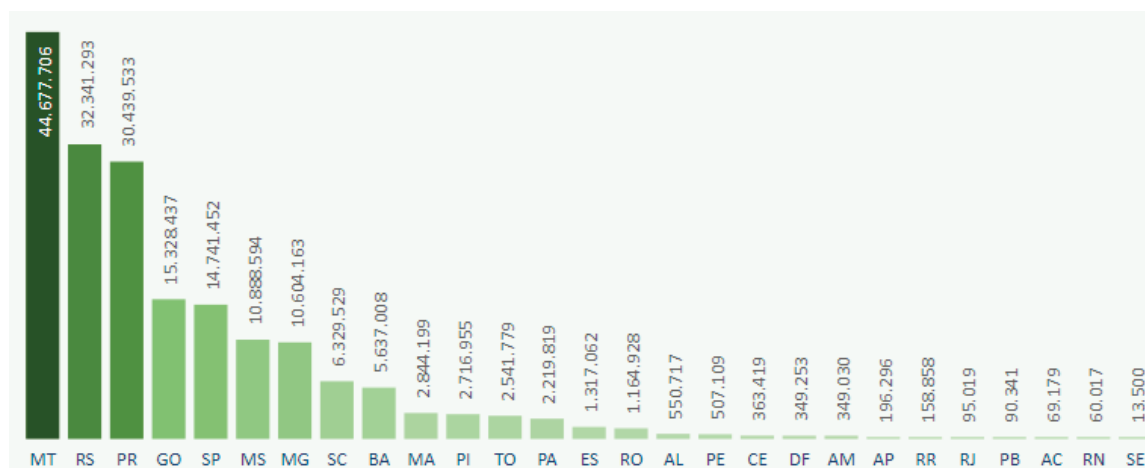
Na Fig. 5 temos a distribuição da capacidade de armazenagem pelos estados brasileiros e Distrito Federal. Já a Fig. 6 representa a quantidade da capacidade por estado.

FIGURA 5 – DISTRIBUIÇÃO DA CAPACIDADE ESTÁTICA DA PRODUÇÃO POR ESTADO.



FONTE: Conab (2023).

FIGURA 6 – QUANTIDADE DA CAPACIDADE ESTÁTICA DA PRODUÇÃO POR ESTADO.



FONTE: Conab (2023).

1.4 OBJETIVOS

O objetivo geral deste trabalho é efetuar uma análise de erros de discretização do modelo matemático proposto por Thorpe (2001b) discretizando as equações diferenciais com o MVF e aplicar a MER para reduzir e estimar tais erros sob a influência da razão espaço-tempo.

Dessa forma, são definidos também os seguintes objetivos específicos:

- Utilizar o MVF para resolver numericamente o modelo proposto por Thorpe (2001b), empregando diferentes formulações espaciais e temporais;
- Efetuar uma análise das ordens efetiva (p_E) com cada formulação empregada;
- Aplicar a MER para reduzir e estimar o erro de discretização e posteriormente analisando sua ordem de acurácia;
- Analisar a influência da razão espaço-tempo na resolução numérica do processo de aeração;
- Comparar o tempo de CPU de cada aproximação utilizada.

1.5 DELINEAMENTO DO TEXTO

Desse modo, o trabalho se divide primeiramente na revisão da literatura com trabalhos utilizando o modelo proposto por Thorpe e outros modelos para descrever o comportamento da aeração, além de vários trabalhos aplicando a ER e a MER com diferentes técnicas e modelos. No Capítulo 3, abordaremos a fundamentação teórica na seguinte ordem, erro numérico, MVF e o tratamento das condições de contorno, juntamente com o *solver* a ser utilizado na resolução. Posteriormente, no capítulo 4 apresentaremos a MER e os principais estimadores. Seguindo no Capítulo 5, mostraremos o modelo matemático proposto por Thorpe (2001b), condições iniciais e de contorno. No Capítulo 6, são dadas as discretizações do modelo matemático com o MVF e suas aproximações espaciais e temporais. Na sequência apresentaremos os resultados e discussões, por meio de gráficos e análises da ordem efetiva (p_E), erro de discretização e tempo computacional no Capítulo 7. Finalmente, no Capítulo 8, descreveremos as conclusões.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nesta seção, é apresentada uma revisão bibliográfica sobre os trabalhos relacionados a aeração com e sem o modelo de Thorpe e posteriormente uma revisão com trabalhos relacionados a Extrapolação de Richardson e a Múltipla Extrapolação de Richardson (MER), tendo como principal objetivo mostrar a importância tanto do modelo estudado quanto da aplicação da MER.

2.1 AERAÇÃO E O MODELO PROPOSTO

A aeração é uma das ferramentas mais poderosas disponíveis para o setor de armazenamento de grãos. Independentemente da temperatura inicial e do teor de água dos grãos, há fenômenos biológicos e químicos que ocorrem nos grãos armazenados que são significativamente influenciados pela temperatura de bulbo úmido do ar que entra no grão (THORPE, 2022).

Segundo Zesheng e Ling (1997), projetar e implementar um modelo matemático de eficiência para simular o processo de aeração tem sido um problema bastante complexo principalmente no manejo econômico e seguro dos grãos armazenados. 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.*, 2020a).

Thompson (1972) desenvolveu um modelo para prever as mudanças na temperatura e teor de água do grão durante o processo de aeração em grãos de milho, sendo a simulação realizada assumindo uma série de finas camadas de grãos posicionadas perpendicularmente ao fluxo de ar dentro do silo de armazenamento. Tal modelo foi construído a partir de modificações do modelo de Thompson *et al.* (1968), desenvolvido para simular o processo de secagem.

Em Thorpe e Hunter (1977) foram apresentadas expressões analíticas explícitas para distribuições de pressão e vazão em silos e galpões aerados equipados com dutos de aeração circulares e lineares, colocados simetricamente em relação ao centro. Uma solução da equação de Laplace por diferenças finitas e que explora a forma de banda da matriz dos coeficientes também é apresentada. Neste caso, resolve-se o sistema gerado nesta discretização com um método direto, em vez de iterativo.

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.

Thorpe e Elder (1982) apresentaram um modelo matemático dos processos de transferência de calor, teor de água do grão e decomposição de pesticidas em grãos aerados. Tal modelo foi discretizado usando o Método das Diferenças Finitas e validado por evidências experimentais. A aeração reduz a taxa de degradação dos pesticidas aplicados aos grãos armazenados e torna a taxa de decomposição relativamente insensível às condições iniciais dos grãos.

Thorpe *et al.* (1982) propuseram um modelo matemático de fenômenos de transferência de calor e teor de água do grão que ocorrem em granéis de grãos aerados, e é combinado com um modelo populacional de *Sitophilus oryzae*. O modelo prevê que insuflar o ar frio da noite através de granéis de grãos reduz severamente o crescimento populacional de gorgulhos (pequenos besouros, carunchos).

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.

Thorpe *et al.* (1990) apresentaram expressões analíticas para os calores integrais de molhamento que são derivadas da equação isóstera de Hunter. Um algoritmo numérico para avaliar a integral também foi apresentado. Quando a velocidade computacional é essencial, os calores integrais de umedecimento de nove tipos de sementes e grãos são expressos como polinômios de quarta ordem.

Thorpe *et al.* (1991a) desenvolveram uma equação que descreve a transferência de massa por difusão em grãos armazenados a granel. A equação é expressa em termos de uma concentração média espacial ponderada de equilíbrio e uma temperatura média de volume, juntamente com desvios espaciais locais da concentração média. Thorpe *et al.* (1991b) montaram e resolveram o problema de valor de contorno para esses desvios locais e isso levou a expressões para a difusividade efetiva do teor de água em grãos armazenados.

Thorpe (1997) desenvolveu um modelo de equilíbrio, pelas equações diferenciais que governam as distribuições de velocidade, teor de água e temperatura em silos de fundo cônico para armazenamento de grãos. As equações são resolvidas transformando a forma do silo em um cilindro reto. Utilizando uma malha ortogonal e discretizando as equações pelo Método das Diferenças Finitas. As temperaturas na superfície externa do silo são calculadas usando a radiação solar e outros dados climáticos. O modelo matemático incorpora fenômenos biológicos como a respiração

do grão, a dinâmica populacional de três espécies de insetos e um total de quatro linhagens de coleópteros de produtos armazenados e a perda da viabilidade dos grãos são considerados. Expressões que se relacionam com a taxa de decomposição de pesticidas químicos também são incorporadas ao modelo de ecossistema. Os resultados da pesquisa mostram que a aeração com ar ambiente em silos pequenos para armazenamento na fazenda resulta em melhores condições de armazenamento em comparação com as obtidas em silos não aerados.

Como podemos observar, vários modelos foram sendo desenvolvidos para avaliar o processo de aeração, até que em 2001, Thorpe (2001b) apresentou detalhadamente o modelo que é baseado nas equações de balanço de massa e energia formulado por Thorpe (1997). Este será o modelo adotado nesta tese.

Vários trabalhos foram baseados na simulação numérica do processo de aeração utilizando o modelo matemático proposto por Thorpe (2001b), modelo abordado nesse estudo: Lopes (2006), Radtke (2009), Kwiatkowski Jr. (2011), Lopes *et al.* (2014, 2015), Rigoni e Kwiatkowski Jr. (2020) e Rigoni *et al.* (2022).

Lopes *et al.* (2006) validaram o modelo proposto por Thorpe (2001b), efetuando algumas simplificações nas equações originais do modelo matemático com a finalidade de reduzir o tempo computacional, sem diminuir a acurácia. Para resolver numericamente tal modelo, as equações foram discretizadas pelo MDF, utilizando aproximação espacial *Upwind Difference Scheme* (UDS) e formulação temporal explícita. A máxima diferença observada entre as temperaturas experimentais e numéricas foi de $3,2^{\circ}C$. Para os testes, o grão utilizado foi o milho.

Radtke (2009) utilizou o modelo proposto por Thorpe (2001b) com as simplificações e metodologia numérica sugeridas por Lopes *et al.* (2006). O autor relatou que o modelo apresentou resultados satisfatórios quando comparado a dados experimentais, para o grão de soja.

Kwiatkowski Jr. (2011) comparou os dados experimentais fornecidos por Oliveira *et al.* (2007) com a simulação numérica do modelo proposto por Thorpe (2001b) e simplificações sugeridas por Lopes *et al.* (2006), discretizando pelo MDF, com aproximação espacial UDS e com a formulação temporal explícita e implícita, para um sistema com e sem controlador ON/OFF. Os resultados se mostraram eficazes tendo uma pequena vantagem para a aproximação temporal implícita, dado que a solução numérica foi sempre convergente.

Lopes *et al.* (2014) compararam o modelo logarítmico (ou Hukill) e o modelo de equilíbrio (ou Thorpe) com dados experimentais encontrados na literatura. Os dois modelos também foram analisados em relação às temperaturas previstas e teor de água dos grãos e tempos de secagem. Os resultados mostraram que ambos os modelos

apresentaram bom desempenho de previsão, com leve preferência para o modelo Thorpe.

Lopes *et al.* (2015) compararam os modelos propostos por Thorpe (2001b) e Thompson (1972) com dados experimentais. Os resultados mostraram que ambos os modelos tiveram boa concordância com os dados experimentais e os modelos apresentaram um desempenho muito semelhante. Os autores comentam que os dois modelos avaliados podem ser facilmente implementados, contribuindo para melhorias no controle desse processo e garantindo o gerenciamento da qualidade dos grãos durante o período de armazenamento.

No trabalho de Rigoni *et al.* (2022) foram apresentadas várias outras técnicas de discretização, tanto temporal quanto espacial, todas utilizando MDF para o modelo matemático proposto por Thorpe (2001b) e suas simplificações (LOPES *et al.*, 2006), além de apresentarem uma solução fabricada (solução analítica). Foi realizada uma análise do erro de discretização por meio da ordem efetiva de tal erro. Os resultados obtidos numericamente foram comparados com a solução analítica e os tempos de CPU em diferentes níveis de refinamento.

De acordo com Rigoni *et al.* (2022), LS e CDS-CN são as melhores aproximações de segunda ordem para o modelo estudado. Para evitar as oscilações não físicas nos métodos de segunda ordem, os autores aplicaram a viscosidade artificial (VON NEUMANN; RICHTMYER, 1950) no modelo proposto. Já os métodos de primeira ordem UDS-Explícito, UDS-Implícito e UDS-CN também foram utilizados para comparação pelo fato do UDS-Explícito ser a aproximação numérica mais utilizada na literatura.

Dessa forma, podemos notar que o modelo proposto por Thorpe (2001b), e sua simplificação feita por Lopes *et al.* (2006), tem sido amplamente discutido na literatura e comparado com dados experimentais. Outro fato comum encontrado na literatura é que todos os autores aplicaram MDF. Dessa forma, torna-se interessante estudar o desempenho de outros métodos numéricos para a discretização do modelo; neste trabalho optamos por utilizar o MVF. Ainda, os autores que estudaram o modelo de Thorpe (2001b) optaram pela formulação UDS-Explícita, com exceção de Kwiatkowski Jr. (2011), que aplicou a formulação UDS-Explícita e UDS-Implícita e Rigoni *et al.* (2021, 2022), que aplicaram outras técnicas de aproximação numérica.

2.2 ANISOTROPIA E MEIOS POROSOS

O trabalho de Rice *et al.* (1970) é um dos mais citados em relação à anisotropia física (anisotropia relacionada aos coeficientes da equação) nesta área de estudo. Os autores abordaram métodos de medição de permeabilidade anisotrópica em meios

porosos consolidados e não consolidados. A anisotropia é geralmente o resultado da orientação e forma dos grãos assimétricos que compõem a camada porosa. A extensão da anisotropia pode ser aproximadamente prevista por medições de resistividade em diferentes direções. Também são catalogados diversos métodos para prever as funções de fluxo e potencial em meios porosos anisotrópicos.

Hood e Thorpe (1992) estudaram os efeitos da resistência anisotrópica ao fluxo de ar no projeto de sistemas de aeração para grãos de linhaça e arroz com casca armazenados a granel. Relataram que a linhaça exibe o maior grau de anisotropia, com a resistência vertical ao fluxo de ar sendo cerca do dobro da resistência ao fluxo de ar na direção horizontal. As quatro variedades de arroz com casca estudadas tiveram resistência ao fluxo de ar na direção vertical entre 30 a 50 % maiores do que na direção horizontal.

Khatchaturian *et al.* (2009) mostraram que o fator de anisotropia física depende da forma do grão, apresentando maiores desvios à medida que o grão difere do formato esférico. O fator de anisotropia aumenta com a velocidade do ar, e essa influência da velocidade varia de muito fraca para sementes com forma próxima a esférica (ervilha, soja) até significativa para grãos bem menos esféricos (lentilha, arroz). Simulações numéricas de armazéns de grãos aerados reais e hipotéticos foram utilizadas para detectar a influência da anisotropia nas áreas de risco operacional. Essa diferença depende do tipo de grão (valor do fator de anisotropia), variação da área da seção transversal do silo de armazenamento (taxa de expansão) e localização da entrada de ar.

Knob (2010) relacionou a anisotropia com posições mais prováveis dos grãos na massa de grãos ocupadas no armazém. Durante o enchimento do armazém, os grãos ocupam uma posição para qual a energia potencial do sistema seja mínima, isto é, o centro de gravidade do grão fique o mais baixo possível. Aplicando o processamento de imagens digitais foram obtidas as características geométricas dos vários tipos de grãos (soja, trigo, aveia, milho, arroz, lentilha, linhaça e ervilha). Utilizando a relação entre a área de projeção horizontal e a área mais provável de projeção vertical, foram generalizados os dados experimentais sobre o escoamento do ar nas direções horizontal e vertical, com variação de velocidade. Constatou-se que, com o aumento da excentricidade dos grãos, a razão entre as permeabilidades na direção horizontal e vertical (fator de anisotropia) aumenta.

Tozinni (2010) desenvolveu um modelo matemático para calcular a pressão estática, aerodinâmica e a distribuição de velocidade do fluxo do ar na massa de grãos, considerando os casos bi e tridimensionais sob condições não homogêneas e anisotrópicas. Com os experimentos foram obtidos os fatores de anisotropia para vários tipos de grãos (soja, milho, trigo, aveia e arroz). Tozinni (2010) constatou também,

assim como em Khatchatourian *et al.* (2009) que o fator de anisotropia cresce com o aumento da velocidade do ar. Essa influência é muito pequena para grãos com a forma próxima do esférico (ervilhas e soja) e muito maior para grãos da forma não esférico (lentilhas e arroz).

Vasconcellos (2012) propôs um estudo aprofundado sobre a distribuição do fluxo do ar em armazéns sob o efeito da não homogeneidade e da anisotropia em grãos de arroz, aveia, soja, milho e trigo. A anisotropia foi relacionada ao ângulo mais provável que os grãos podem ocupar no silo, bem como a relação com o grau de esfericidade das sementes. As simulações mostraram que há uma diferença entre o fluxo de ar dentro do armazém para o meio isotrópico e para o meio anisotrópico. Esta diferença depende do tipo de grão (fator anisotrópico) e do local de entrada do ar.

Como podemos observar, existem diversos estudos sobre a anisotropia física e geométrica. Entretanto, em relação a conservação do grão, até o presente momento encontramos somente estudos voltados à anisotropia física. Assim se faz necessário um aprofundamento na anisotropia geométrica e quais suas consequências na simulação do processo de aeração.

2.3 EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON

A técnica denominada extrapolação de Richardson (ER) (RICHARDSON, 1910) e sua aplicação recursiva (Múltipla Extrapolação de Richardson - MER), foram concebidas com o objetivo aumentar a ordem de acurácia de aproximações numéricas envolvidas na resolução de equações diferenciais através de diversos métodos de discretização (MDF, MVF, etc). As necessidades da época, em Engenharia, demandavam métodos rápidos, fáceis de serem entendidos e aplicáveis às equações estudadas (MARTINS, 2013). Assim, são apresentados alguns trabalhos relacionados à Extrapolação de Richardson (ER) e à Múltipla Extrapolação de Richardson (MER), em diferentes modelos matemáticos.

Richardson e Gaunt (1927) aplicaram a ER, com dois níveis de extrapolação, na equação integral de Volterra e nas derivadas no Teorema de Leibnitz, melhorando a acurácia.

Lima (1994) mostrou que a ER pode ser aplicada com sucesso ao problema de valor de contorno modelados por equações diferenciais lineares ordinárias de segunda ordem discretizadas com MDF, apresentando resultados numéricos que confirmam tal fato.

Han e Wang (2002) estudaram a solução numérica da equação integral de Fredholm bidimensional pelo método de Galerkin. A aplicação da ER melhorou rapidamente a taxa original da convergência.

Natividade e Stynes (2003) consideraram um problema de valor de contorno de convecção-difusão em uma malha uniforme por partes. Eles mostraram que, quando o *Upwind* simples é usado, uma versão da ER melhora a precisão da solução calculada.

Ertuk *et al.* (2005) utilizaram três malhas distintas no problema de escoamento permanente bidimensional de fluido incompressível em uma cavidade com tampa móvel e conseguiram obter sexta ordem de acurácia para a solução numérica, aplicando apenas dois níveis de ER.

Rahul e Bhattacharyya (2006) investigaram a ordem de acurácia de aproximações numéricas unilaterais empregadas quando as condições de contorno envolvem o cálculo de derivadas. Empregaram MER com três malhas distintas e dois níveis de extrapolação e atingiram a ordem quatro.

Marchi e Germer (2013) verificaram o desempenho da MER na redução do erro de discretização quando associado a dez tipos de esquemas numéricos de CFD de primeira, segunda e terceira ordens de precisão para resolver a equação unidimensional de advecção-difusão. Utilizaram como variáveis de interesse a temperatura no centro do domínio, média do campo de temperatura e taxa de transferência de calor. Os autores relataram que a MER é extremamente eficaz na redução do erro de discretização para todas as variáveis e esquemas numéricos.

Marchi *et al.* (2013a) verificaram a eficiência da MER para reduzir o erro de discretização em uma malha triangular e uma malha quadrada para a equação de Laplace bidimensional. Para isso utilizaram o MVF, malhas uniformes, aproximações de segunda ordem e condições de contorno de Dirichlet. Verificaram que a MER é eficiente para tal equação reduzindo o erro de discretização em ambas as malhas, mas com o erro menor para uma malha quadrada do que para uma malha triangular. Verificaram que a redução do erro numérico dependia da variável de interesse, além da geometria do domínio.

Marchi *et al.* (2013b) aplicaram a MER para a equação de Laplace bidimensional, com MDF, malhas uniformes, aproximações de segunda ordem e condições de contorno de Dirichlet. Os autores relataram que a MER reduziu significativamente o erro de discretização e que o estimador de erro de Richardson funcionou bem. Concluíram também que, para um dado nível de erro de discretização, um valor muito menor de tempo de CPU e memória RAM são necessários com o uso da MER.

Martins (2013) analisou o desempenho da MER, utilizando as equações de Poisson, advecção-difusão e de Burgers, discretizadas com o MDF e o MVF, propondo um conjunto de procedimentos numéricos que permitiram reduzir o erro de discretização. Foram empregadas funções de interpolação polinomial em domínios uni e bidimensionais e técnicas de otimização. Com relação às estimativas para o erro de

discretização, foram analisados os desempenhos de alguns estimadores disponíveis na literatura, e uma nova proposta de estimador para MER foi apresentada. Tal abordagem mostrou-se acurada e confiável. Esses resultados de Martins (2013) estão compilados em Marchi *et al.* (2016).

Da Silva *et al.* (2020) apresentaram um procedimento completo da MER para um tipo mais genérico de malha em escoamentos de fluidos compressíveis. Três testes são realizados para equações de Euler unidimensionais e quase unidimensionais: escoamento de Rayleigh, escoamento isentrópico e escoamento adiabático através de um bocal, todos resolvidos com o MDF. O procedimento proposto aumentou a acurácia obtida em todos os três testes. O melhor desempenho foi obtido para o escoamento de Rayleigh.

Da Silva *et al.* (2022) usaram a MER para melhorar a acurácia das soluções numéricas de variáveis locais e globais obtidas usando o método de hidrodinâmica de partículas suavizadas (SPH). A investigação se concentrou nos problemas unidimensionais de condução de calor em regime permanente e transiente com condições de contorno de Dirichlet. Os autores relataram que a MER é robusta na determinação até a décima sexta ordem de acurácia para o domínio espacial.

Como observamos nesta seção, os trabalhos relataram a eficiência da MER nos mais diversos modelos matemáticos, mas não encontramos até o presente momento, estudos aplicando a MER a modelos relacionados à aeração da massa de grãos, tampouco para o modelo proposto por Thorpe (2001b). Portanto, pretendemos fazer uso desta ferramenta para reduzir e estimar o erro de discretização aplicado na simulação do processo de aeração da massa de grãos.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo apresentaremos a fundamentação teórica, fornecendo o embasamento para o trabalho. Inicialmente, mostraremos o erro numérico, as ordens efetiva e aparente, o MVF e o tratamento das condições de contorno. Na sequência abordaremos a viscosidade artificial, o método para solução dos sistemas lineares. Finalmente, a anisotropia geométrica.

3.1 ERRO NUMÉRICO

Segundo Ferziger e Peric (2002), o erro numérico E é definido como a diferença entre a solução analítica exata Φ de uma variável de interesse e a sua solução numérica ϕ , ou seja, $E = \Phi - \phi$. Neste trabalho não dispomos de solução analítica, então utilizaremos aproximação numérica ou solução fabricada.

De acordo com Marchi (2001), o erro numérico possui quatro fontes principais: erros de truncamento, erros de iteração, erros de arredondamento e erros de programação.

- O erro de iteração tem como causas: o emprego de métodos iterativos para resolução do sistema de equações algébricas resultantes do processo de discretização; a resolução de problemas não lineares em que a matriz dos coeficientes é função da variável dependente do problema; e o tratamento de modelos matemáticos constituídos por mais de uma equação, sendo cada uma resolvida separadamente (MARTINS, 2013).
- Os erros de arredondamento ocorrem devido à representação finita dos números reais nas computações. Eles dependem do compilador (*software*) usado para gerar o código computacional e do computador (*hardware*) empregado em sua execução (MARTINS, 2013). Quanto maior é a precisão utilizada para representar as variáveis, menores são os erros; entretanto, maior é a memória computacional necessária para o armazenamento dessas variáveis (MARCHI, 2001).
- Os erros de programação são resultantes do uso incorreto de um modelo numérico na aproximação de um modelo matemático; os erros gerados na implementação do modelo numérico em um programa computacional; os erros cometidos no uso do programa computacional durante a obtenção da solução numérica; e qualquer outra eventual fonte de erro, como por exemplo: usar uma solução analítica com precisão inferior à da solução numérica (ROACHE, 1998).

O erro que ocorre ao se truncar uma sequência infinita é chamado erro de truncamento, ou seja, é proveniente do fato de se aproximar um modelo matemático contínuo por um modelo numérico discreto (ROACHE, 1998). Tais erros estão associados às aproximações numéricas utilizadas para as variáveis e suas derivadas no processo de discretização.

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). Deste modo, representamos o erro de discretização da seguinte forma,

$$E_h(\phi) = C_1 h^{p_1} + C_2 h^{p_2} + C_3 h^{p_3} + \dots, \quad (3.1)$$

sendo h o tamanho representativo da malha, C_i os coeficientes que não dependem da malha, mas sim da variável em questão, e p_i são as ordens verdadeiras, com $p_i < p_{i+1} < p_{i+2} < \dots$, onde $i = 1, 2, 3, \dots$. A primeira ordem verdadeira também é conhecida como ordem assintótica p_L , ou seja, $p_L = p_1$. A ordem assintótica do E_h da equação diferencial discretizada pode ser obtida por meio da chamada estimativa *a priori*, isto é, quando $h \rightarrow 0$ teremos uma simplificação na Eq. (3.1), representada por,

$$E_h(\phi) = C_1 h^{p_L}. \quad (3.2)$$

Portanto, antes de se obter a solução numérica podemos prever o comportamento assintótico do E_h . Desta equação podemos ver ainda que, quanto maior a p_L mais rápido decai o E_h quando $h \rightarrow 0$.

Uma estimativa do E_h também pode ser feita *a posteriori* das soluções numéricas. Com essa estimativa, podemos verificar se a ordem assintótica do E_h , calculada *a priori*, é obtida pelo modelo numérico desenvolvido. Se a solução analítica do problema é conhecida, podemos utilizar a ordem efetiva (p_E) do erro de discretização para estimar a ordem assintótica. Sabendo-se que Φ representa a solução analítica, ao se empregar as soluções numéricas ϕ_1 e ϕ_2 , para as malhas grossa (Ω^{h_1}) e fina (Ω^{h_2}), respectivamente, definimos a ordem efetiva como (MARCHI, 2001),

$$p_E = \frac{\log\left(\frac{\Phi - \phi_1}{\Phi - \phi_2}\right)}{\log(r)}, \quad (3.3)$$

onde $r = h_2/h_1$, com h_1 e h_2 sendo os tamanhos representativos das malhas grossa Ω^{h_1} e fina Ω^{h_2} , respectivamente.

Em inúmeras situações, não se dispõe da solução analítica, então podemos fazer uso da ordem aparente (p_U) para estimar a ordem assintótica. Para isto, utilizamos três soluções numéricas: ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3 correspondentes às soluções numéricas nas

malhas super grossa (Ω^{h_1}), grossa (Ω^{h_2}) e fina (Ω^{h_3}), respectivamente. Dessa forma, a ordem aparente (p_U) é definida por

$$p_U = \frac{\log\left(\frac{\phi_2 - \phi_1}{\phi_3 - \phi_2}\right)}{\log(r)}, \quad (3.4)$$

onde $r = h_2/h_1 = h_3/h_2$, com h_1 , h_2 e h_3 sendo os tamanhos representativos das malhas utilizadas.

As ordens efetiva e aparente tendem à ordem assintótica com o refinamento da malha, ou seja, $p_E \rightarrow p_L$ e $p_U \rightarrow p_L$ quando $h \rightarrow 0$ (MARCHI, 2001).

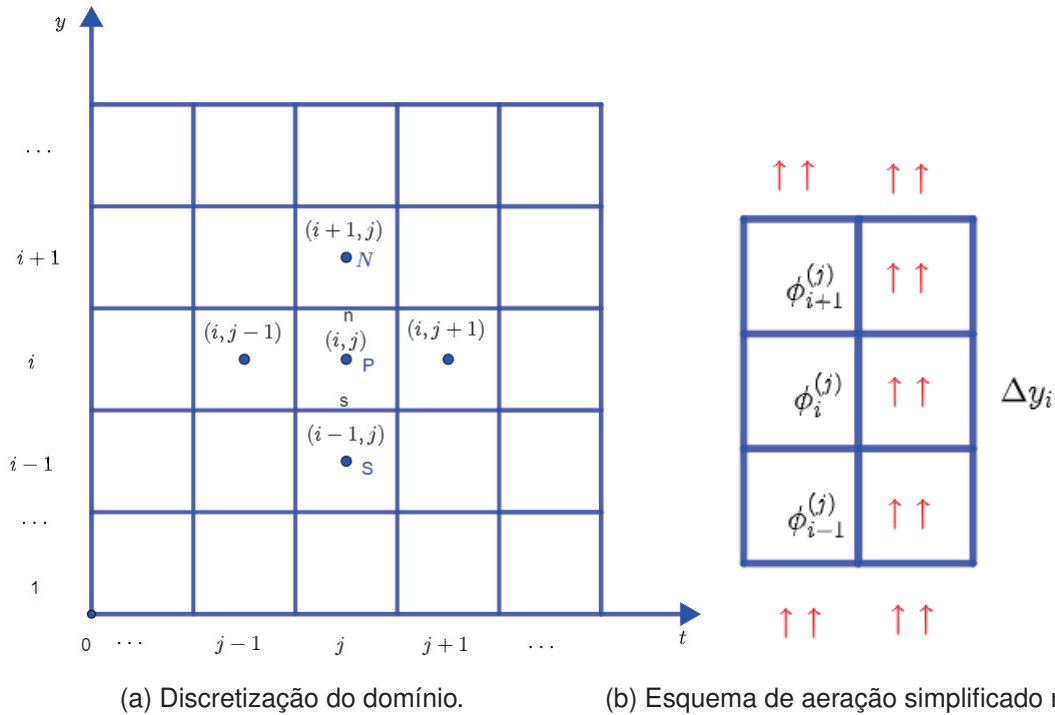
3.2 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS E CONDIÇÕES DE CONTORNO

O Método dos Volumes Finitos (MVF) foi introduzido na área de CFD no início da década de 1970 (MCDONALD, 1971; MACCORMACK; PAULLAY, 1972). Segundo Kolditz (2002), o MVF tem duas vantagens principais: primeiro, impõe a conservação de quantidades em nível discreto, isto é, massa, momento e energia permanecem conservados também em escala local. E com isso, os fluxos entre volumes de controle adjacentes são balanceados diretamente. Em segundo lugar, os esquemas de volumes finitos aproveitam ao máximo as malhas arbitrárias para aproximar geometrias complexas.

No MVF, cada ponto (ou nó) da malha computacional é envolto por um volume de controle (VC), como da Fig. 7. Tal figura mostra a discretização no tempo e no espaço, utilizando os pontos cardeais S (sul) e N (norte) como identificadores da posição dos volumes para a direção espacial e $j - 1$, j e $j + 1$ como identificadores da direção temporal. O domínio representado na Fig. 7 pode ser considerado como um subdomínio do domínio discreto original e sobre o qual as equações governantes são integradas e representadas por meio de balanços dos fluxos das propriedades através de suas faces.

A seta (\uparrow) indica o sentido do fluxo de ar de sul para norte e n e s correspondem às faces norte e sul do volume de controle P , respectivamente, com $P = i$, $N = i + 1$ e $S = i - 1$ representando o centro do volume e seus vizinhos norte e sul. O espaçamento espacial é dado por Δy , os subíndices representados por letras minúscula ou maiúscula, são respectivamente, a distância entre os pontos centrais dos volumes adjacentes e a distância entre as faces adjacentes. Como estamos trabalhando com malhas igualmente espaçadas por direção, os Δy são todos iguais, sendo definido por

$$\Delta y = \frac{L}{N_y}, \quad (3.5)$$

FIGURA 7 – VOLUME DE CONTROLE GENÉRICO, DE NÓ CENTRAL P , E SEUS VIZINHOS.

FONTE: Adaptado de Khatchatourian *et al.* (2017).

onde L representa a altura da massa de grãos (m) e N_y é o número de volumes físicos (volumes reais) na direção y desconsiderando os volumes fictícios (mais adiante há detalhes sobre este tipo de volume).

A diferença entre o tempo atual (j) de simulação e o tempo anterior ($j - 1$) é dada por,

$$\Delta t = \frac{t_f}{N_t}, \quad (3.6)$$

sendo t_f o tempo final de simulação e N_t corresponde ao número de passos no tempo. Por outro lado, a quantidade de volumes no domínio discretizado (N) e o número total de volumes considerando os volumes fictícios (N_f), são dados respectivamente por

$$N = N_t \times N_y \quad (3.7)$$

e

$$N_f = (N_t + 1) \times (N_y + 2). \quad (3.8)$$

Existem duas maneiras de se obter as equações aproximadas no método dos volumes finitos. A primeira é a realização de balanços da propriedade nos volumes elementares; e a segunda é a integração sobre o volume elementar, levando-se em consideração tanto o espaço quanto o tempo. As equações na forma conservativa é aquela em que na equação diferencial os fluxos estão dentro do sinal da derivada e, na primeira integração, aparecem nas fronteiras do volume elementar, equivalente portanto, ao balanço (MALISKA, 2017).

Neste trabalho utilizaremos a segunda maneira de obter as equações aproximadas no MVF, ou seja, integrando as equações na forma conservativa sobre o volume elementar. A título de ilustração da aplicação do MVF, consideremos a equação que expressa a advecção de uma determinada variável Λ (variável arbitrária), dada

$$\frac{\partial \rho \Lambda}{\partial t} + \frac{\partial \rho v \Lambda}{\partial y} = S, \quad (3.9)$$

sendo ρ - massa específica do fluido (kg/m^3), y - coordenada na direção vertical (m), t - coordenada temporal (s), v - componente de velocidade do ar na direção y (m/s) e o S - termo fonte.

Assim, com a definição de um VC representativo do domínio (contínuo), as propriedades do fluido são integradas sobre esse VC através do teorema da divergência de Gauss (GREENBERG, 1998).

Desse modo, integrando a Eq. (3.9) e aplicando as respectivas aproximações na derivada temporal (Euler implícito)

$$\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial t} \right)_P^{j+1} \approx \frac{\Lambda_P^{j+1} - \Lambda_P^j}{\Delta t} \quad (3.10)$$

e espacial (UDS)

$$\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right)_P \approx \frac{\Lambda_n - \Lambda_s}{\Delta y}, \quad (3.11)$$

obteremos

$$\rho (\Lambda_P^{j+1} - \Lambda_P^j) \Delta x \Delta y \Delta z + \rho (v_n \Lambda_n^{j+1} - v_s \Lambda_s^{j+1}) \Delta x \Delta z \Delta t = S_P \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t, \quad (3.12)$$

em que $j + 1$ representa o passo de tempo atual.

Considerando ρ constante, $\Delta x \Delta z = A_{xz}$ e dividindo toda a Eq. (3.12) por Δt , teremos

$$\frac{m_P}{\Delta t} (\Lambda_P^{j+1} - \Lambda_P^j) + \dot{m}_n \Lambda_n^{j+1} - \dot{m}_s \Lambda_s^{j+1} = S_P A_{xz} \Delta y, \quad (3.13)$$

onde m_p - massa de volume de controle P, \dot{m}_n - fluxo de massa na face norte e \dot{m}_s - fluxo de massa na face sul, dadas respectivamente por

$$m_p = \rho A_{xz} \Delta y, \quad (3.14)$$

$$\dot{m}_n = \rho A_{xz} v_n \quad (3.15)$$

e

$$\dot{m}_s = \rho A_{xz} v_s. \quad (3.16)$$

Aproximando os fluxos advectivos nas faces, Λ_n^{j+1} e Λ_s^{j+1} , por UDS (MALISKA, 2017), temos

$$\Lambda_n^{j+1} = \left(\frac{1}{2} + \alpha_n \right) \Lambda_P^{j+1} + \left(\frac{1}{2} - \alpha_n \right) \Lambda_N^{j+1} \quad (3.17)$$

e

$$\Lambda_s^{j+1} = \left(\frac{1}{2} + \alpha_s\right) \Lambda_S^{j+1} + \left(\frac{1}{2} - \alpha_s\right) \Lambda_P^{j+1}, \quad (3.18)$$

onde $\alpha_f = (1/2)\text{sign}(v_f)$, $f = n$ e s . A função $\text{sign}(\Lambda)$ fornece o sinal matemático da variável Λ .

Substituindo as Eqs. (3.17) e (3.18) na Eq. (3.13), após algumas manipulações algébricas e rearranjando os termos, obtemos

$$a_P \Lambda_P^{j+1} = a_N \Lambda_N^{j+1} + a_S \Lambda_S^{j+1} + b_P. \quad (3.19)$$

Com a_P , a_S e a_N representando os coeficientes após a aplicação das funções de interpolação e b_P representando o termo fonte, dados por,

$$a_N = -\dot{m}_n \left(\frac{1}{2} - \alpha_n\right), \quad (3.20)$$

$$a_S = \dot{m}_s \left(\frac{1}{2} + \alpha_s\right), \quad (3.21)$$

$$a_P = a_n + a_s + \frac{m_p}{\Delta t} \quad (3.22)$$

e

$$b_P = \frac{m_p}{\Delta t} \Lambda_P^j A_{xz} \Delta y. \quad (3.23)$$

Todas as técnicas apresentadas são para os volumes internos, pois, estes possuem equações aproximadas idênticas para todos os volumes. No entanto, para se obter as equações discretas completas, deve-se avaliar também os volumes nas fronteiras do domínio.

3.2.1 Condições de contorno

Existem várias técnicas para obter as equações nos volumes nas fronteiras do domínio. Dentre as técnicas possíveis, neste trabalho serão aplicados os volumes fictícios (MALISKA, 2017).

A principal vantagem desta técnica é sua facilidade de implementação, pois as expressões algébricas dos volumes fictícios ficam com as mesmas expressões algébricas dos volumes físicos. Por outro lado, sua desvantagem é a quantidade de variáveis adicionais que o problema ganhará, afetando o tempo computacional de simulação.

A técnica dos volumes fictícios consiste em adicionar volumes de controle ao redor do domínio físico, de modo que o balanço entre as propriedades nos volumes fictícios e seus vizinhos reais satisfaçam as condições de contorno originais do problema.

Por exemplo, para a condição de contorno de Dirichlet, a propriedade Λ no contorno é conhecida, Λ_c (GONÇALVES, 2013). A Fig. 8 representa o esquema para o volume de controle na fronteira sul com os seus respectivos volumes fictícios.

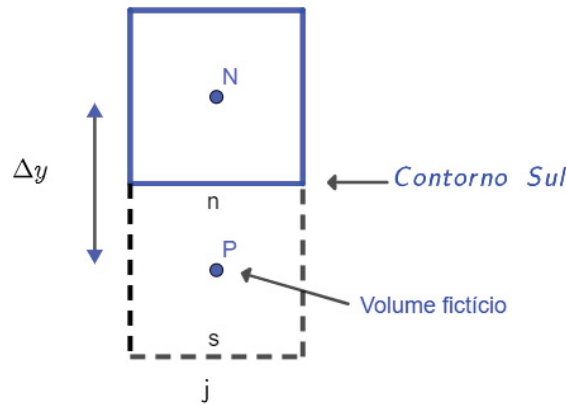
Neste caso, os coeficientes dos volumes fictícios para o volume P , na fronteira sul, será determinado pela média aritmética,

$$\Lambda_c = \frac{\Lambda_P + \Lambda_N}{2} \quad (3.24)$$

ou ainda,

$$\Lambda_P = -\Lambda_N + 2\Lambda_c. \quad (3.25)$$

FIGURA 8 – REPRESENTAÇÃO DO VOLUME FICTÍCIO NA FRONTEIRA SUL.



FONTE: O autor (2023).

Logo, comparando Eq. (3.25) com a Eq. (3.19), teremos os coeficientes e termos fonte no volume fictício em questão, dados por

$$a_P = 1; a_N = -1; a_S = 0; b_P = 2\Lambda_c. \quad (3.26)$$

De forma análoga obtemos a condição de contorno na fronteira norte.

3.3 VISCOSIDADE ARTIFICIAL

A viscosidade artificial, proposta por Von Neumann e Richtmyer (1950), é uma técnica que controla as oscilações não físicas nas soluções numéricas. Foi utilizada pela primeira vez para o modelo proposto por Thorpe (2001b) por Rigoni *et al.* (2022) para eliminar os problemas de oscilações não físicas excessivas nas aproximações de segunda ordem (CDS-CN, LS e RWS (*Roberts e Weiss Scheme*)).

A seguir vamos fazer um estudo para se obter uma expressão para a viscosidade artificial (TRYGGVASON, 2017). Sejam dadas as equações

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial Y}{\partial y} = 0, \quad (3.27)$$

$$Y' = Y - \delta \frac{\partial f}{\partial y} \quad (3.28)$$

e

$$\delta = \lambda(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right|, \quad (3.29)$$

onde $f = f(y,t)$ e $Y = Y(y,t)$ são funções diferenciáveis adequadas a esta dedução e λ (fator de viscosidade artificial) uma constante adimensional ajustável (CAMPBELL; VIGNJEVIC, 2009).

Substituindo Y por Y' na Eq. (3.27), temos

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial Y}{\partial y} = -\frac{\partial}{\partial y} \left[-\delta \frac{\partial f}{\partial y} \right] = V_A, \quad (3.30)$$

onde

$$V_A = \frac{\partial}{\partial y} \left[\lambda(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| \frac{\partial f}{\partial y} \right] \quad (3.31)$$

representa a viscosidade artificial.

Desta forma, quando $\Delta y \rightarrow 0$, $V_A \rightarrow 0$ e assim, a Eq. (3.30) \rightarrow Eq. (3.27).

Assim, adicionamos Eq. (3.31) na Eq. (3.9) e obtemos

$$\frac{\partial \rho \Lambda}{\partial t} + \frac{\partial \rho v \Lambda}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left[\lambda(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right] = S. \quad (3.32)$$

Efetuada a discretização da viscosidade artificial pelo método de Lax e Wendroff (1960) (TRYGGVASON, 2017; RIGONI *et al.*, 2022), temos

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\lambda(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right] \approx \frac{1}{\Delta y} \left(\left[\lambda(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right]_{P+\frac{1}{2}} - \left[\lambda(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right]_{P-\frac{1}{2}} \right), \quad (3.33)$$

sendo,

$$\left[\lambda(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right]_{P+\frac{1}{2}} \approx \lambda \left| \Lambda_N^n - \Lambda_P^n \right| (\Lambda_N^n - \Lambda_P^n) \quad (3.34)$$

e

$$\left[\lambda(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right]_{P-\frac{1}{2}} \approx \lambda \left| \Lambda_P^n - \Lambda_S^n \right| (\Lambda_P^n - \Lambda_S^n). \quad (3.35)$$

Empregando as aproximações dadas pelas Eqs. (3.34) e (3.35) na Eq. (3.33), temos

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\lambda(\Delta y)^2 \left| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right| \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \right] \approx \frac{\lambda}{(\Delta y)} \left[\left| \Lambda_N^n - \Lambda_P^n \right| (\Lambda_N^n - \Lambda_P^n) - \left| \Lambda_P^n - \Lambda_S^n \right| (\Lambda_P^n - \Lambda_S^n) \right], \quad (3.36)$$

que é o termo discretizado da viscosidade artificial, que será utilizado no decaimento das oscilações.

3.4 MÉTODO PARA SOLUÇÃO DOS SISTEMAS LINEARES

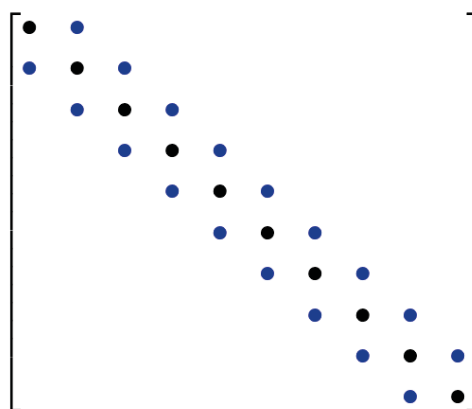
Após o processo de discretização (espacial e temporal), a avaliação das propriedades (ou variáveis dependentes) das equações em cada volume interno da malha computacional se dá em função de seus volumes vizinhos. Esse processo dá origem a um sistema de equações, que pode ser linear ou não, de acordo com as respectivas equações. Todavia, no caso de equações não lineares, uma sequência de sistemas lineares quase sempre podem ser obtidos através do emprego de técnicas de linearização (OLIVEIRA, 2020). Em nosso estudo, são gerados sistemas lineares. Observamos que a Eq. (3.19) contém apenas os coeficientes das variáveis vizinhas ao volume atual P . Desse modo, a matriz tem a maioria dos elementos nulos e os elementos não nulos concentram-se em torno da diagonal principal, que é chamada de matriz banda (CUNHA, 2000).

Desse modo, a Eq. (3.19) pode ser reescrita como

$$\mathbf{A}\phi = \mathbf{b}, \quad (3.37)$$

onde \mathbf{A} representa a matriz dos coeficientes, que nessa caso é uma matriz banda tridiagonal, com as três diagonais relacionadas aos coeficientes a_P , a_S e a_N (Fig. 9); \mathbf{b} é o termo independente do sistema, composto pelos elementos de b_p e ϕ é a incógnita.

FIGURA 9 – ESTRUTURA DE UMA MATRIZ TRIDIAGONAL.



FONTE: O autor (2023).

Assim, faz-se necessário um método de solução eficiente para matrizes do tipo banda. Utilizaremos o método TDMA (*TriDiagonal Matrix Algorithm*), proposto por (THOMAS, 1949), para resolver de forma direta os sistemas de equações algébricas. Tal método é baseado na decomposição LU da matriz tridiagonal.

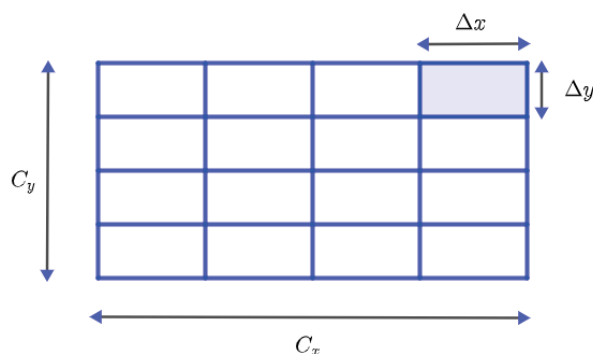
3.5 ANISOTROPIA E RAZÃO DE ASPECTO

Anisotropia é uma característica frequente nos fenômenos naturais e representa a não homogeneidade direcional de um determinado evento, ou seja, a variabilidade espacial dos elementos ocorre mais intensamente em uma direção preferencial (OLIVEIRA *et al.*, 2015).

No capítulo (1) desta tese, comentamos que a anisotropia pode ser física ou geométrica e que em nosso estudo vamos abordar a geométrica (ou anisotropia de malha). Para tanto, temos que definir o fator de anisotropia τ_{xy} como a relação entre os comprimentos adotados nas diversas direções. Devemos frisar que, no caso específico de anisotropia geométrica, tal fator também é chamado de razão de aspecto.

Na Fig. 10 podemos ver um tipo de anisotropia geométrica. Ela está caracterizada pelo tamanho da malha ($\Delta x, \Delta y$), comprimento do domínio de cálculo (C_x, C_y) e número de volumes (N_x, N_y) nas direções x e y , respectivamente.

FIGURA 10 – ANISOTROPIA GEOMÉTRICA.



FONTE: O autor (2023).

Dessa maneira, temos as seguintes características $\Delta x \neq \Delta y$, $N_x \neq N_y$ e $C_x \neq C_y$ onde $C_x = x_f - x_0$, com C_x representando o comprimento total na direção x , dado pela diferença entre o ponto final (x_f) e inicial (x_0) na direção x , e $C_y = y_f - y_0$ sendo C_y o comprimento total na direção y , dado pela diferença entre o ponto final (y_f) e inicial (y_0) na direção y . Matematicamente, definimos fator de anisotropia da malha (ou razão de aspecto) por (OLIVEIRA, 2010),

$$\tau_{xy} = \frac{\Delta x}{\Delta y}. \quad (3.38)$$

Quando $\tau_{xy} = 1$, a malha é chamada isotrópica, caso contrario ($\tau_{xy} \neq 1$), anisotrópica (BRIGGS *et al.*, 2000).

Neste trabalho generalizamos os conceitos apresentados por Oliveira (2010), que apresentou anisotropia geométrica puramente espacial, adaptando-os para o nosso

estudo em relação às variáveis temporal e espacial. Dessa forma por analogia e com abuso de linguagem e notação vamos definir a anisotropia temporal espacial, dada por

$$\tau_{ty} = \frac{\Delta t}{\Delta y}. \quad (3.39)$$

Vamos efetuar uma análise diferente da convencional utilizando uma relação entre o número de volumes na direção temporal (t) e espacial (y), visto que o tamanho dos domínios são diferentes. Neste caso, vamos considerar o tempo final (t_f) de 3600 s e o comprimento espacial em y de 1 m . Dessa forma, representando a razão espaço-tempo (τ) pelo número de volumes na direção temporal (N_t) sobre o número de volumes na direção espacial (N_y), temos

$$\tau = \frac{N_t}{N_y}. \quad (3.40)$$

Por exemplo, quando $\tau = 2$, significa que o número de volumes na direção temporal (N_t) é o dobro do número de volumes na direção espacial (N_y), ou ainda, quando $\tau = 4$, $N_t = 4N_y$, e assim de forma análoga para $\tau = 8, 16, 32$ e 64 , valores que serão analisados na tese.

4 MÚLTIPLA EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON E ESTIMADORES

Neste capítulo abordaremos a MER e o tipo da variável que trataremos neste trabalho. Na sequência veremos os estimadores Δ , Richardson, Richardson corrigido, Ψ e Ψ^* , posteriormente a efetividade dos estimadores.

4.1 MÚLTIPLA EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON

Extrapolção é o processo de construção de novos pontos que se encontram fora dos limites dos pontos conhecidos. De acordo com Brezinski e Zaglia (2009), um método de extrapolção pode ser entendido como qualquer transformação aplicada a uma sequência de escalares ou vetores.

Segundo Sidi (2003), um bom método de extrapolção geralmente leva em consideração o comportamento assintótico de uma sequência convergente. Dentre esses métodos, a extrapolção de Richardson (ER) é um dos mais conhecidos (MARTINS, 2013) e é utilizada para gerar resultados de alta precisão usando fórmulas de ordem inferior (RICHARDSON; GAUNT, 1927).

Segundo Burden e Faires (2016), a metodologia pode ser empregada sempre que se saiba que uma técnica de aproximação tenha um termo indicativo de erro de forma previsível, isto é, uma forma que dependa de um parâmetro real.

A ER é representada por

$$\phi_{\infty} = \phi(h) + \frac{\phi(h) - \phi(rh)}{r^{p_L} - 1}, \quad (4.1)$$

onde ϕ_{∞} é a solução analítica estimada, r é a razão de refino e p_L é a ordem verdadeira.

De acordo com Martins (2013), além da obtenção de ϕ_{∞} , a ER pode ser abordada na perspectiva de estimador do E_h envolvido no cálculo de $\phi(h)$.

Dessa forma, podemos obter a estimativa de E_h inerente a $\phi(h)$, por meio de

$$U_h = \phi_{\infty} - \phi(h) = \frac{\phi(h) - \phi(rh)}{r^{p_L} - 1}. \quad (4.2)$$

Quando consideramos p_L, p_2, p_3, \dots e $r = h_g/h_{g+1}$, valores gerais, a ER é conhecida como ER generalizada, onde as soluções $\phi(h)$ são obtidas em diferentes malhas e os subíndices g e $g + 1$ representam a malha grossa e a malha fina, respectivamente.

Dessa forma a expressão para a ER generalizada é dada por

$$\phi_{\infty} = \phi_{g+1} + \frac{\phi_{g+1} - \phi_g}{r^{p_i} - 1}. \quad (4.3)$$

Aplicando recursivamente a ER, é possível potencializar a sua eficácia. Como já comentado, esse processo é denominado Múltipla Extrapolação de Richardson (MER).

Tanto a ER como a MER podem ser entendidas como um pós-processamento sendo aplicável a resultados já existentes. Basta ter à disposição soluções numéricas em malhas distintas, estabelecidas por um processo de refinamento. Com MER, mesmo considerando-se a aplicação de esquemas numéricos de baixa ordem, é possível obter soluções numéricas de alta ordem (MARTINS, 2013).

Assim, a partir da Eq. (4.1), temos a MER

$$\phi_0(h_g) = \phi(h_g) \quad (4.4)$$

e

$$\phi_1(h_{g+1}) = \phi_0(h_{g+1}) + \frac{\phi_0(h_{g+1}) - \phi_0(h_g)}{r^{p_i} - 1}, \quad (4.5)$$

com $g = 1, 2, 3, \dots$

Embora a expressão apresentada na Eq. (4.5) seja apropriada para o estudo das propriedades de MER, ao se considerar o seu emprego em aplicações computacionais, a notação adotada por Marchi *et al.* (2008) torna-se mais adequada. Assim, a Eq. (4.5) passa a ser representada por

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1}}{r^{p_i} - 1}, \quad (4.6)$$

sendo válida para $g = 2, \dots, G$ e $m = 1, \dots, g - 1$, onde g representa o nível da malha Ω^{h_g} e m o número de aplicações da ER. A solução numérica sem o emprego de ER é representado pelo termo $\phi_{g,0}$.

Teoricamente, quanto maior o valor de m mais próximo $\phi_{g,m}$ estará de Φ e maior é o nível de acurácia. A Eq. (4.6), pode ser repetida infinitamente, mas para aplicações práticas considera-se um valor limite para $g = G$, onde G é um número inteiro positivo que corresponde ao número de malhas adotadas. A Tab. 1 representa o esquema para o emprego da MER.

De acordo com Marchi *et al.* (2008), o comportamento teórico de E_h pode ser verificado *a posteriori* quando se emprega a MER. Para isso, consideramos o valor de p_E , quando a solução analítica (Φ) é conhecida, e p_U quando não é conhecida. As expressões de p_E e p_U podem ser generalizadas para MER, e serão representadas por

$$(p_E)_{(g,m)} = \frac{\log \left[\frac{E_{h(g-1,m)}}{E_{h(g,m)}} \right]}{\log(r)} = \frac{\log \left[\frac{\Phi - \phi_{(g-1,m)}}{\Phi - \phi_{(g,m)}} \right]}{\log(r)} \quad (4.7)$$

e

$$(p_U)_{(g,m)} = \frac{\log \left[\frac{\phi_{(g-1,m)} - \phi_{(g-2,m)}}{\phi_{(g,m)} - \phi_{(g-1,m)}} \right]}{\log(r)}, \quad (4.8)$$

com $g = 2, \dots, G$ e $m = 1, \dots, g - 1$ para a Eq. (4.7) e com $g = 3, \dots, G$ e $m = 1, \dots, Int((g - 3)/2)$ para a Eq. (4.8), onde $Int(\sigma)$ é a representação da parte inteira de um número real σ .

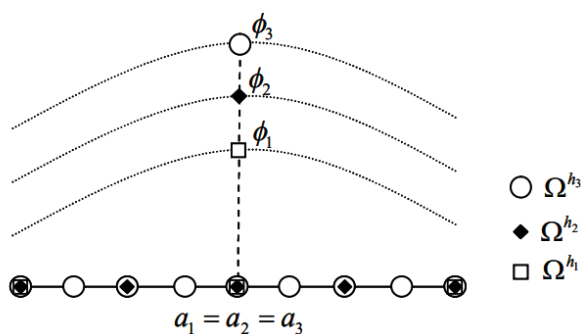
TABELA 1 – REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DO EMPREGO DE MER.

$m = 0$	$m = 1$	$m = 2$	\dots	$m = G - 2$	$m = G - 1$
$\phi_{1,0} = \phi_1$					
$\phi_{2,0} = \phi_2$	$\phi_{2,1}$				
$\phi_{3,0} = \phi_3$	$\phi_{3,1}$	$\phi_{3,2}$			
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots		
$\phi_{G-1,0} = \phi_{G-1}$	$\phi_{G-1,1}$	$\phi_{G-1,2}$	\dots	$\phi_{G-1,G-2}$	
$\phi_{G,0} = \phi_G$	$\phi_{G,1}$	$\phi_{G,2}$	\dots	$\phi_{G,G-2}$	$\phi_{G,G-1}$

FONTE: O autor (2023).

De acordo com Martins (2013), o emprego de MER requer a obtenção de soluções numéricas para determinada variável de interesse, em uma coleção de malhas distintas. Neste sentido, apresentamos na Fig. 11, o tipo de variável que será tratada neste trabalho com sua localização (uma classificação completa com outros tipos de variáveis e as adaptações da MER podem ser vistas em Martins (2013) e Marchi *et al.* (2016)).

FIGURA 11 – TIPO DE VARIÁVEL.



FONTE: Adaptado de Martins (2013)

Note que este é um tipo de variável local, cuja localização coordenada (a) é mantida em todas as malhas (Ω^h) consideradas e coincide com um ponto nodal.

Nesse caso, segundo Martins (2013), o emprego da MER ocorre diretamente. Tem-se assim o Algoritmo I:

ALGORITMO 1 APLICAÇÃO DA MER

Entrada: Soluções numéricas para a variável de interesse ϕ em G malhas distintas: $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots, \phi_G$, obtidas pelo Algoritmo 2.

Fazer: $\phi_{1,0} = \phi_1, \phi_{2,0} = \phi_2, \phi_{3,0} = \phi_3, \dots, \phi_{G,0} = \phi_G$

for $m = 1 : G - 1$ **do**

for $g = m + 1 : G - G$ **do**

$$\phi_{g,m} = \phi_{g,m-1} + \frac{\phi_{g,m-1} - \phi_{g-1,m-1}}{r^{p_{m-1}} - 1}$$

end for

end for

4.2 ESTIMADORES

Neste seção apresentaremos a obtenção de estimativa para o erro de discretização, considerando o emprego de MER. Dessa forma, abordaremos cinco estimadores, sendo eles Δ , Richardson, Richardson corrigido, Ψ e Ψ^* .

4.2.1 Estimador Δ

O estimador U_Δ , utilizado por Demirdzic *et al.* (1992), é dado pela expressão

$$U_\Delta = |\phi_g - \phi_{g-1}| \quad (4.9)$$

e efetua a estimativa de E_h correspondente à ϕ_g , considerando duas soluções numéricas ϕ_g e ϕ_{g-1} , respectivamente, das malhas fina Ω^{h_g} e grossa $\Omega^{h_{g-1}}$. Tal estimador não leva em consideração a razão de refino nem a ordem assintótica do método de discretização.

Considerando as soluções numéricas com a MER em um conjunto de malhas (G) distintas, Marchi *et al.* (2009) propuseram a estimativa na malha mais fina adotada (Ω^{h_G}) que fornece uma estimativa para E_m associado à $\phi_{G,m}$. Tal estimativa é dada por (veja Tab. 2)

$$U_\Delta(\phi_{G,m}) = |\phi_{G,m-1} - \phi_{G-1,m-1}|, \quad (4.10)$$

com $m = G - 1$ sendo o último nível de extrapolação considerado.

TABELA 2 – REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DO EMPREGO DE $U_{\Delta}(\phi_{G,m})$.

Malha	$m - 1$		m
$\Omega^{h_{G-1}}$	$\phi_{G-1,m-1}$		
		\searrow	
Ω^{h_G}	$\phi_{G,m-1}$	\rightarrow	$U_{\Delta}(\phi_{G,m}) = \phi_{G,m-1} - \phi_{G-1,m-1} $

FONTE: O autor (2023).

4.2.2 Estimadores de Richardson e Richardson Corrigido

O estimador de Richardson é denotado por U_{Ri} , sendo dado por

$$U_{Ri}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_g - \phi_{g-1}}{r^{p_1} - 1}. \tag{4.11}$$

De acordo com Marchi (2001), além da magnitude da estimativa de E_h , U_{Ri} fornece o seu sinal podendo ser empregado em diversos níveis de malha, isto é, Ω^{h_g} com $g = 2, \dots, G$. Assim, considerando soluções numéricas empregando a MER, Marchi *et al.* (2008) propuseram

$$U_{pm}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m}}{r^{p_m} - 1}, \tag{4.12}$$

com $m = [0, G - 2]$ e $g = [m + 2, G]$.

A simbologia U_{pm} , adotada por Martins (2013), indica a aplicação do estimador de Richardson, com base em $p_V = \{p_m, m = 1, 2, \dots\}$, assim denominando o estimador pm . A Tab. 3 representa o esquema para estimar E_m usando o estimador pm , para um nível m de extrapolação qualquer.

TABELA 3 – REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DO EMPREGO DE $U_{pm}(\phi_{g,m})$.

Malha	m		
$\Omega^{h_{g-1}}$	$\phi_{g-1,m}$		
		\searrow	
Ω^{h_g}	$\phi_{g,m}$	\rightarrow	$U_{pm}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m}}{r^{p_m} - 1}$

FONTE: O autor (2023).

Finalmente, aplicando um fator de correção (r^{p_m}), teremos o estimar de Richardson corrigido (MARTINS, 2013), representado por

$$U_{pmc}(\phi_{g,m}) = r^{p_m} U_{pm}(\phi_{g+1,m}), \tag{4.13}$$

com $m = g - 1$.

4.2.3 Estimadores Ψ e Ψ^*

Fazendo uso da série de Richardson, uma outra abordagem para ER é considerada por Marchi e Silva (2002), denotada por R_∞ e representada por

$$R_\infty = \frac{1}{\Psi} + \frac{1}{\Psi^2} + \frac{1}{\Psi^3} + \frac{1}{\Psi^4} + \dots, \quad (4.14)$$

onde $\Psi \in \mathbb{R}$, é a razão de convergência da série.

Para $|\Psi| > 1$ temos uma série geométrica, dada por

$$R_\infty = \frac{1}{\Psi - 1}. \quad (4.15)$$

Ou ainda, admitindo r e $P \in \mathbb{R}_+^*$, define-se $|\Psi| = r^P$, em que

$$R_\infty = \begin{cases} \frac{1}{r^P - 1}, & \text{se } \Psi > 1 \\ -\frac{1}{r^P + 1}, & \text{se } \Psi < 1 \end{cases}.$$

Dessa forma, reescrevendo a Eq. (4.1) e considerando $P = p_L$, teremos

$$\phi_\infty = \phi_g + R_\infty (\phi_g - \phi_{g-1}), \quad (4.16)$$

lembrando que ϕ_{g-1} e ϕ_g são as soluções obtidas, respectivamente, para as malhas grossa ($\Omega^{h_{g-1}}$) e fina (Ω^{h_g}).

De forma análoga à Eq. (4.2) e admitindo a existência de um estimador baseado no valor de Ψ , podemos escrever a Eq. (4.16) da seguinte maneira,

$$U_\Psi(\phi_g) = \frac{\phi_g - \phi_{g-1}}{\Psi - 1}. \quad (4.17)$$

Assim, considerando a razão de convergência de ϕ_M para estimar E_m , teremos

$$U_\Psi(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\Psi - 1}, \quad (4.18)$$

onde $\Psi = (\Psi_M)_g$, dada por

$$(\Psi_M)_g = \frac{\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2}}{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}, \quad (4.19)$$

com $g = 3, \dots, G$.

A Tab. 4, é a representação esquemática do emprego de U_Ψ para E_m , quando $m = g - 1$ malhas.

TABELA 4 – REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DO EMPREGO DE U_Ψ .

Malha	$m - 2$	$m - 1$	m
$\Omega^{h_{g-2}}$	$\phi_{g-2,m-2}$		
$\Omega^{h_{g-1}}$	$\phi_{g-1,m-2}$	$\phi_{g-1,m-1}$	
Ω^{h_g}	$\phi_{g,m-2}$	$\phi_{g,m-1}$	$\phi_{g,m}$

$$U_\Psi(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\Psi - 1}$$

FONTE: O autor (2023).

Agora, considerando as Eqs. (4.18) e (4.19), $\psi = (\psi_M)_g$ corresponde à ordem aparente dada à estimativa de E_m na malha Ω^{h_g} . Devido a seu cálculo envolver três malhas distintas, é natural admitir que o seu valor corresponda a uma inclinação média para o gráfico da estimativa de E_m (MARTINS, 2013).

A Eq. (4.20) calcula a correção para o estimador ψ em que a razão de convergência de ϕ_M é atribuída à malha intermediária do trio $\Omega^{h_{g-1}}$, Ω^{h_g} e $\Omega^{h_{g+1}}$, ou seja

$$\psi^* = \begin{cases} \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\phi_{g+1,m+1} - \phi_{g,m}}, & g = 2, 3, \dots, G - 1 \\ \frac{(\phi_{g-1,m-1} - \phi_{g-2,m-2})^2}{(\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1})(\phi_{g-2,m-2} - \phi_{g-3,m-3})}, & g = G \end{cases}, \quad (4.20)$$

em que ψ^* representa a correção para o estimador ψ , para $g = 2, 3, \dots, G - 1$, que é obtido para valores de ϕ em $\Omega^{h_{g-1}}$, Ω^{h_g} e $\Omega^{h_{g+1}}$ e o resultado atribuído a Ω^{h_g} . Para $g = G$ a malha $\Omega^{h_{g+1}}$ não está disponível para o cálculo de ψ^* , com isso, estabeleceremos uma relação entre os valores obtidos para ψ e ψ^* , considerando a obtenção de ψ^* através da razão entre o quadrado de ψ para $g = G$ e o seu valor para $g = G - 1$, nas Eqs. (4.18) e (4.19) (MARTINS, 2013).

Dessa forma, o cálculo da estimativa do erro numérico associado a ϕ_M (Eq. (4.20)), após a determinação de ψ^* por analogia a U_ψ , Eqs. (4.18) e (4.19), é dada por

$$U_{\psi^*}(\phi_{g,m}) = \frac{\phi_{g,m} - \phi_{g-1,m-1}}{\psi^* - 1}. \quad (4.21)$$

4.2.4 Efetividade de uma estimativa de erro

De acordo com Zhu e Zienkiewicz (1990), a efetividade $\Gamma(U_E)$ pode ser avaliada através da razão entre a estimativa (U_E) e o erro numérico (E)

$$\Gamma(U_E) = \frac{U_E}{E}, \quad (4.22)$$

em que U_E depende da escolha do estimador.

Segundo Marchi (2001), a estimativa de erro ideal é aquela em que $\Gamma(U_E) = 1$, isto é, quando $U_E = E$. Ademais, U_E é considerada confiável quando $\Gamma(U_E) \geq 1 \Rightarrow U_E \geq E$; e acurada quando $\Gamma(U_E) \approx 1 \Rightarrow U_E \approx E$.

5 MODELO MATEMÁTICO

O modelo matemático é um conjunto de equações, juntamente com as condições de contorno que descrevem adequadamente um fenômeno físico que pode ser analisado (TOZINNI, 2010), a demonstração do modelo está disponível no Anexo (A.1). Desta forma, apresentaremos neste capítulo o modelo de aeração da massa de grãos com suas simplificações e condições iniciais e de contorno.

5.1 MODELO DE THORPE

O modelo de aeração que descreve a temperatura e o teor de água da massa de grãos que será utilizado neste trabalho, foi apresentado de forma detalhada por Thorpe (2001b). Simplificações deste modelo foram sugeridas por Lopes *et al.* (2006) e utilizadas por outros autores, tais como Radtke (2009), Kwiatkowski Jr. (2011), Rigoni *et al.* (2022), entre outros.

O modelo proposto representa as equações da temperatura (T) e do teor de água da massa de grãos (U) e é dado por

$$\frac{\partial T}{\partial t} \left\{ \rho_{\sigma} [c_{\sigma} + c_W U] + \varepsilon \rho_a \left[c_a + R \left(c_W + \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T} \right) \right] \right\} =$$

$$\rho_{\sigma} h_s \frac{\partial U}{\partial t} - u_a \rho_a \left[c_a + R \left(c_W + \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T} \right) \right] \frac{\partial T}{\partial y} + \rho_{\sigma} \frac{dm}{dt} (Q_r - 0,6 h_{\varphi}) \quad (5.1)$$

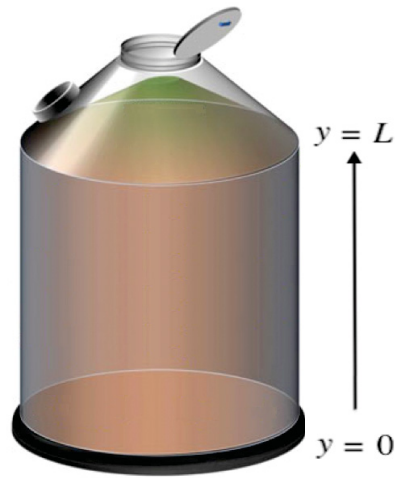
e

$$\rho_{\sigma} \frac{\partial U}{\partial t} = -u_a \rho_a \frac{\partial R}{\partial y} + \frac{dm}{dt} (0,6 + U), \quad (5.2)$$

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

Consideramos a massa de grãos na direção vertical, ou seja: $y \in [0, L]$, onde L representa a altura da massa de grãos, conforme a Fig. 12. Portanto, consideramos uma simplificação unidimensional do modelo.

FIGURA 12 – DOMÍNIO DE CÁLCULO.



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

De acordo com Brooker *et al.* (1992), o calor específico do ar (c_a) e o calor específico da água (c_w), são respectivamente, iguais a $1000 \text{ JKg}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ e $4186 \text{ JKg}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$. Segundo Navarro e Noyes (2001), o calor específico dos grãos (c_σ) influencia os processos de transferência de calor e de massa durante a aeração, utilizaremos os dados apresentados por Jayas e Cenkowski (2006) ($c_\sigma = 1637 \text{ JKg}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$). Segundo Fleurat-Lessard (2002), o calor de oxidação dos grãos (Q_r) é igual a $15778 \text{ (Js}^{-1}\text{m}^{-3}\text{)}$.

O modelo para calcular a derivada da perda de matéria seca foi apresentado por Thompson (1972), dado por:

$$\frac{dm}{dt} = 8,83 \times 10^{-4} \left\{ \exp \left[1,667 \times 10^{-6} \frac{t}{M_U M_T} \right] - 1 \right\} + 2,833 \times 10^{-9} \frac{t}{M_U M_T}. \quad (5.3)$$

em que, t representa o tempo (s), U é o teor de água na base úmida (b.u.) e T é a temperatura ($^\circ\text{C}$).

Os termos M_U e M_T são parâmetros utilizados para ajustar o tempo de aeração de acordo com o teor de água e a temperatura dos grãos. O valor de M_U é obtido por

$$M_U = 0,103 \left(\exp \left[\frac{455}{(100U)^{1,53}} \right] - 0,845U + 1,558 \right) \quad (5.4)$$

e M_T é obtido de acordo com a faixa de temperatura e o teor de água (b.u.):

$$M_T = M_S, \text{ se } T \leq 15 \text{ ou } U \leq 19, \quad (5.5a)$$

$$M_T = M_S + \frac{\frac{100U}{U+1} - 19}{100} \exp \left[0,0183T - 0,2847 \right], \text{ se } T > 15 \text{ e } 19 < U < 28, \quad (5.5b)$$

$$M_T = M_S + 0,09 \exp \left[0,0183T - 0,2847 \right], \text{ se } T > 15 \text{ e } U \geq 28, \quad (5.5c)$$

sendo

$$M_S = 32,2 \exp[-0,1044T - 1,856]. \quad (5.6)$$

A entalpia diferencial de sorção é a energia total requerida para remover uma unidade de massa de água da massa de grãos. Este valor é igual a diferença entre o calor latente de vaporização e a entalpia diferencial de umedecimento (NAVARRO; NOYES, 2001).

De acordo com Lopes *et al.* (2006), a entalpia diferencial de sorção (h_s) e a entalpia específica de vaporização da água (h_φ), são propriedades importantes, consideradas na simulação do processo de aeração, pois interferem nas transferências de calor de massa dentro do ambiente de armazenamento. Respectivamente, são dadas por

$$h_s = h_\varphi \left[1 + \frac{Ae^{-BU}(T + 273,15)}{(T + C)^2 - 5 + \frac{6800}{T + 273,15}} \right] \quad (5.7)$$

e

$$h_\varphi = 2501,33 - 2,363T, \quad (5.8)$$

onde A , B e C , são constantes que variam de acordo com o tipo de grão, conforme (PFOST *et al.*, 1976), para o caso do grão de soja, são dados respectivamente por 138,45, 14,967 e 24,576.

Segundo Thorpe (2001a), 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 mistura. Esse parâmetro é utilizado nas modelagens do comportamento da massa de grãos durante o processo de aeração, possibilitando a estimativa do teor de água do produto armazenado e auxiliando na previsão dos efeitos da aeração no ambiente de armazenamento e é dada por

$$R = 0,622 \frac{r_u p_s}{P_{atm} - r_u p_s}, \quad (5.9)$$

em que r_u é o teor de água de equilíbrio (%), P_{atm} corresponde à pressão atmosférica (kPa) e p_s a pressão de vapor de saturação (kPa), calculada conforme Hunter (1987),

$$p_s = \frac{6 \times 10^{25}}{(T + 273,15)^5} \exp \left[-\frac{6800}{T + 273,15} \right], \quad (5.10)$$

e o teor de água de equilíbrio (r_u) pode ser obtida conforme Chung e Pfof (1967),

$$r_u = 100 \exp \left[-\frac{A}{T + C} \exp(-BU) \right]. \quad (5.11)$$

A velocidade do ar de aeração (u_a) consiste na velocidade na qual o ar flui através da massa de grãos armazenada. Como a solução fabricada proposta por Rigoni (2022) e Rigoni *et al.* (2022) é baseada a nível de comparação com os dados

experimentais de Oliveira *et al.* (2007). Portanto, consideramos a velocidade do ar de aeração constante igual a $0,23 \text{ m/s}$. a mesma utilizada por Oliveira *et al.* (2007), Radtke (2009), Kwiatkowski Jr. (2011), Rigoni (2022) e Rigoni *et al.* (2022).

A massa porosa é constituída pelos grãos e pelo espaço vazio entre os grãos. Assim a porosidade é a relação entre o volume ocupado pelo ar existente na massa de grãos e o volume total ocupado por esta massa, tendo grande influência sobre pressão de fluxo de ar que atravessa a massa de grãos (KWIATKOWSKI JR., 2011).

Considerando a porosidade (ε) da massa de grãos constante, pois a porosidade da maioria dos grãos está entre 35 e 55% (BROOKER *et al.*, 1992), usando 0,361 conforme Brooker *et al.* (1974).

Visando corrigir os possíveis efeitos da altitude a massa específica do ar (ρ_a) foi apresentada por Alé (2001) como sendo

$$\rho_a = \frac{258,8P_{atm}}{101,325(T + 273,15)}. \quad (5.12)$$

A densidade dos grãos (ρ_σ) determina o volume necessário para armazenar uma determinada quantidade de um produto e influencia diretamente a taxa de fluxo de ar necessária para aeração e o calor e a massa do processo de transferência no ambiente de armazenamento (LOPES *et al.*, 2006). Neste trabalho vamos considerar $\rho_\sigma = 737 \text{ (kgm}^{-3}\text{)}$ (THORPE, 2001a).

Vale ressaltar que todos os parâmetros citados ao longo do texto é para o grão de soja. Para outros grãos devemos observar os valores apresentados na Tab. 5.

TABELA 5 – CONSTANTES DE ACORDO COM O TIPO DO GRÃO.

Tipo de Grão	A	B	C	$\varepsilon(\%)$	$\rho_\sigma \text{ (}\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\text{)}$	$c_\sigma \text{ (Jkg}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}\text{)}$
Arroz	594,65	21,733	35,703	0,584	576	1197,0
Aveia	-	-	-	0,555	480	1277,0
Cevada	761,74	19,889	91,323	-	-	-
Milho	312,31	16,958	30,205	0,435	640	1534,8
Soja	138,45	14,967	24,576	0,361	737	1637,0
Sorgo	1099,68	19,644	102,849	-	-	-
Trigo	725,59	23,607	35,662	0,453	762	1184,0

FONTE: Pfost *et al.* (1976), Brooker *et al.* (1992), Thorpe (2001b), Jayas e Cenkowski (2006).

5.2 CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO

Antes do armazenamento no silo, os grãos passam pelo processo de secagem. A secagem tem o objetivo de retirar água do produto até um valor seguro para o armazenamento, após a secagem a temperatura dos grãos é sempre alta e desfavorável ao armazenamento seguro, por isso, a necessidade do processo de aeração. Assim, a condição inicial em toda a massa de grãos (todo o domínio) é igual a essa temperatura inicial (T_I). Isto é,

$$T(y, 0) = T_I. \quad (5.13)$$

O teor de água inicial (U_I) é obtida segundo Thorpe (2001b), onde a Eq. (5.14) converte um teor de água em bu. para bs (base seca). O teor de água inicial dos grãos é aquele obtido durante a secagem, devendo ser estipulado com base em critérios relacionados ao armazenamento seguro.

$$U(y, 0) = \frac{U_p}{100 - U_p} = U_I, \quad (5.14)$$

onde U_p é o teor de água inicial da massa de grãos, em porcentagem (% bu).

As condições de contorno correspondem à superfície da massa de grãos e o piso do silo (NAVARRO; NOYES, 2001). Dessa forma, supondo que o ventilador e os dutos para aeração estejam localizados na parte inferior do silo (piso do silo), a condição de contorno do tipo de Dirichlet para a temperatura em $y = 0$ é dada por

$$T(0, t) = T_B, \quad (5.15)$$

onde T_B é a temperatura do ar de aeração ($^{\circ}C$).

E para o teor de água, é dada por

$$U(0, t) = -\frac{1}{B} \ln \left[\ln \left(-\frac{r_a}{100} \right) \left(-\frac{T_B + C}{A} \right) \right] = U_B, \quad (5.16)$$

que é uma adaptação de Chung-Pfost (Eq. (5.11)), sendo U_B o teor de água para $y = 0$ e r_a é a umidade relativa do ar de aeração (%), calculada por

$$r_a = \frac{u_r K_1 e^{K_2 - K_4}}{K_3}, \quad (5.17)$$

com u_r representando a umidade relativa do ar ambiente (%) e K_i com $i = 1, 2, 3$ e 4 , representando equações auxiliares para calcular r_a , dadas respectivamente por

$$K_1 = \frac{6 \times 10^{25}}{(T_{amb} + 273,15)^5}, \quad (5.18)$$

$$K_2 = -\frac{6800}{T_{amb} + 273,15}, \quad (5.19)$$

$$K_3 = \frac{6 \times 10^{25}}{(T_B + 273,15)^5} \quad (5.20)$$

e

$$K_4 = -\frac{6800}{T_B + 273,15}, \quad (5.21)$$

em que T_{amb} é a temperatura ambiente ($^{\circ}C$).

Na superfície da massa de grãos ($y = L$), temos a condição de Neumann, tanto para temperatura quanto para o teor de água,

$$\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_{y=L} = \left(\frac{\partial U}{\partial y}\right)_{y=L} = 0. \quad (5.22)$$

5.3 SOLUÇÃO FABRICADA

A solução fabricada (Eq. (5.23)) que por conveniência chamaremos nesta tese de solução analítica, proposta por Rigoni *et al.* (2022) é baseada, comparada e validada com os dados experimentais de um mini-silo realizada por Oliveira *et al.* (2007).

Segundo Rigoni *et al.* (2022), para determinar a solução fabricada da Eq. (5.1) proposta neste trabalho foram efetuadas modificações por meio de uma solução apresentado por Van Genuchten *et al.* (1982), dada por

$$\hat{T}(y, t) = T_I + \frac{1}{2}(T_B - T_I) \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{y - 2,2 \times 10^{-4}t}{\sqrt{8 \times 10^{-6}t}}\right) + \exp\left(\frac{2,2 \times 10^{-4}y}{8 \times 10^{-6}}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{y + 2,2 \times 10^{-4}t}{\sqrt{8 \times 10^{-6}t}}\right) \right], \quad (5.23)$$

onde *erfc* representa a função erro complementar (VAN GENUCHTEN *et al.*, 1982), definida por

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt. \quad (5.24)$$

De acordo com Rigoni *et al.* (2022), para a função definida anteriormente ser considerada solução analítica da Eq. (5.1), um termo fonte (S_P) é adicionado à equação governante, como segue,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial T}{\partial t} \left\{ \rho_{\sigma} [c_g + c_W U] + \varepsilon \rho_a [c_a + R(c_W + \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T})] \right\} = \\ & \rho_{\sigma} h_s \frac{\partial U}{\partial t} - u_a \rho_a \left[c_a + R(c_W + \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T}) \right] \frac{\partial T}{\partial y} + \rho_{\sigma} \frac{dm}{dt} (Q_r - 0,6h_{\varphi}) + S_P, \end{aligned} \quad (5.25)$$

com o termo fonte (S_P), dado por

$$\begin{aligned} S_P = & \frac{\partial \hat{T}}{\partial t} \left\{ \rho_{\sigma} [c_g + c_W U] + \varepsilon \rho_a [c_a + R(c_W + \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T})] \right\} \\ & - \rho_{\sigma} h_s \frac{\partial U}{\partial t} + u_a \rho_a \left[c_a + R(c_W + \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T}) \right] \frac{\partial \hat{T}}{\partial y} - \rho_{\sigma} \frac{dm}{dt} (Q_r - 0,6h_{\varphi}). \end{aligned} \quad (5.26)$$

Sendo as derivadas $\frac{\partial \hat{T}}{\partial t}$ e $\frac{\partial \hat{T}}{\partial y}$, dadas respectivamente por

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{T}}{\partial t} = & \frac{1}{2}(T_B - T_I) \left[- \frac{2 \exp \left[\frac{-125000(y - 2,2 \times 10^4 t)^2}{t} \right] \left(- \frac{176,777(y - 2,2 \times 10^{-4}t)}{t^{\frac{3}{2}}} - \frac{0,0777817}{\sqrt{t}} \right)}{\sqrt{\pi}} \right. \\ & \left. - \frac{2 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^4 t + y)^2}{t} \right] \left(\frac{0,0777817}{\sqrt{t}} - \frac{176,777(2,2 \times 10^{-4}t + y)}{t^{\frac{3}{2}}} \right)}{\sqrt{\pi}} \right]. \end{aligned} \quad (5.27)$$

e

$$\frac{\partial \hat{T}}{\partial y} = \frac{1}{2}(T_B - T_I) \left[\frac{27,5 \exp [27,5y] \operatorname{erfc} \left(\frac{353,553(2,2 \times 10^{-4}t + y)}{\sqrt{t}} \right)}{\sqrt{t}} - \frac{398,942 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^{-4}t)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} - \frac{398,942 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^{-4}t + y)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} \right]. \quad (5.28)$$

Assim, obtemos o termo fonte, substituindo as Eqs. (5.27) e (5.28) na Eq. (5.26),

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_P = & \left\{ \frac{1}{2}(T_B - T_I) \left[- \frac{2 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^4t)^2}{t} \right] \left(- \frac{176,777(y-2,2 \times 10^{-4}t)}{t^{\frac{3}{2}}} - \frac{0,0777817}{\sqrt{t}} \right)}{\sqrt{\pi}} \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{2 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^4t + y)^2}{t} \right] \left(\frac{0,0777817}{\sqrt{t}} - \frac{176,777(2,2 \times 10^{-4}t + y)}{t^{\frac{3}{2}}} \right)}{\sqrt{\pi}} \right] \right\} \left\{ \rho_\sigma [c_g + c_W U] \right. \\ & \left. + \varepsilon \rho_a \left[c_a + R \left(c_W + \frac{\partial h_\varphi}{\partial T} \right) \right] \right\} - \rho_\sigma h_s \frac{\partial U}{\partial t} + u_a \rho_a \left[c_a + R \left(c_W + \frac{\partial h_\varphi}{\partial T} \right) \right] \\ & \left\{ \frac{1}{2}(T_B - T_I) \left[\frac{27,5 \exp [27,5y] \operatorname{erfc} \left(\frac{353,553(2,2 \times 10^{-4}t + y)}{\sqrt{t}} \right)}{\sqrt{t}} \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{398,942 \exp \left[\frac{-125000(y-2,2 \times 10^{-4}t)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} - \frac{398,942 \exp \left[27,5y - \frac{125000(2,2 \times 10^{-4}t + y)^2}{t} \right]}{\sqrt{t}} \right] \right\} \\ & - \rho_\sigma \frac{dm}{dt} (Q_r - 0,6h_\varphi), \quad (5.29) \end{aligned}$$

ou ainda, de forma simplificada, dada por

$$\mathcal{S}_P = \frac{1}{2} (T_B - T_I) \left\{ \mathcal{A} \left[\frac{\mathcal{C} - \mathcal{D}}{\sqrt{\pi}} \right] + \mathcal{B} \left[\mathcal{E} - 398,942 \left(\frac{\mathcal{F}}{\sqrt{t}} \right) \right] \right\}, \quad (5.30)$$

sendo

$$\mathcal{A} = \rho_\sigma [c_g + c_W U] + \varepsilon \rho_a \left[c_a + R \left(c_W + \frac{\partial h_\varphi}{\partial T} \right) \right], \quad (5.31)$$

$$\mathcal{B} = u_a \rho_a \left[c_a + R \left(c_W + \frac{\partial h_\varphi}{\partial T} \right) \right], \quad (5.32)$$

$$\mathcal{C} = 2 \exp \left[- \frac{125000}{t} (y - 2,2 \times 10^4 t)^2 \right] \left(\frac{176,777}{\sqrt{t^3}} (y - 2,2 \times 10^{-4} t) + \frac{0,0777817}{\sqrt{t}} \right), \quad (5.33)$$

$$\mathcal{D} = 2 \exp \left[27,5y - \frac{125000}{t} (y + 2,2 \times 10^4 t)^2 \right] \left(\frac{0,0777817}{\sqrt{t}} - \frac{176,777}{\sqrt{t^3}} (y + 2,2 \times 10^{-4} t) \right), \quad (5.34)$$

$$\mathcal{E} = 27,5 \exp (27,5y) \operatorname{erfc} \left(\frac{353,553(y + 2,2 \times 10^{-4}t)}{\sqrt{t}} \right) \quad (5.35)$$

e

$$\mathcal{F} = \exp \left[-\frac{125000}{t}(y - 2,2 \times 10^4 t)^2 \right] + \exp \left[27,5y - \frac{125000}{t}(y + 2,2 \times 10^{-4} t)^2 \right]. \quad (5.36)$$

Dessa forma, efetuando algumas simplificações, a equação que descreve a temperatura (T) da massa de grão, é dada por

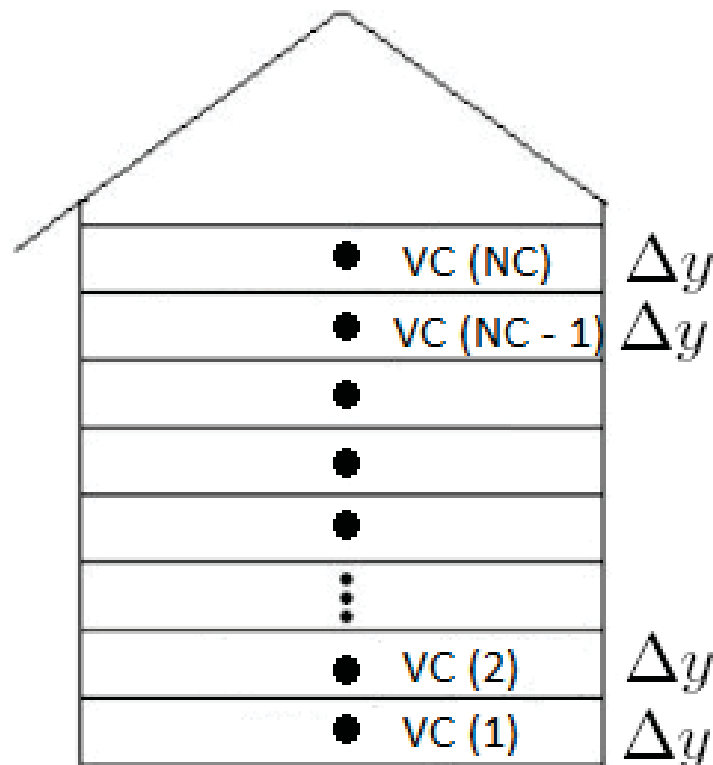
$$\mathcal{A} \frac{\partial T}{\partial t} + \mathcal{B} \frac{\partial T}{\partial y} = S_P. \quad (5.37)$$

6 MODELO NUMÉRICO

Notamos que podemos ter mais de uma quantidade para ser armazenada em um dado volume de controle (VC) da malha. Quando todas as propriedades são armazenadas no centro de tal volume, dizemos que é um arranjo colocalizado e quando isto não ocorre dizemos que é um arranjo desencontrado (MALISKA, 2017). Nesta tese trabalharemos com o arranjo colocalizado, pois, possuem maior facilidade de implementação e dessa forma, apenas um tipo de VC pode ser utilizado para todas as integrações das equações do modelo matemático.

O MVF utiliza como ponto de partida a forma integral da equação da conservação. O domínio de solução (Fig. 12) é dividido em um número finito de VCs contíguos e a equação da conservação é aplicada a cada VC (Fig. 13). No centroide de cada VC localiza-se um nó computacional, no qual são calculados os valores das variáveis. Os valores das variáveis nas faces dos VCs são obtidos por interpolação em função dos valores nodais (MALISKA, 2017).

FIGURA 13 – DOMÍNIO DISCRETIZADO.



FONTE: O autor (2023).

Como podemos observar na Fig. 13, NC representa o volume no contorno, e como já visto, $\Delta y = L/N_y$ é o distanciamento entre os centros dos volumes consecutivos e N_y é o

número destes volumes na direção espacial. Como trata-se de um problema transiente, temos também $\Delta t = t_f/N_t$, com t_f sendo o tempo final e N_t o número de passos no tempo. A seguir, apresentamos as discretizações.

6.1 ESQUEMA UPWIND (UDS)

Para a aproximação espacial de T e R por UDS e a temporal de T utilizando a formulação θ na Eq. (5.1) e inserindo um termo fonte S_P^θ para adequar-se à solução analítica proposta em Rigoni (2022) e Rigoni *et al.* (2022), obteremos:

$$\mathcal{A}_P^\theta T_P^{j+1} = \mathcal{A}_P^\theta T_P^j - \mathcal{B}_P^\theta \frac{\Delta t}{\Delta y} (T_P^\theta - T_S^\theta) + \mathcal{S}_P^\theta \Delta t, \quad (6.1)$$

onde:

$$\mathcal{A}_P^\theta = \rho_\sigma \left[c_\sigma + c_W U_P^\theta \right] + \varepsilon \rho_a \left[c_a + R_P^\theta \left(c_W + \frac{\partial h_\varphi}{\partial T} \right) \right], \quad (6.2)$$

$$\mathcal{B}_P^\theta = u_a \rho_a \left[c_a + R_P^\theta \left(c_W + \frac{\partial h_\varphi}{\partial T} \right) \right] \quad (6.3)$$

e

$$\mathcal{S}_P^\theta = \frac{1}{2} (T_B - T_I) \left\{ \mathcal{A}_P^\theta \left[\frac{\mathcal{C} - \mathcal{D}}{\sqrt{\pi}} \right] + \mathcal{B}_P^\theta \left[\varepsilon - 398,942 \left(\frac{\mathcal{F}}{\sqrt{t}} \right) \right] \right\}, \quad (6.4)$$

com \mathcal{A} , \mathcal{B} , \mathcal{C} , \mathcal{D} , ε e \mathcal{F} , dados respectivamente, pelas Eqs. (6.2), (6.3), (5.33), (5.34), (5.35) e (5.36).

Aproximando a derivada espacial de R por UDS e a derivada temporal em relação a variável U na Eq. (5.2), teremos:

$$U_P^{j+1} = U_P^j - \alpha \left(R_P^\theta - R_S^\theta \right) + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \left(0,6 + U_P^\theta \right), \quad (6.5)$$

onde

$$\alpha = \frac{u_a \rho_a \Delta t}{\rho_\sigma \Delta y}. \quad (6.6)$$

Nas Eqs. (6.1) a (6.4) e na Eq. (6.5), θ representa as formulações explícita ($\theta = 0$), implícita ($\theta = 1$) ou Crank-Nicolson ($\theta = 0,5$) (MALISKA, 2017).

Todas as equações apresentadas são para os volumes internos, portanto para se obter as equações algébricas completas é necessário obter as equações nos volumes nas fronteiras do domínio. Como já mencionado, neste estudo vamos aplicar a técnica dos volumes fictícios.

Como sabemos, o balanço entre as propriedades nos volumes fictícios e seus vizinhos reais devem satisfazer as condições de contorno originais do problema. Portanto, em $y = L$, para a temperatura T e teor de água U , respectivamente, temos

$$T_{NC}^{j+1} = T_{NC-1}^j \quad (6.7)$$

e

$$U_{NC}^{j+1} = U_{NC-1}^j. \quad (6.8)$$

A seguir apresentaremos as três formulações temporais: explícita, implícita e Crank-Nicolson.

6.1.1 Formulação Explícita

Para o caso $\theta = 0$, a Eq. (6.1) pode ser reescrita como

$$\mathcal{A}_P^j T_P^{j+1} = \mathcal{A}_P^j T_P^j - \mathcal{B}_P^j \frac{\Delta t}{\Delta y} (T_P^j - T_S^j) + \mathcal{S}_P^j \Delta t, \quad (6.9)$$

onde

$$\mathcal{A}_P^j = \rho_\sigma \left[c_\sigma + c_W U_P^j \right] + \varepsilon \rho_a \left[c_a + R_P^j \left(c_W + \frac{\partial h_\varphi}{\partial T} \right) \right], \quad (6.10)$$

$$\mathcal{B}_P^j = u_a \rho_a \left[c_a + R_P^j \left(c_W + \frac{\partial h_\varphi}{\partial T} \right) \right] \quad (6.11)$$

e

$$\mathcal{S}_P^j = \frac{1}{2} (T_B - T_I) \left\{ \mathcal{A}_P^j \left[\frac{\mathcal{C} - \mathcal{D}}{\sqrt{\pi}} \right] + \mathcal{B}_P^j \left[\varepsilon - 398,942 \left(\frac{\mathcal{F}}{\sqrt{t}} \right) \right] \right\}. \quad (6.12)$$

Escrevendo a Eq. (6.9) no formato da Eq. (3.19), temos

$$a_N = 0, \quad (6.13)$$

$$a_S = 0, \quad (6.14)$$

$$a_P = \mathcal{A}_P^j \quad (6.15)$$

e

$$b_P = \mathcal{A}_P^j T_P^j - \mathcal{B}_P^j \frac{\Delta t}{\Delta y} (T_P^j - T_S^j) + \mathcal{S}_P^j \Delta t. \quad (6.16)$$

No caso da Eq. (6.5), obtemos

$$U_P^{j+1} = \left(1 + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right) U_P^j - \alpha (R_P^j - R_S^j) + 0,6 \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma}. \quad (6.17)$$

6.1.2 Formulação Implícita

Para o caso $\theta = 1$, a Eq. (6.1) pode ser reescrita como

$$\left(\mathcal{A}_P^{j+1} + \mathcal{B}_P^{j+1} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_P^{j+1} = \mathcal{A}_P^{j+1} T_P^j + \mathcal{B}_P^{j+1} \frac{\Delta t}{\Delta y} T_S^{j+1} + \mathcal{S}_P^{j+1} \Delta t, \quad (6.18)$$

onde

$$\mathcal{A}_P^{j+1} = \rho_\sigma \left[c_\sigma + c_W U_P^{j+1} \right] + \varepsilon \rho_a \left[c_a + R_P^{j+1} \left(c_W + \frac{\partial h_\varphi}{\partial T} \right) \right], \quad (6.19)$$

$$\mathcal{B}_P^{j+1} = u_a \rho_a \left[c_a + R_P^{j+1} \left(c_W + \frac{\partial h_\varphi}{\partial T} \right) \right] \quad (6.20)$$

e

$$\mathcal{S}_P^{j+1} = \frac{1}{2} (T_B - T_I) \left\{ \mathcal{A}_P^{j+1} \left[\frac{\mathcal{C} - \mathcal{D}}{\sqrt{\pi}} \right] + \mathcal{B}_P^{j+1} \left[\varepsilon - 398,942 \left(\frac{\mathcal{F}}{\sqrt{t}} \right) \right] \right\}. \quad (6.21)$$

Com os coeficientes de acordo com o formato da Eq. (3.19), dados por

$$a_N = 0, \quad (6.22)$$

$$a_S = \mathcal{B}_P^{j+1} \frac{\Delta t}{\Delta y}, \quad (6.23)$$

$$a_P = \mathcal{A}_P^{j+1} + \mathcal{B}_P^{j+1} \frac{\Delta t}{\Delta y} \quad (6.24)$$

e

$$b_P = \mathcal{A}_P^{j+1} T_P^j + \mathcal{S}_P^{j+1} \Delta t. \quad (6.25)$$

No caso da Eq. (6.5), obtemos

$$\left(1 - \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right) U_P^{j+1} = U_P^j - \alpha \left(R_P^{j+1} - R_S^{j+1} \right) + 0,6 \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma}. \quad (6.26)$$

6.1.3 Formulação Crack-Nicolson (CN)

Para o caso $\theta = 0,5$, a Eq. (6.1) pode ser reescrita como

$$\left(\mathcal{A}_P^{CN} + \frac{\mathcal{B}_P^{CN}}{2} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_P^{j+1} = \left(\mathcal{A}_P^{CN} - \frac{\mathcal{B}_P^{CN}}{2} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right) T_P^j + \frac{\mathcal{B}_P^{CN}}{2} \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(T_S^{j+1} + T_S^j \right) + \mathcal{S}_P^{CN} \Delta t, \quad (6.27)$$

onde

$$\mathcal{A}_P^{CN} = \rho_\sigma \left[c_\sigma + \frac{c_W}{2} \left(U_P^{j+1} + U_P^j \right) \right] + \varepsilon \rho_a \left[c_a + \frac{R_P^{j+1} + R_P^j}{2} \left(c_W + \frac{\partial h_\varphi}{\partial T} \right) \right], \quad (6.28)$$

$$\mathcal{B}_P^{CN} = u_a \rho_a \left[c_a + \frac{R_P^{j+1} + R_P^j}{2} \left(c_w + \frac{\partial h_\varphi}{\partial T} \right) \right] \quad (6.29)$$

e

$$\mathcal{S}_P^{CN} = \frac{1}{2} (T_B - T_I) \left\{ \mathcal{A}_P^{CN} \left[\frac{\mathcal{C} - \mathcal{D}}{\sqrt{\pi}} \right] + \mathcal{B}_P^{CN} \left[\varepsilon - 398,942 \left(\frac{\mathcal{F}}{\sqrt{t}} \right) \right] \right\}. \quad (6.30)$$

Com os coeficientes de acordo com o formato da Eq. (3.19), dados por

$$a_N = 0, \quad (6.31)$$

$$a_S = \frac{\mathcal{B}_P^{CN} \Delta t}{2 \Delta y}, \quad (6.32)$$

$$a_P = \mathcal{A}_P^{CN} + \frac{\mathcal{B}_P^{CN} \Delta t}{2 \Delta y} \quad (6.33)$$

e

$$b_P = \left(\mathcal{A}_P^{CN} - \frac{\mathcal{B}_P^{CN} \Delta t}{2 \Delta y} \right) T_P^j + \frac{\mathcal{B}_P^{CN} \Delta t}{2 \Delta y} T_S^j + \mathcal{S}_P^{CN} \Delta t. \quad (6.34)$$

No caso da Eq. (6.5), obtemos

$$\left(1 - \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{2\rho_\sigma} \right) U_P^{j+1} = \left(1 + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{2\rho_\sigma} \right) U_P^j - \alpha \left(\frac{R_P^{j+1} - R_S^{j+1} + R_P^j - R_S^j}{2} \right) + 0,6 \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma}. \quad (6.35)$$

6.2 ESQUEMA DE LEITH (LS)

O esquema de Leith (LEITH, 1965) considera as aproximações temporal e espacial para T , dadas respectivamente, por

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_P^{j+1} \approx \frac{T_P^{j+1} - T_P^j}{\Delta t} \quad (6.36)$$

e

$$\left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_P^{j+1} \approx \beta \left(\frac{T_P^j - T_S^j}{\Delta y} \right) + (1 - \beta) \left(\frac{T_N^j - T_S^j}{2\Delta y} \right), \quad (6.37)$$

com

$$\beta = \frac{\mathcal{B}_P^j \Delta t}{\mathcal{A}_P^j \Delta y}, \quad (6.38)$$

onde as Eqs. (6.2) e (6.3) representam, respectivamente, \mathcal{A} e \mathcal{B} que são explícitas, por isso o uso da notação j no lugar de θ no superíndice.

Portanto, discretizando as Eqs. (5.1) e (5.2) utilizando este esquema e inserindo um termo fonte S_P^θ para adequar-se à solução analítica proposta em Rigoni *et al.* (2022), obtemos, respectivamente

$$T_P^{j+1} = \left(\frac{1}{\Delta y} - \beta^2 \right) T_P^j + \frac{1}{2\Delta y} (\beta^2 + \beta) T_S^j + \frac{1}{2\Delta y} (\beta^2 - \beta) T_N^j + \mathcal{S}_P^j \frac{\Delta t}{\mathcal{A}_P^j} \quad (6.39)$$

e

$$U_P^{j+1} = \left(\frac{2\rho_\sigma + \frac{dm}{dt}\Delta t}{2\rho_\sigma - \frac{dm}{dt}\Delta t} \right) U_P^j + \gamma \left[-\alpha^2 R_P^j + \frac{1}{2}(\alpha^2 + \alpha) R_N^j + \frac{1}{2}(\alpha^2 - \alpha) R_S^j + \frac{0,6\Delta t}{\rho_\sigma} \frac{dm}{dt} \right], \quad (6.40)$$

sendo S_P^j dado pela Eq. (6.4), o parâmetro α determinado pela Eq. (6.6), e γ dado por

$$\gamma = \frac{2\rho_\sigma}{2\rho_\sigma - \frac{dm}{dt}\Delta t}. \quad (6.41)$$

Reescrevendo a Eq. (6.39) no formato da Eq. (3.19), temos

$$a_N = 0, \quad (6.42)$$

$$a_S = 0, \quad (6.43)$$

$$a_P = 1 \quad (6.44)$$

e

$$b_P = \left(\frac{1}{\Delta y} - \beta^2 \right) T_P^j + \frac{1}{2\Delta y} (\beta^2 + \beta) T_S^j + \frac{1}{2\Delta y} (\beta^2 - \beta) T_N^j + S_P^j \frac{\Delta t}{\mathcal{A}_P^j}. \quad (6.45)$$

É sabido que o esquema de Leith é um esquema de segunda ordem (LEITH, 1965). Nas aproximações de segunda ordem, utilizamos a viscosidade artificial para controlar as oscilações não físicas, acrescentando na Eq. (6.45) o termo η , dado por

$$\eta = \lambda \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[|T_N^j - T_P^j| (T_N^j - T_P^j) - |T_P^j - T_S^j| (T_P^j - T_S^j) \right], \quad (6.46)$$

em que λ é o fator de viscosidade, ajustável e adimensional.

Para as condições de contorno utilizaremos as condições dadas pelas Eqs. (6.53) e (6.54) apresentadas na Seção 6.3.

6.3 ESQUEMA DE DIFERENÇA CENTRAL (CDS)

Aproximando a derivada espacial de T utilizando CDS e a derivada temporal de T usando a formulação $\theta = 0,5$ (CN) e inserindo um termo fonte S_P^θ para adequar-se à solução analítica proposta em Rigoni *et al.* (2022), a forma discreta da Eq. (5.1) é dada por

$$T_P^{j+1} = T_P^j - \frac{\beta}{4} (T_N^{j+1} + T_N^j) + \frac{\beta}{4} (T_S^{j+1} + T_S^j) + \frac{\mathcal{S}^{CN}\Delta t}{\mathcal{A}_P^{CN}}, \quad (6.47)$$

onde \mathcal{A}_P^{CN} , \mathcal{S}_P^{CN} e β são definidas, respectivamente, pelas Eqs. (6.2), (6.4) e (6.38).

Os coeficientes obtidos são

$$a_N = -\frac{\beta}{4}, \quad (6.48)$$

$$a_S = \frac{\beta}{4}, \quad (6.49)$$

$$a_P = 1 \quad (6.50)$$

e

$$b_P = T_P^j + \frac{\beta}{4} (T_S^j - T_N^j) + \frac{S^{CN} \Delta t}{\mathcal{A}_P^{CN}}. \quad (6.51)$$

Como CDS-CN é uma aproximação de segunda ordem, podemos utilizar de forma análoga a Eq. (6.46) para controlar as oscilações não físicas da solução numérica.

Utilizando a aproximação para R , discretizando a Eq. (5.2), temos,

$$U_P^{j+1} = \left(\frac{2\rho_\sigma + \frac{dm}{dt} \Delta t}{2\rho_\sigma - \frac{dm}{dt} \Delta t} \right) U_P^j + \frac{\gamma}{4} \left[\alpha (R_S^{j+1} + R_S^j - R_N^{j+1} - R_N^j) + \frac{2,4\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} \right], \quad (6.52)$$

com α e γ , dados pelas Eqs. (6.6) e (6.41).

As condições de contorno de Neumann podem ser aproximadas usando CDS combinado com a técnica dos volumes fictícios (TANNEHILL *et al.*, 1997), assim a temperatura T e o teor de água da massa de grãos U em $y = L$ podem ser calculadas, respectivamente, por

$$T_{NC}^{j+1} = T_{NC}^j + S_P^j \frac{\Delta t}{\mathcal{A}_P^j} \quad (6.53)$$

e

$$U_{NC}^{j+1} = U_{NC}^j + \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma} U_{NC}^j + 0,6 \frac{\Delta t \frac{dm}{dt}}{\rho_\sigma}. \quad (6.54)$$

6.4 ALGORITMO DO PROCESSO DE AERAÇÃO

Apresentaremos nesta seção, o algoritmo para calcular a temperatura (T) e teor de água da massa de grãos (U). Neste caso, usamos o método LS; o algoritmo para as demais formulações possui estrutura análoga.

ALGORITMO 2 CÁLCULO DA TEMPERATURA E DO TEOR DE ÁGUA DA MASSA DE GRÃOS COM O MÉTODO LS

Entrada: $u_a, c_W, c_a, Q_r, \varepsilon, \rho_\sigma, c_\sigma, A, B, C, u_r, U_i, P_{atm}, T_B, T_I, L, t_f, N_y, N_t$

Calcular: Δy (Eq. (3.5)) e Δt (Eq. (3.6))

Inicializar: $T(1 : N_y, 1 : N_t), U(1 : N_y, 1 : N_t), R(1 : N_y, 1 : N_t)$ e $j \leftarrow 1$

for $i = 1 : N_y$ **do**

$T(i, j) = T_I$ (Eq. (5.13)) e $U(i, j) = U_I$ (Eq. (5.14))

end for

for $i = 1 : N_y$ **do**

Calcular: a pressão de vapor de saturação (p_s) (Eq. (5.10))

Calcular: o teor de água de equilíbrio (r_u) (Eq. (5.11))

Calcular: a razão de mistura inicial $R(i, j)$ (Eq. (5.9))

end for

for $j = 2 : N_t$ **do**

for $i = 1 : N_y$ **do**

if ($i = 1$) **then**

Calcular: a densidade do ar (ρ_a) (Eq. (5.12))

Calcular: a umidade relativa do ar de aeração (r_a) (Eq. (5.17))

Calcular: a pressão de vapor de saturação (p_{sa}) (Eq. (5.10))

Calcular: a razão de mistura em $y = 0$ ($R(1, j)$) (Eq. (5.9))

Calcular: o teor de água em $y = 0$ ($U(1, j)$) (Eq. (5.16))

Calcular: a temperatura em $y = 0$ ($T(1, j)$) (Eq. (5.15))

end if

for $i = 2 : N_y - 1$ **do**

Calcular: a derivada da perda de matéria seca em relação ao tempo ($\frac{dm}{dt}$) (Eq. (5.3))

Calcular: a pressão de vapor de saturação (p_s) (Eq. (5.10))

Calcular: o teor de água de equilíbrio (r_u) (Eq. (5.11))

Calcular: a razão de mistura ($R(i, j)$) (Eq. (5.9))

Calcular: o teor de água ($U(i, j)$) (Eq. (6.40))

Calcular: a derivada da perda de matéria seca em relação ao tempo ($\frac{dm}{dt}$) (Eq. (5.3))

Calcular: entalpia específica de vaporização da água (h_φ) (Eq. (5.8))

Calcular: a derivada da entalpia de vaporização da água em relação a temperatura ($\frac{\partial h_\varphi}{\partial T}$) (Eq. (5.8))

Calcular: a entalpia diferencial de sorção h_s (Eq. (5.7))

Calcular: a temperatura ($T(i, j)$) (Eq. (6.39))

end for

if ($i = N_y$) **then**

Calcular: a pressão de vapor de saturação em $y = L$ (p_s) (Eq. (5.10))

Calcular: o teor de água de equilíbrio em $y = L$ (r_u) (Eq. (5.11))

Calcular: a razão de mistura em $y = L$ ($R(N_y, j)$) (Eq. (5.9))

Calcular: o teor de água em $y = L$ ($U(N_y, j)$) (Eq. (6.54))

Calcular: a derivada da perda de matéria seca em relação ao tempo em $y = L$ ($\frac{dm}{dt}$) (Eq. (5.3))

Calcular: entalpia específica de vaporização da água em $y = L$ (h_φ) (Eq. (5.8))

Calcular: entalpia diferencial de sorção em $y = L$ h_s (Eq. (5.7))

Calcular: a temperatura em $y = L$ ($T(N_y, j)$) (Eq. (6.53))

end if

end for

end for

7 RESULTADOS

Neste capítulo apresentaremos os resultados desta tese. Inicialmente, na Seção 7.1, mostraremos os resultados numéricos com a solução analítica fabricada. Na Seção 7.2 faremos uma comparação entre o MDF e MVF. Posteriormente, na Seção 7.3, seguimos com uma verificação do código usando as ordens efetivas. A seguir, teremos a influência da razão espaço-tempo no modelo com seus respectivos resultados na Seção 7.4. Na Seção 7.5, mostraremos o esforço computacional dos códigos utilizados. Finalmente, nas Seções 7.6 e 7.7, apresentaremos, respectivamente, os resultados com a Múltipla Extrapolação de Richardson (MER) e a efetividade dos estimadores.

7.1 RESULTADOS NUMÉRICOS COM SOLUÇÃO ANALÍTICA FABRICADA

Os resultados foram obtidos utilizando um computador com processador Intel Core i7-2670QM com 12 GB de memória RAM (1344 MHz) e uma placa de vídeo Gt540m de 2GB. Para a compilação, utilizamos a IDE (*integrated development environment*) Microsoft Visual Studio Code v 1.76.1, programando os algoritmos em Fortran 90. Para a geração gráfica, o Python com a mesma IDE foi utilizado.

A princípio, as simulações foram realizadas para as temperaturas T_y com $y = 0,25, 0,50$ e $0,75$ correspondendo às alturas do silo em metros, com $t_f = 3600s$. Os resultados das simulações foram comparadas com a solução analítica fabricada (RIGONI *et al.*, 2022) para o modelo proposto por Thorpe (2001a), apresentada na Seção 5.3, dada por

$$\hat{T}(y, t) = T_I + \frac{1}{2}(T_B - T_I) \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{y - 2,2 \times 10^{-4}t}{\sqrt{8 \times 10^{-6}t}}\right) + \exp\left(\frac{2,2 \times 10^{-4}y}{8 \times 10^{-6}}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{y + 2,2 \times 10^{-4}t}{\sqrt{8 \times 10^{-6}t}}\right) \right], \quad (7.1)$$

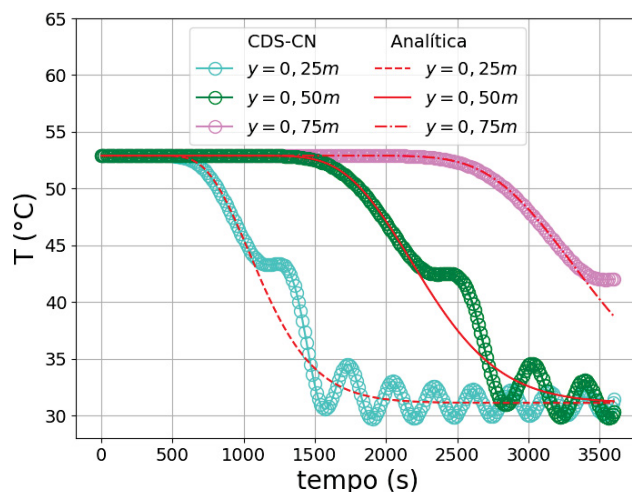
onde erfc representa a função erro complementar (VAN GENUCHTEN *et al.*, 1982), definida por

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt. \quad (7.2)$$

As Figs. 14 e 15, representam uma comparação da solução fabricada (analítica) com sua simulação numérica aplicando, respectivamente as aproximações de segunda ordem CDS-CN e LS sem usar o fator de viscosidade artificial para $N_y = 128$ e $N_t = 512$ discretizada pelo MVF.

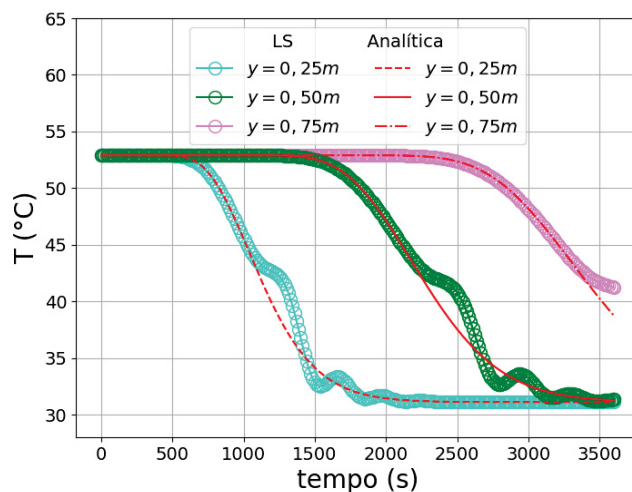
Como podemos notar, as aproximações de segunda ordem apresentam oscilações não físicas comparadas com a solução analítica. Para evitar tais oscilações foi aplicada a viscosidade artificial, conforme Rigoni *et al.* (2022).

FIGURA 14 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO SEM O FATOR DE VISCO-SIDADE ARTIFICIAL PARA CDS-CN.



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 15 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO SEM O FATOR DE VISCO-SIDADE ARTIFICIAL PARA LS.

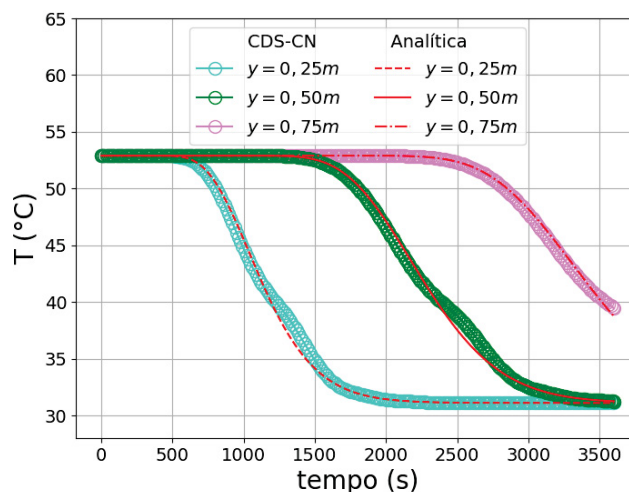


FONTE: O autor (2023).

Utilizar a viscosidade artificial significa acrescentar o termo dado pela Eq. (6.46) nos termos independentes b_p para ambas as aproximações de segunda ordem (CDS-CN e LS), ajustando o parâmetro adimensional λ para reduzir ao máximo os efeitos das oscilações não físicas nas simulações numéricas.

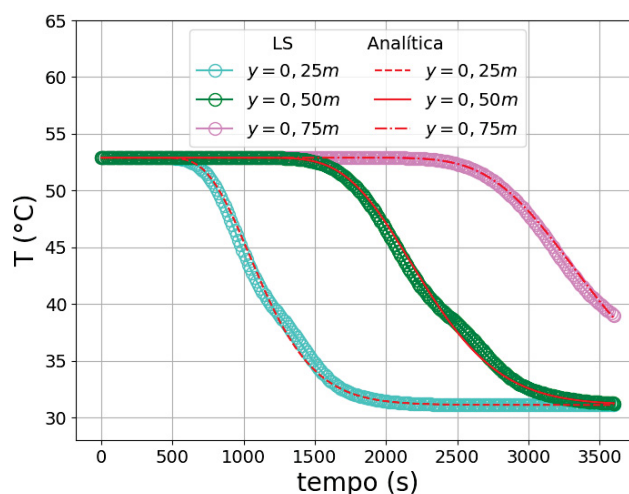
As Figs. 16 e 17 representam o mesmo processo de aeração anterior quando utilizamos a viscosidade artificial, respectivamente para CDS-CN e LS com $\lambda = 6,3E - 5$ e $\lambda = 1,7E - 5$. Neste caso, utilizamos MVF e malha $N_y = 128$ e $N_t = 512$.

FIGURA 16 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO COM O FATOR DE VISCO-SIDADE ARTIFICIAL PARA CDS-CN.



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 17 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO COM O FATOR DE VISCO-SIDADE ARTIFICIAL PARA LS.



FONTE: O autor (2023).

Assim como para o MDF em Rigoni *et al.* (2022), verificamos que para o MVF, o uso da viscosidade artificial reduz consideravelmente as oscilações para as aproximações de segunda ordem estudadas. Vale ressaltar que os valores do fator de viscosidade (λ) são diferentes para cada aproximação de segunda ordem, e determiná-los é trabalhoso. Normalmente para reduzir o tempo de simulação na busca do melhor do fator de viscosidade, utilizamos malhas mais grossas.

7.2 COMPARAÇÃO ENTRE MDF E MVF

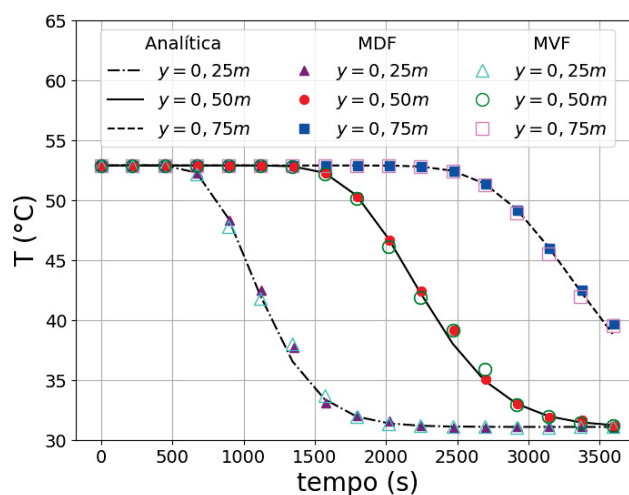
Nesta seção mostraremos os resultados da simulação numérica discretizada pelo MVF e MDF comparando com os dados com a solução analítica. A discretização do MVF foi apresentada na Seção 3.2. Para verificar a forma discretizada pelo MDF, consulte as referências Lopes *et al.* (2006), Radtke (2009), Kwiatkowski Jr. (2011) e Rigoni *et al.* (2021, 2022).

As figuras a seguir farão uso do erro no eixo das abscissas. Tal valor é calculado fazendo-se uso da norma infinito do erro ($\| E \|_{\infty}$) para ambos os métodos (MVF e MDF) e para todas as possíveis combinações de discretização. Esse erro é a diferença entre a solução analítica e numérica, ou seja, $| E | = | \Phi - \phi |$.

As Figs. 18 a 27 mostram as soluções fabricadas (analítica), as soluções numéricas e seus erros para os métodos CDS-CN, LS (métodos de segunda ordem), UDS-CN, UDS-Explícito e UDS-Implícito (métodos de primeira ordem), apresentadas para a malha $N_y = 128$ e $N_t = 256$ (desconsiderando os volumes fictícios). Note que esta malha tem a razão espaço-tempo $\tau = 2$. A malha adotada para este experimento é considerada uma malha intermediária do ponto de vista de número total de volumes, dado que para outros experimentos (mais adiante), com a mesma razão espaço-tempo, as malhas utilizadas foram de $N_y = 8$ e $N_t = 16$ a $N_y = 4096$ e $N_t = 8192$.

A Fig. 18 apresenta o processo de aeração para diferentes alturas (ou camadas): $y = 0,25m$, $y = 0,50m$ e $y = 0,75m$, discretizado com MVF e MDF e com CDS-CN.

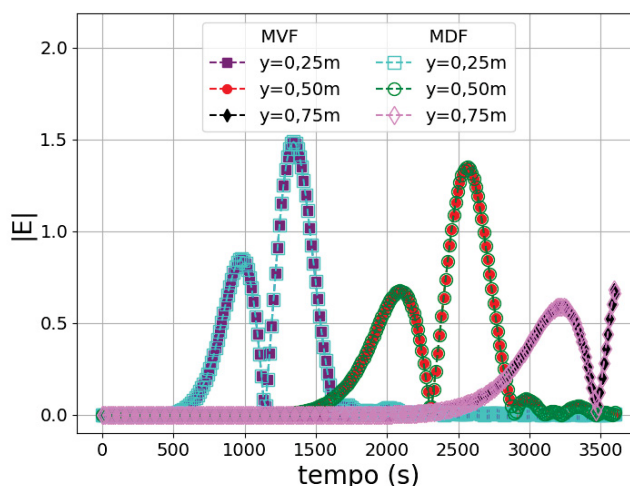
FIGURA 18 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO PARA DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM CDS-CN PELO MVF E MDF.



FONTE: O autor (2023).

A Fig. 19 evidencia o erro absoluto entre a solução numérica e analítica e o MVF e MDF. Verificamos que, o erro máximo para a aproximação CDS-CN, está abaixo de $1,60^{\circ}C$ para $y = 0,25m$, abaixo de $1,30^{\circ}C$ para $y = 0,50m$ e abaixo de $0,80^{\circ}C$ para $y = 0,75m$. Notamos que, como o processo de aeração atinge o tempo de $3600s$, a última camada analisada não está completamente resfriada. Isto não se deve à velocidade do ar de aeração, mas sim pelo fato de que se está adotando uma solução analítica proposta (RIGONI *et al.*, 2021, 2022), que é baseada e comparada com os dados experimentais de um mini-silo (OLIVEIRA *et al.*, 2007).

FIGURA 19 – ERRO EM DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM CDS-CN PELO MVF E MDF.



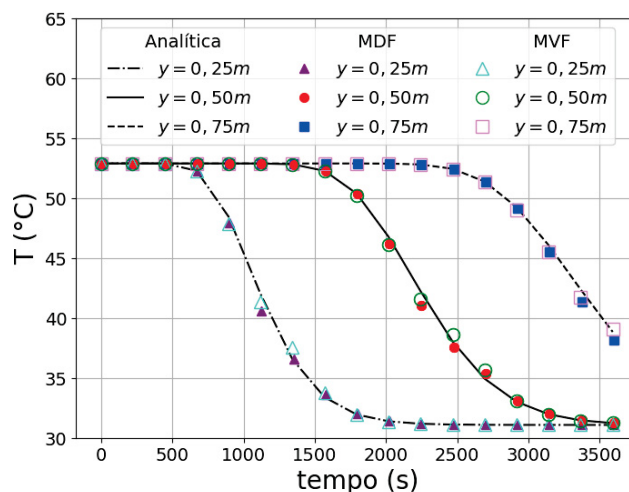
FONTE: O autor (2023).

A Fig. 20 apresenta as comparações para a aproximação de segunda ordem LS pelo MVF e MDF nas alturas estudadas. A Fig. 21 representa o erro absoluto entre a solução analítica e a solução numérica para os dois métodos estudados, ou seja, o MVF e o MDF.

Na Fig. 21, o valor máximo do erro está abaixo de $1,10^{\circ}C$ para $y = 0,25m$ em dois pontos de simulação, um pouco abaixo de $1,00^{\circ}C$ para $y = 0,50m$ e está próximo de $0,8^{\circ}C$ para $y = 0,75m$.

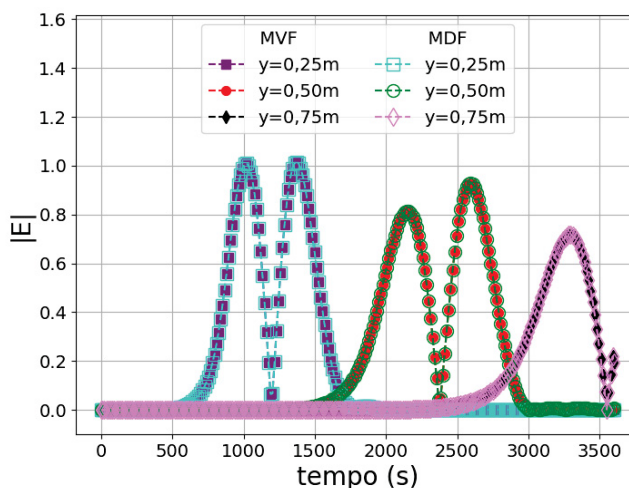
Comparando os erros das aproximações CDS-CN (Fig. 19) e LS (Fig. 21), eles são relativamente menores para o LS em ambas as camadas, $y = 0,25m$ e $y = 0,50m$ tanto para o MVF quanto para o MDF. Porém, para $y = 0,75m$ o ar de aeração não resfriou totalmente a massa de grãos, portanto não podemos garantir diferenças de temperaturas menores para o LS. No que diz respeito ao MDF, estes resultados confirmam os resultados apresentados por Rigoni *et al.* (2022).

FIGURA 20 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO PARA DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM LS PELO MVF E MDF.



FONTE: O autor (2023).

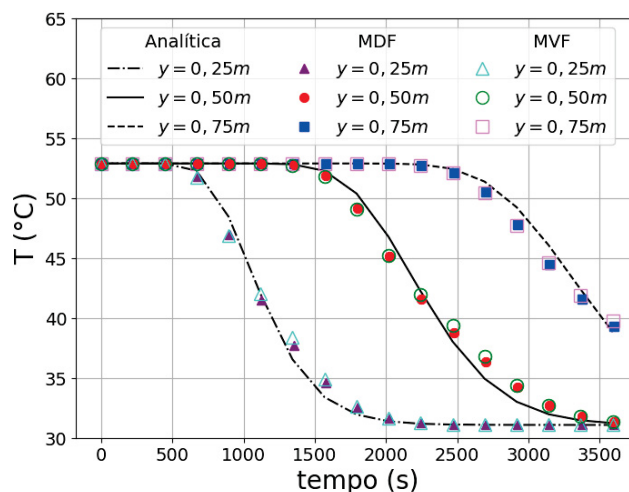
FIGURA 21 – ERRO EM DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM LS PELO MVF E MDF.



FONTE: O autor (2023).

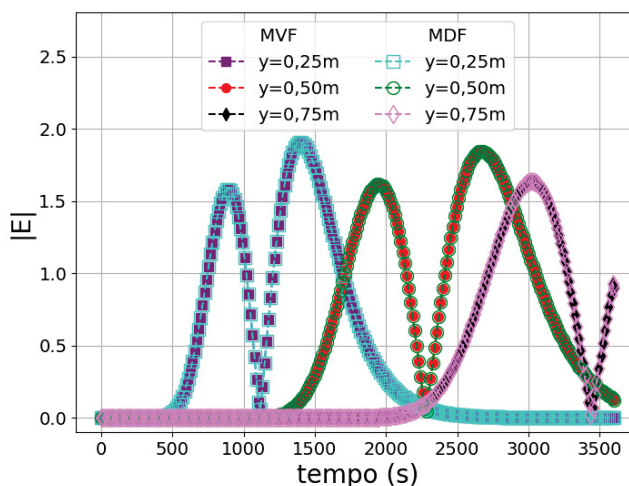
A Fig. 22 mostra a primeira comparação entre o MVF e o MDF para uma aproximação de primeira ordem. A Fig. 23 apresenta o erro absoluto para ambos os métodos com relação à solução analítica. Obtendo um erro máximo próximo de $1,90^{\circ}C$ para $y = 0,25m$, aproximadamente $1,85^{\circ}C$ para $y = 0,50m$ e de $1,17^{\circ}C$ para a altura $y = 0,75m$. Notamos, que os erros absolutos apresentados tanto para o MVF quanto para o MDF na aproximação UDS-CN, apresentaram erros máximos maiores que os apresentados nas aproximações de segunda ordem.

FIGURA 22 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO PARA DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM UDS-CN PELO MVF E MDF.



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 23 – ERRO EM DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM UDS-CN PELO MVF E MDF.

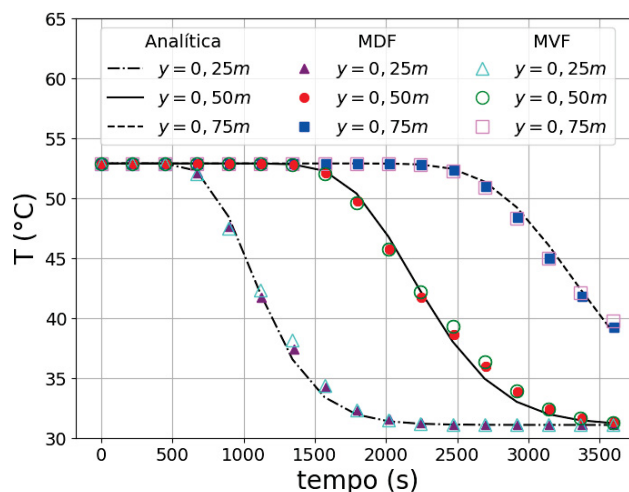


FONTE: O autor (2023).

A Fig. 24 representa o processo de aeração com os MVF e MDF, para as três camadas ($y = 0,25m$, $y = 0,50m$ e $y = 0,75m$), utilizando a aproximação UDS-Explícito.

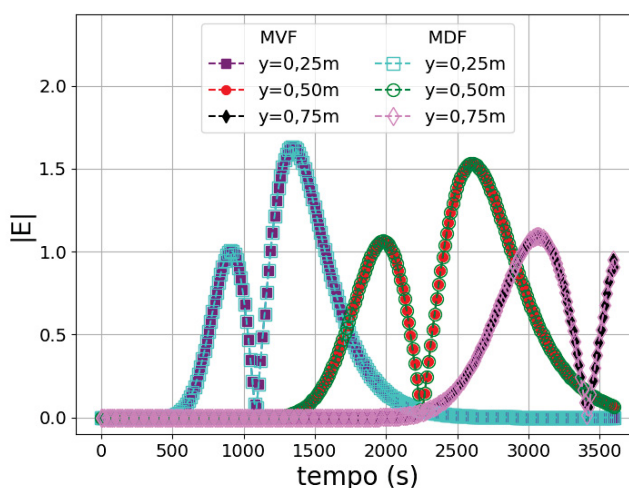
Na Fig. 25 temos os erros absolutos para ambos os métodos nas diferentes alturas estudadas. O UDS-Explícito é a aproximação mais utilizada na literatura para a simulação do processo de aeração da massa de grãos através do modelo proposto por Thorpe (2001b) discretizado com o MDF. Observamos na Fig. 25, que o erro máximo é $1,63^{\circ}C$ para $y = 0,25m$, acima de $1,53^{\circ}C$ em $y = 0,50m$ e para $y = 0,75m$, o erro máximo está próximo de $1,09^{\circ}C$.

FIGURA 24 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO PARA DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM UDS-EXPLÍCITO PELO MVF E MDF.



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 25 – ERRO EM DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM UDS-EXPLÍCITO PELO MVF E MDF.

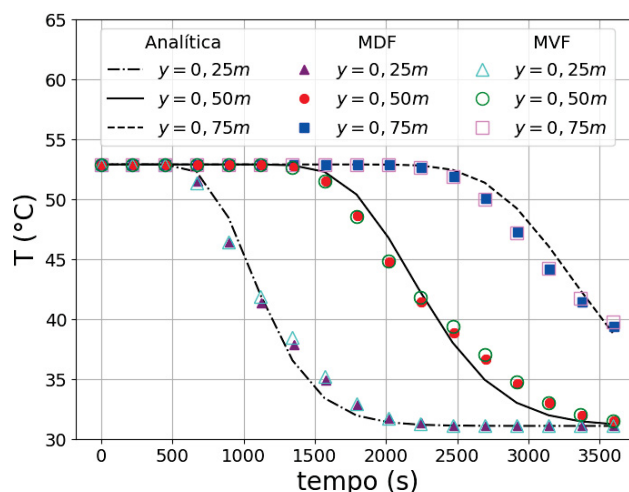


FONTE: O autor (2023).

Comparando o valor máximo dos erros para a aproximação UDS-Explícito dado pela Fig. 25 com a aproximação UDS-CN representado pela Fig. 23, ambos de primeira ordem, verificamos que o UDS-Explícito é melhor que o UDS-CN e também melhor que o UDS-Implicito (também método de primeira ordem) que pode ser visto na Fig. 27. Contudo, o UDS-Explícito não se sobressai em relação aos métodos de segunda ordem CDS-CN (Fig. 19) e LS (Fig. 21), já confirmado para o MDF (RIGONI *et al.*, 2022) e agora comprovado para o MVF.

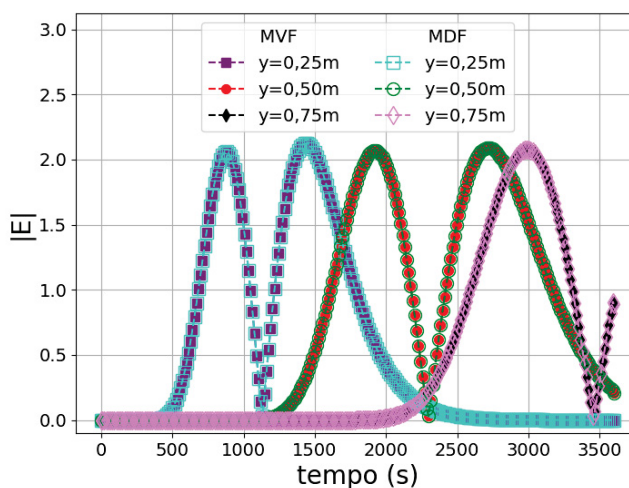
Na Fig. 26 representamos o processo de aeração para diferentes alturas (camadas), discretizado com a aproximação UDS-Implícito pelo MVF e MDF; e na Fig. 27, o erro absoluto para tais aproximações.

FIGURA 26 – REPRESENTAÇÃO DO PROCESSO DE AERAÇÃO PARA DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM UDS-IMPLÍCITO PELO MVF E MDF.



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 27 – ERRO EM DIFERENTES ALTURAS, DISCRETIZADO COM UDS-IMPLÍCITO PELO MVF E MDF.



FONTE: O autor (2023).

Observamos na Fig. 27 que os valores máximos dos erros são próximos de $2,12^{\circ}C$, $2,09^{\circ}C$ e $2,07^{\circ}C$, respectivamente, para as alturas $y = 0,25m$, $y = 0,50m$ e $y = 0,75m$. Portanto, para a malha em análise e para as demais malhas o UDS-Explícito é a melhor aproximação de primeira ordem.

Entre o UDS-Explícito (melhor método de primeira ordem) e o LS (melhor método de segunda ordem), o LS apresentou o menor erro tanto para o MVF como para o MDF. Tal fato já tinha sido relatado por Rigoni *et al.* (2022) para o MDF, e agora, comprovando para o MVF.

A seguir realizamos simulações variando o número de volumes (N) para as aproximações utilizadas conforme Tab. 6.

TABELA 6 – NÚMERO DE INCÓGNITAS E VALORES DE REFINO ESPACIAL PARA $\tau = 2$.

N_y	N_t	N	$h = \frac{1}{N_y}$
8	16	128	0,12500E+00
16	32	512	0,62500E-01
32	64	2048	0,31250E-01
64	128	8192	0,15625E-01
128	256	32768	0,78125E-02
256	512	131072	0,39062E-02
512	1024	524288	0,19531E-02
1024	2048	2097152	0,97656E-03
2048	4096	8388608	0,48828E-03
4096	8192	33554432	0,24414E-03

FONTE: O autor (2023).

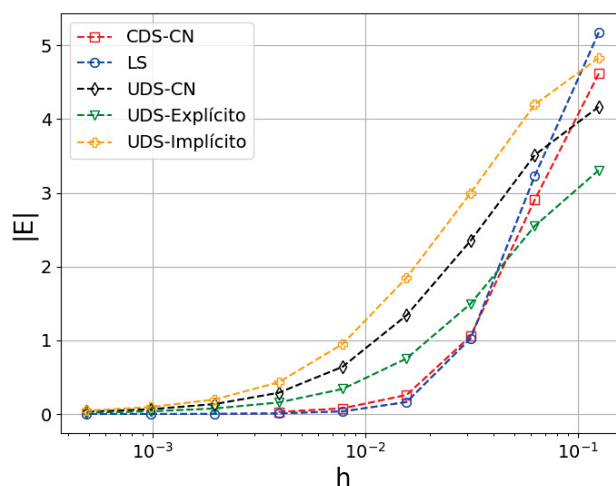
As Figs. 28 e 29 apresentam o decaimento do erro, respectivamente pelo MDF e MVF, *versus* o refino da malha, utilizando uma malha temporal duas vezes a malha espacial, ou seja, $\tau = 2$, no ponto $T(t,y)$ com $t = 1800s$ e $y = 0,50m$, para todas as aproximações.

Podemos observar nas Figs. 28 e 29, que na malha mais grosseira, $N_y = 8$ e $N_t = 16$, a aproximação LS tem um desempenho inferior às demais aproximações utilizadas para discretização tanto para o MDF como para o MVF. Observamos que o MVF apresentou um erro inferior ao MDF. O método CDS-CN na malha grossa também é melhor para o MVF em relação ao MDF, mas com uma diferença reduzida. Em relação aos métodos de primeira ordem, o UDS-Explícito apresenta um desempenho melhor na malha mais grossa comparado ao UDS-CN e ao UDS-Implícito, tanto no MDF quanto no MVF. Assim como os métodos de segunda ordem, os de primeira ordem também apresentam erros menores na malha grossa para MVF.

Vale destacar que o ponto escolhido $T(t,y)$ com $t = 1800s$ e $y = 0,50m$, será utilizado em todo nosso trabalho. Isso se deve ao fato do ponto estar localizado no centro espacial da massa de grãos, portanto, não recebe uma quantidade elevada de ar de aeração para os grãos da base do silo e não tão pouco se comparado aos grãos do topo do silo, onde o ar que proporciona a aeração é baixo com o passar do tempo. Um raciocínio análogo pode ser feito com relação ao ponto de análise estar no centro

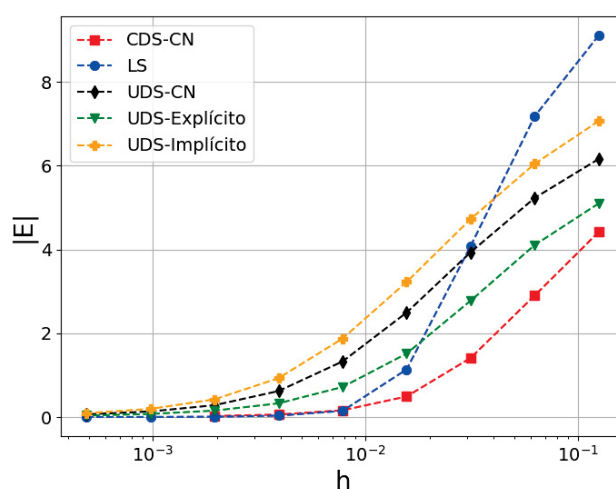
temporal do processo de aeração. Assim, poderemos efetuar uma análise apropriada no tempo e no espaço.

FIGURA 28 – DECAIMENTO DO ERRO ABSOLUTO *VERSUS* O REFINO DA MALHA NAS APROXIMAÇÕES ESTUDADAS DISCRETIZADAS PELO MDF COM $\tau = 2$, $t = 1800s$ E $y = 0,50m$.



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 29 – DECAIMENTO DO ERRO ABSOLUTO *VERSUS* O REFINO DA MALHA NAS APROXIMAÇÕES ESTUDADAS DISCRETIZADAS PELO MVF COM $\tau = 2$, $t = 1800s$ E $y = 0,50m$.

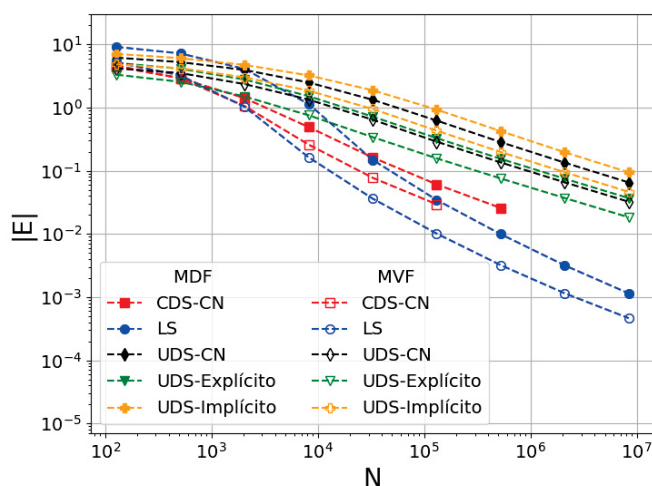


FONTE: O autor (2023).

A Fig. 30 representa o decaimento do erro *versus* o número de variáveis para as aproximações estudadas no ponto analisado. Observando na Fig. 30 que aumentando o número de incógnitas, ou seja, refinando a malha, o desempenho do MVF é melhor

do que o MDF. Notamos ainda que as aproximações menos eficazes são UDS-Implicito e UDS-CN. Já CDS-CN divergiu para malhas muito refinadas.

FIGURA 30 – DECAIMENTO DO ERRO ABSOLUTO *VERSUS* NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES ESTUDADOS DISCRETIZADAS PELOS MDF E MVF COM $\tau = 2$, $t = 1800s$ E $y = 0,50m$



FONTE: O autor (2023).

Apresentamos na Tab. 7, os resultados da $\|E\|_2$ para todas as aproximações utilizadas nas discretizações em todas as malhas com $\tau = 2$, $t = 1800s$ e $y = 0,50m$.

TABELA 7 – NORMA 2 DO ERRO PARA MDF E MVF.

Método	MDF	MVF
CDS-CN	5,498E+00	2,708E-01
LS	1,235E+01	6,188E+00
UDS-CN	9,450E+00	6,128E+00
UDS-Explícito	7,319E+00	4,516E+00
UDS-Implicito	1,113E+01	7,383E+00

FONTE: O autor (2023).

Como podemos notar, o MVF obteve valores menores de $\|E\|_2$, tendo como menor valor para CDS-CN. Entretanto, tal valor deve ser desconsiderado em comparação com os demais métodos, pois este método tem quantidade de discretizações menor que os demais devido a algumas malhas terem divergido, e isto afeta o resultado final da norma. Dessa forma, a menor norma está com UDS-Explícito. Portanto, expusemos nesta seção que o MVF apresentou melhor desempenho do que o MDF, logo abordaremos deste ponto adiante somente o MVF em nosso trabalho.

7.3 VERIFICAÇÃO DAS ORDENS EFETIVAS

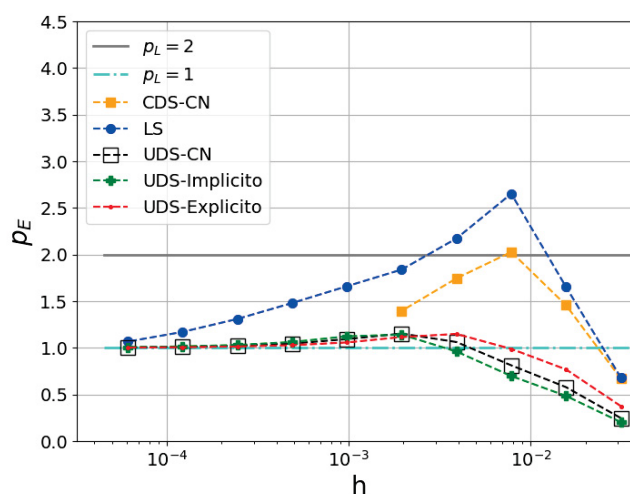
Na Seção 3.1 apresentamos as formulações e teoria sobre a ordem efetiva do erro de discretização, que se trata de um teste *a posteriori*, para estimarmos a ordem assintótica do método, quando temos uma solução analítica conhecida do modelo.

Com base nestas informações aplicamos a verificação da ordem efetiva para os métodos de primeira ordem (UDS-CN, UDS-Explícito e UDS-Implícito) e para os métodos de segunda ordem (CDS-CN e LS), efetuando a verificação para as diferentes razões espaço-tempo $\tau = 2, 4, 8, 16, 32$ e 64 , para $t = 1800s$ e $y = 0,50m$, conforme as Figs. 31 a 36.

Nas Figs. 31 a 36 foram aplicados os fatores da viscosidade artificial fixos, $\lambda = 6,3E-5$ e $\lambda = 1,7E-5$, respectivamente para CDS-CN e LS em todas as malhas. Os valores adimensionais dos fatores da viscosidade (λ) são escolhidos por verificações, substituindo o valor escolhido e posteriormente verificando se as oscilações foram suavizadas. Estes testes são efetuados normalmente em malhas grossas e fixado para todas as malhas, visto que o tempo computacional para malhas refinadas é elevado.

As Figs. 31 a 32 apresentam respectivamente, o comportamento das ordens efetivas para a razão espaço-tempo $\tau = 2$ e $\tau = 4$.

FIGURA 31 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM $\tau = 2$.

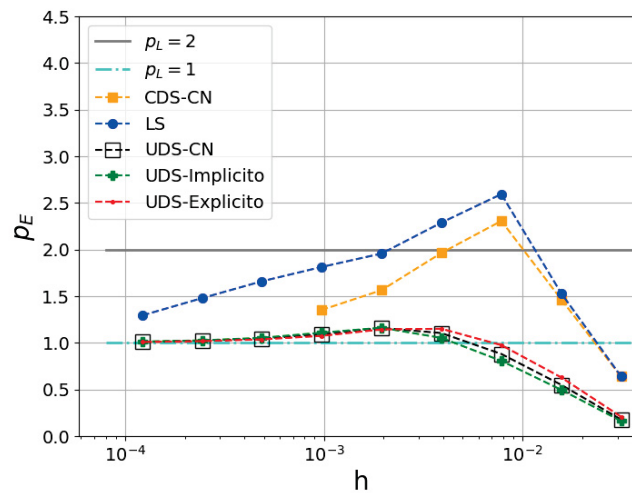


FONTE: O autor (2023).

Como podemos notar na Fig. 31, quando $\tau = 2$, as ordens efetivas relacionadas a cada método de aproximação numérica tende à ordem assintótica $p_L = 1$, tanto para os métodos de primeira ordem quanto para os de segunda ordem com o refino da malha. As aproximações de segunda ordem teoricamente deveriam tender para $p_L = 2$.

Contudo, observamos que na Fig. 32, quando $\tau = 4$, as ordens efetivas para CDS-CN e LS estão se distanciando de $p_L = 1$.

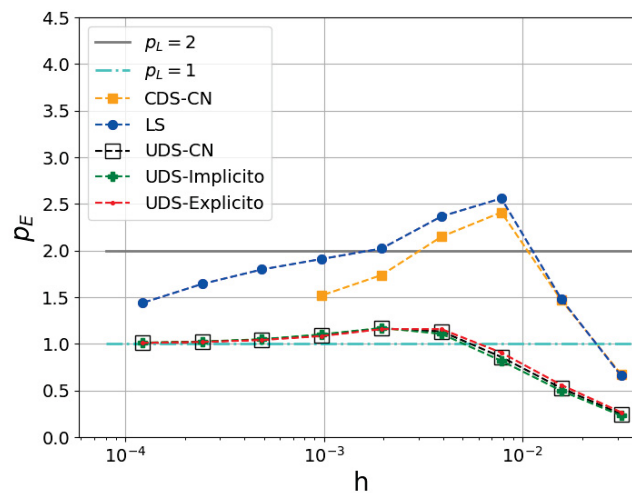
FIGURA 32 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM $\tau = 4$.



FONTE: O autor (2023).

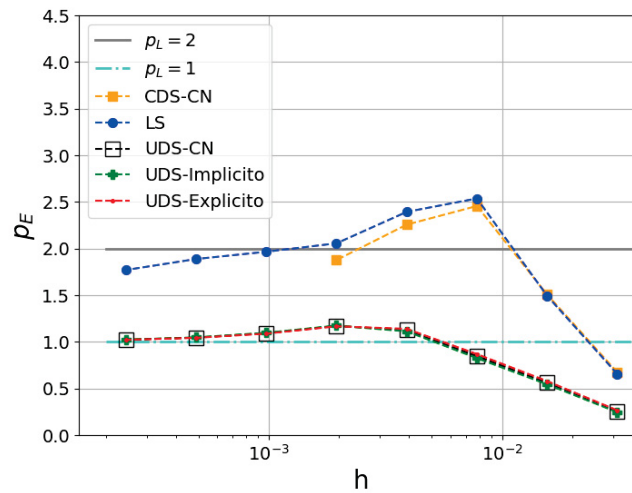
A Fig. 33 mostra o comportamento das ordens efetivas para a razão espaço-tempo $\tau = 8$, na Fig. 34 apresentamos o comportamento das ordens efetivas para $\tau = 16$.

FIGURA 33 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM $\tau = 8$.



FONTE: O autor (2023).

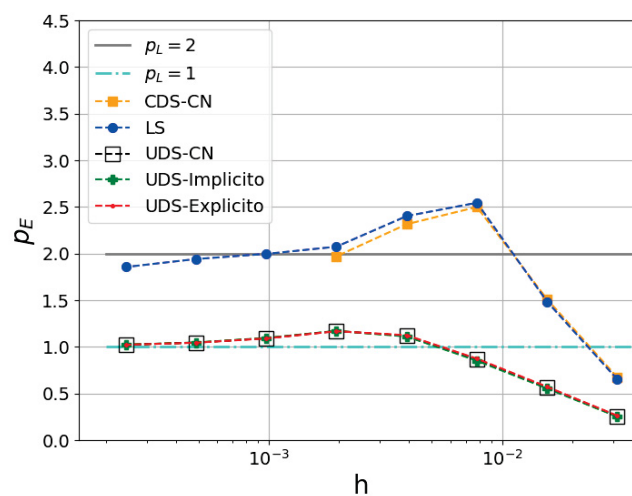
FIGURA 34 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM $\tau = 16$.



FONTE: O autor (2023).

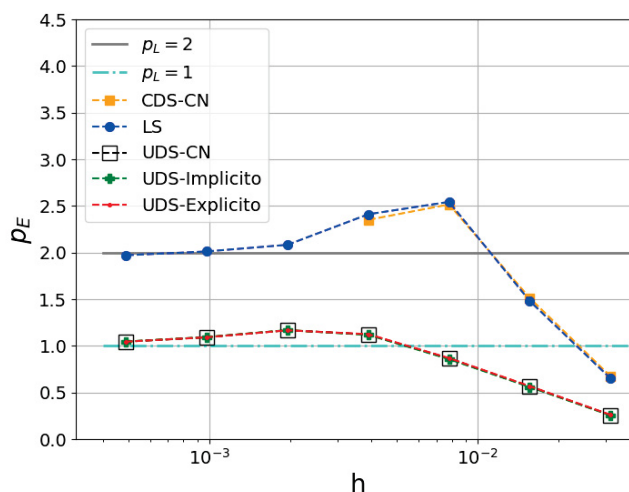
O distanciamento das ordens efetivas de $p_L = 1$ para as aproximações de segunda ordem é notado também quando $\tau = 8$ (Fig. 33), ficando ainda mais evidente na Fig. 34, quando $\tau = 16$. As ordens efetivas para $\tau = 32$ são observadas na Fig. 35 e finalmente representamos as ordens efetivas para $\tau = 64$ na Fig. 36.

FIGURA 35 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM $\tau = 32$.



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 36 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM $\tau = 64$.



FONTE: O autor (2023).

Também observamos que à medida que aumenta a razão espaço-tempo, as ordens efetivas dos métodos tendem às suas ordens assintóticas, ou seja, $p_L = 1$ para os métodos de primeira ordem (UDS-CN, UDS-Implícito e UDS-Explícito) e $p_L = 2$ para os métodos de segunda ordem (CDS-CN e LS). Tal fato ocorre somente para as aproximações de segunda ordem, pois é onde se aplica a viscosidade artificial.

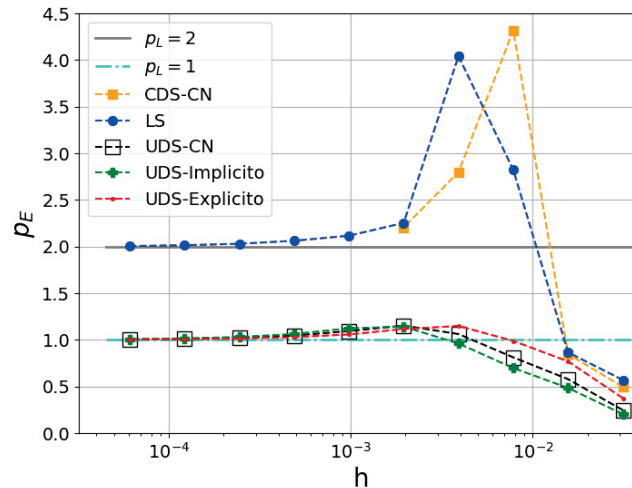
Para auxiliar na determinação da ordem efetiva, melhorar a convergência e não depender de um valor elevado para a razão espaço-tempo, em vez de manter fixo os valores do fator de viscosidade artificial para todas as malhas com a mesma razão espaço-tempo, variamos este fator de acordo com a relação 1/4 do erro começando na malha mais grossa com $\lambda = 5,0E - 5$ e $\lambda = 1,8E - 5$, respectivamente para CDS-CN e LS, assim, variando o fator de viscosidade para os métodos de segunda ordem. Devemos ressaltar que tal processo é empírico, portanto, trabalhoso e tem relação direta com o ponto estudado, $t = 1800s$ e $y = 0,50m$.

A Fig. 37, apresenta o comportamento das ordens efetivas das aproximações de primeira e segunda ordens, onde houve uma variação do fator de viscosidade artificial em relação ao refinamento da malha para os métodos de segunda ordem. Este teste foi realizado utilizando a razão espaço-tempo $\tau = 2$.

Observamos na Fig. 37 que o LS tendem à ordem assintótica em malhas não tão refinadas se comparado à Fig. 36, onde o fator de viscosidade artificial foi considerado fixo. Por outro lado, não podemos afirmar nada sobre o CDS-CN, devido ao problema de valores incoerentes já comentados. Mas, na última malha discretizada para o método CDS-CN, notamos que o valor de p_E está se aproximando de p_L . Portanto,

outros estudos são necessários para verificar tais fatos com relação ao CDS-CN.

FIGURA 37 – COMPORTAMENTO DAS ORDENS EFETIVAS DOS ERROS DE DISCRETIZAÇÃO COM $\tau = 2$ E VARIANDO O FATOR DE VISCOSIDADE λ .



FONTE: O autor (2023).

7.4 INFLUÊNCIA DA RAZÃO ESPAÇO-TEMPO

Na presente seção mostraremos a influência da razão espaço-tempo no modelo proposto para todas as aproximações estudadas, comparando inicialmente os métodos com o mesmo fator anisotrópico em relação ao decaimento do erro, e posteriormente, evidenciando o erro em relação ao número de variáveis para diversos fatores anisotrópicos.

Para efetuar as verificações, usaremos as normas $\|E\|_2$ e $\|E\|_\infty$ e o erro E .

A seguir a Tab. 8 mostra em sua primeira coluna, o número de volumes na direção vertical (N_y) e nas demais colunas, o número de volumes na direção temporal (N_t), para os diversos fatores anisotrópicos $\tau = 2, 4, 8, 16, 32$ e 64 , onde por exemplo $\tau = 2$ significa que o número de volumes da malha temporal (N_t) é duas vezes o número de volumes da malha espacial (N_y) e número de variáveis reais (sem contar volumes fictícios) é de $N = N_y \times N_t$.

TABELA 8 – NÚMERO DE VARIÁVEIS NAS MALHAS EM RELAÇÃO A RAZÃO ESPAÇO-TEMPO (τ).

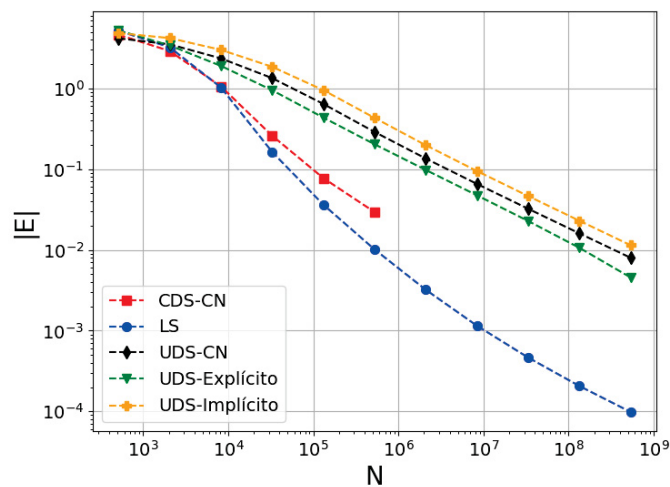
N_y	$N_t = \tau N_y$					
	$\tau = 2$	$\tau = 4$	$\tau = 8$	$\tau = 16$	$\tau = 32$	$\tau = 64$
8	16	32	64	128	256	512
16	32	64	128	256	512	1024
32	64	128	256	512	1024	2048
64	128	256	512	1024	2048	4096
128	256	512	1024	2048	4096	8192
256	512	1024	2048	4096	8192	16384
512	1024	2048	4096	8192	16384	32768
1024	2048	4096	8192	16384	32768	65536
2048	4096	8192	16384	32768	65536	131072
4096	8192	16384	32768	65536	131072	-
8192	16384	32768	65536	-	-	-
16384	32768	-	-	-	-	-

FONTE: O autor (2023).

7.4.1 Comparação entre os métodos empregando a mesma razão espaço-tempo

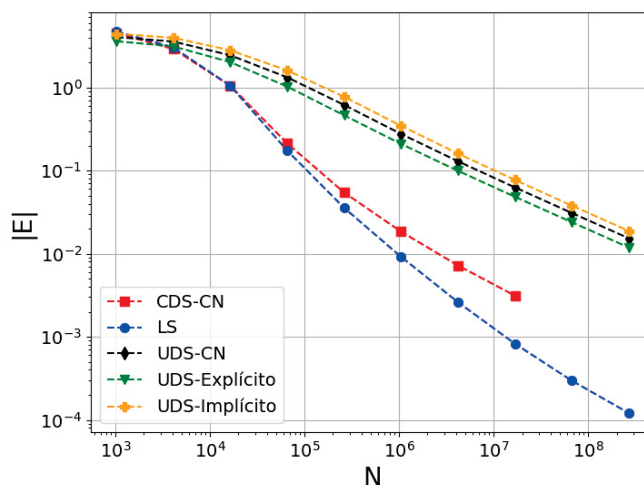
A seguir mostraremos as comparações entre o erro *versus* o número de variáveis para diferentes razões espaço-tempo (τ). Nas Fig. 38 e Fig. 39, apresentamos o decaimento do erro em relação ao número de variáveis, respectivamente para a razão espaço-tempo $\tau = 2$ e 4.

FIGURA 38 – DECAIMENTO DO ERRO *VERSUS* NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES DISCRETIZADAS PELO MVF COM $\tau = 2$.



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 39 – DECAIMENTO DO ERRO *VERSUS* NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES DISCRETIZADAS PELO MVF COM $\tau = 4$.



FONTE: O autor (2023).

Nesse sentido, observamos que inicialmente nas malhas mais grossas, o menor erro é do UDS-CN, tendo o maior erro a aproximação LS e o UDS-Explícito para $\tau = 2$ (Fig. 38). Para $\tau = 4$ o menor erro é para o UDS-Explícito e o maior continua sendo o erro do LS (Fig. 39). Entretanto, à medida que as malhas são refinadas, as aproximações de segunda ordem têm significativa vantagem com relação ao decaimento do erro sobre as aproximações de primeira ordem. Destacamos as aproximações de segunda ordem o LS e nos de primeira ordem o UDS-Explícito.

Além disso, apresentamos na Tab. 9, os valores de máximo e mínimo do erro, para cada aproximação abordada, para $\tau = 2$ e $\tau = 4$, corroborando respectivamente, com as Figs. 38 e 39.

TABELA 9 – NORMA INFINITA DO ERRO E O MENOR ERRO PARA AS APROXIMAÇÕES COM $\tau = 2$ E $\tau = 4$.

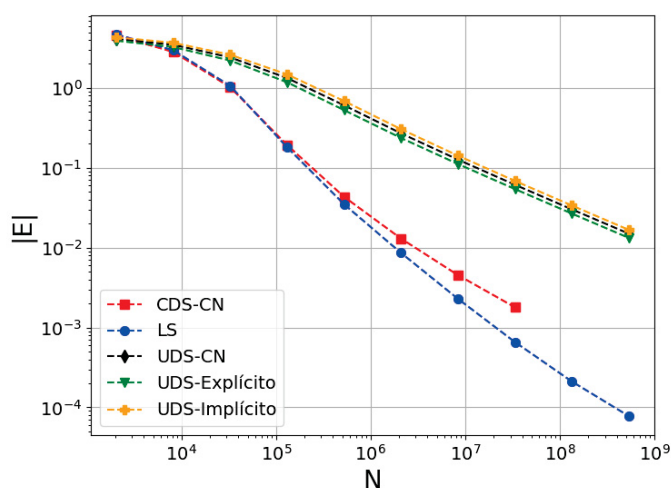
Método	$\tau = 2$		$\tau = 4$	
	Max	Min	Max	Min
LS	5,176E+00	9,829E-05	4,736E+00	1,208E-04
UDS-CN	4,167E+00	7,970E-03	4,047E+00	1,533E-02
UDS-Explícito	3,307E+00	4,548E-03	3,609E+00	1,188E-02
UDS-Implícito	4,831E+00	1,140E-02	4,436E+00	1,878E-02

FONTE: O autor (2023).

A Fig. 40 representa o decaimento do erro em relação ao número de variáveis,

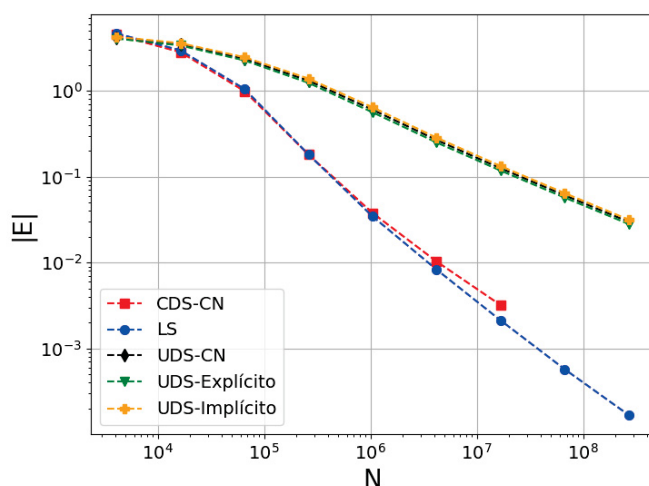
com a razão espaço-tempo $\tau = 8$ e a Fig. 41 representa o decaimento do erro em relação ao número de variáveis para $\tau = 16$.

FIGURA 40 – DECAIMENTO DO ERRO *VERSUS* NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES DISCRETIZADAS PELO MVF COM $\tau = 8$.



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 41 – DECAIMENTO DO ERRO *VERSUS* NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES DISCRETIZADAS PELO MVF COM $\tau = 16$.



FONTE: O autor (2023).

Notamos, nas Figs. 40 e 41, que o comportamento na malha mais grossa, novamente o menor erro é do UDS-Explícito e o maior erro é do LS em ambas as razões espaço-tempo. Outra observação importante, é que à medida que elevamos a

razão espaço-tempo, neste caso, $\tau = 8$ e $\tau = 16$, respectivamente, para as Figs. 40 a 41, os erros dos métodos de primeira ordem ficam mais próximos, indiferente da malha observada. Para os de segunda ordem, os erros são próximos apenas nas malhas mais grossas.

A Tab. 10 mostra os valores máximo e mínimo do erro. Observamos, assim, que o comportamento do decaimento do erro segue os padrões apresentados nas Figs. 40 e 41, isto é, o menor erro, na malha mais refinada é do LS, conforme a Tab. 10.

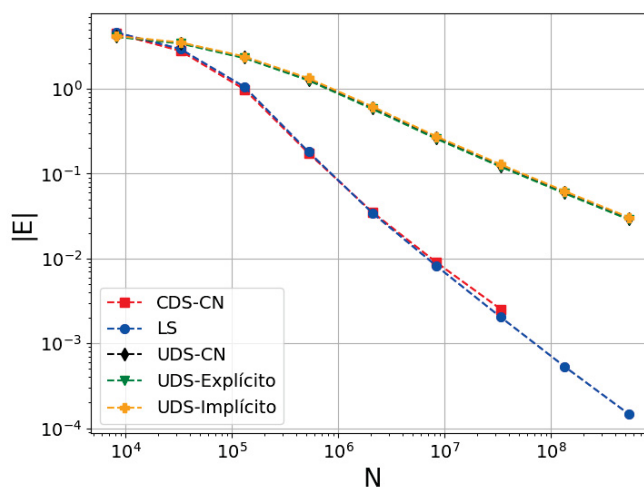
TABELA 10 – NORMA INFINITA DO ERRO E O MENOR ERRO PARA AS APROXIMAÇÕES COM $\tau = 8$ E $\tau = 16$.

Método	$\tau = 8$		$\tau = 16$	
	Max	Min	Max	Min
LS	4,683E+00	7,791E-05	4,653E+00	1,681E-04
UDS-CN	4,119E+00	1,500E-02	4,150E+00	2,989E-02
UDS-Explícito	3,910E+00	1,327E-02	4,051E+00	2,814E-02
UDS-Implícito	4,313E+00	1,672E-02	4,245E+00	3,164E-02

FONTE: O autor (2023).

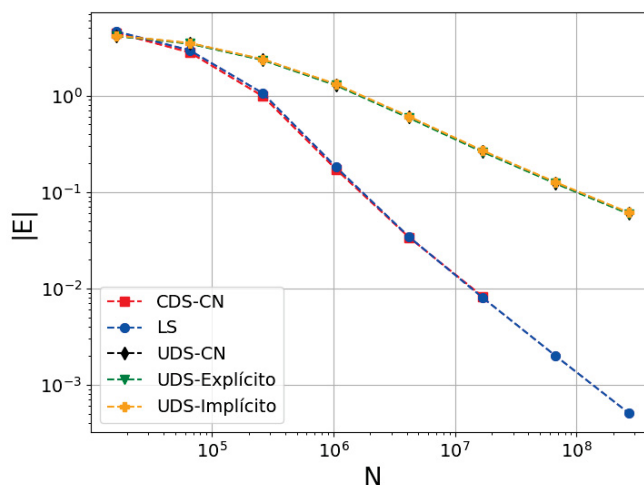
As Figs. 42 e 43, representam o decaimento do erro *versus* o número de incógnitas, respectivamente, com as razões espaço-tempo $\tau = 32$ e $\tau = 64$.

FIGURA 42 – DECAIMENTO DO ERRO *VERSUS* NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES DISCRETIZADAS PELO MVF COM $\tau = 32$.



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 43 – DECAIMENTO DO ERRO *VERSUS* NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES DISCRETIZADAS PELO MVF COM $\tau = 64$.



FONTE: O autor (2023).

Consequentemente, as Figs. 42 e 43 representam comportamentos semelhantes às Figs. 38 a 41, como podemos também verificar na Tab. 11, ressaltando que quanto maior a razão espaço-tempo, menor é a diferença entre os métodos de primeira ordem, UDS-CN, UDS-Explícito e UDS-Implícito.

Com relação aos métodos de segunda ordem CDS-CN e LS, o comportamento é semelhante, nas malhas grossas e nas intermediárias. Observamos na Fig. 43 que há pouca diferença no erro dos métodos. Nas malhas muito refinadas, em virtude da divergência do CDS-CN, não poderemos efetuar a análise.

TABELA 11 – NORMA INFINITO DO ERRO E O MENOR ERRO PARA AS APROXIMAÇÕES COM $\tau = 32$ E $\tau = 64$.

Método	$\tau = 32$		$\tau = 64$	
	Max	Min	Max	Min
LS	4,633E+00	1,466E-04	4,622E+00	5,091E-04
UDS-CN	4,156E+00	2,972E-02	4,157E+00	6,019E-02
UDS-Explícito	4,108E+00	2,884E-02	4,134E+00	5,930E-02
UDS-Implícito	4,203E+00	3,059E-02	4,181E+00	6,109E-02

FONTE: O autor (2023).

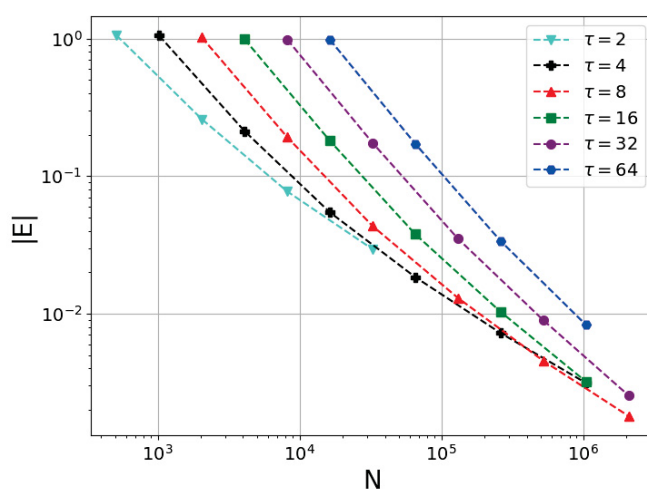
Portanto, concluímos que, indiferente da razão espaço-tempo, a aproximação LS é a que apresenta melhor decaimento do erro em relação às outras aproximações estudadas, com um adendo que, entre as aproximações de primeira ordem, destaca-se a aproximação UDS-Explícito. Por fim, verificamos que com o aumento do fator

anisotrópico, o erro diminui entre as aproximações de mesma ordem.

7.4.2 Comparação entre os métodos para cada razão espaço-tempo

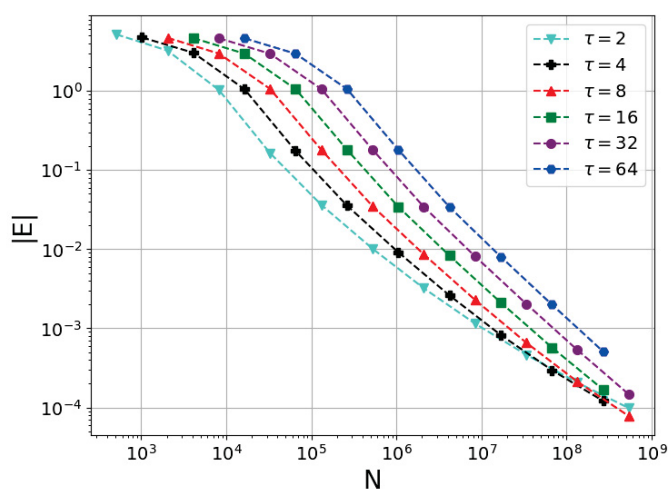
Esta seção apresenta o comportamento dos erros *versus* o número de incógnitas, para cada razão espaço-tempo, para todas as aproximações abordadas. As Figs. 44 e 45 apresentam, respectivamente, os erros para o CDS-CN e LS.

FIGURA 44 – COMPARAÇÃO DO ERRO *VERSUS* O NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA O CDS-CN DISCRETIZADO PELO MVF PARA DIVERSOS VALORES DE τ .



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 45 – COMPARAÇÃO DO ERRO *VERSUS* O NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA O LS DISCRETIZADO PELO MVF PARA DIVERSOS VALORES DE τ .

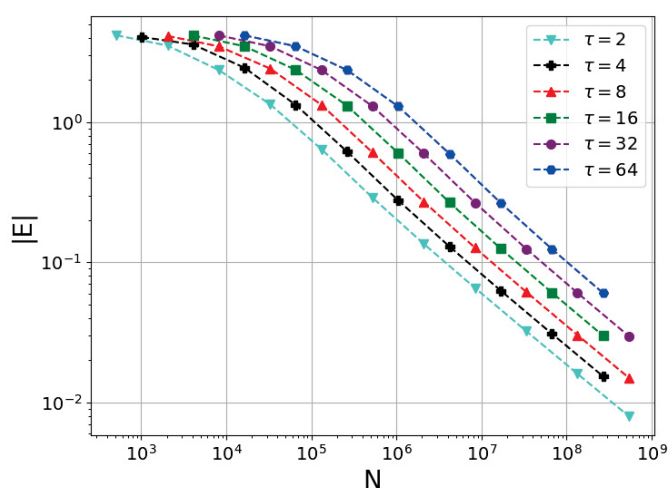


FONTE: O autor (2023).

Observamos nas Figs. 44 e 45 que o erro decai com o refinamento da malha. Mais do que isso, notamos que para as razões espaço-tempo maiores ($\tau = 64, 32$ e 16) o erro é maior se comparado às razões espaço-tempo menores ($\tau = 2, 4$ e 8) e que para as malhas mais refinadas e baixas razões espaço-tempo, ocorre uma pequena curvatura, desacelerando o decaimento do erro.

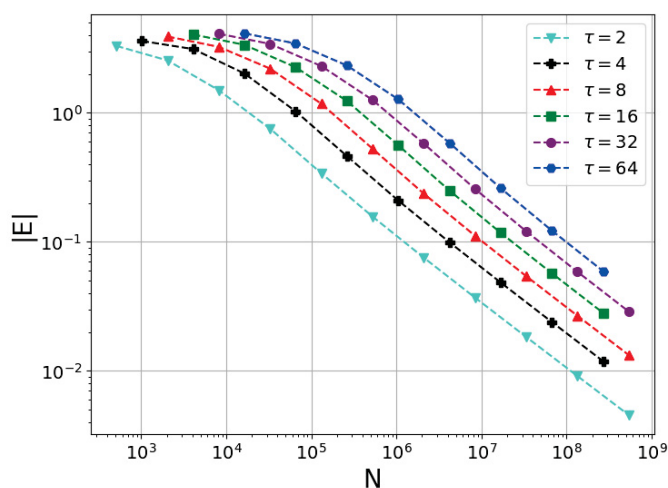
Nas Figs. 46, 47 e 48 apresentamos respectivamente, a comparação do erro *versus* o número de incógnitas, pelos métodos UDS-CN, UDS-Explícito e UDS-Explícito.

FIGURA 46 – COMPARAÇÃO DO ERRO *VERSUS* O NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA O UDS-CN DISCRETIZADO PELO MVF PARA DIVERSOS VALORES DE τ .



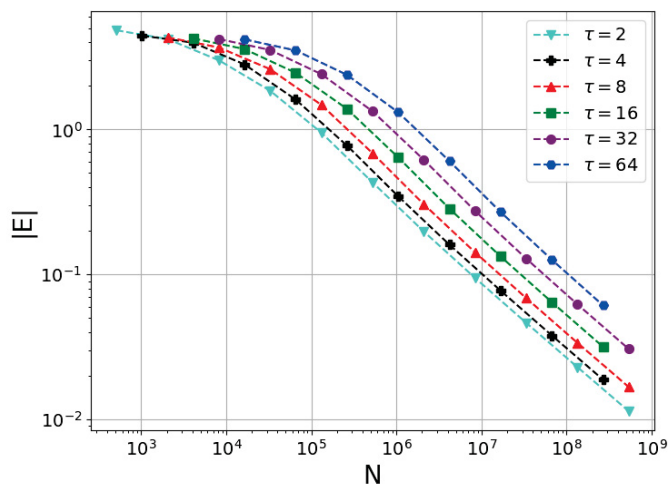
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 47 – COMPARAÇÃO DO ERRO *VERSUS* O NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA O UDS-EXPLÍCITO DISCRETIZADO PELO MVF PARA DIVERSOS VALORES DE τ .



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 48 – COMPARAÇÃO DO ERRO *VERSUS* O NÚMERO DE VARIÁVEIS PARA O UDS-IMPLÍCITO DISCRETIZADO PELO MVF PARA DIVERSOS VALORES DE τ .



FONTE: O autor (2023).

Notamos que o método UDS-CN (Fig. 46) expõem melhor resultado em relação ao número de variáveis na malha mais refinada para $\tau = 2$. Ainda, observamos que no método UDS-Explícito (Fig. 47), $\tau = 2$ é a que tem melhor resultado em relação ao decaimento *versus* o número de variáveis. Além disso, o UDS-Explícito é o melhor método entre os de primeira ordem. Do mesmo modo, para UDS-Implícito (Fig. 48) a razão espaço-tempo $\tau = 2$, é a que melhor representa o erro com relação ao número de variáveis.

Neste sentido, a Tab. 12 apresenta a norma 2, para as quatro aproximações estudadas. O CDS-CN não foi comparado, pois, para a norma analisada, tal método pode dar resultados incoerentes se comparado aos demais, pela quantidade de malhas abordadas.

TABELA 12 – NORMA 2 DO ERRO PARA AS APROXIMAÇÃO PARA DIVERSOS VALORES DE τ .

Método	$\tau = 2$	$\tau = 4$	$\tau = 8$	$\tau = 16$	$\tau = 32$	$\tau = 64$
LS	6,188	5,727	5,646	5,616	5,597	5,585
UDS-CN	6,128	6,114	6,087	6,088	6,088	6,087
UDS-Explícito	4,516	5,311	5,696	5,899	5,995	6,041
UDS-Implícito	7,383	6,828	6,454	6,271	6,179	6,132

FONTE: O autor (2023).

Assim, o melhor valor apresentado para a $\|E\|_2$ é o método UDS-Explícito, tendo o UDS-Implicito como pior caso, seguido do LS com $\tau = 2$. Isto não significa que LS seja a pior aproximação a ser utilizada, muito pelo contrário, como os resultados vêm mostrando, LS é o melhor método dos analisados com o refino da malha.

Contudo, o fato do LS ter o maior valor para a norma 2, está relacionado ao elevado erro numérico desse método nas malhas grossas, contaminando assim, os bons resultados apresentados para o LS. Ainda, observando a Tab. 12 notamos que com o aumento das razões espaço-tempo, o erro decai e temos o melhor caso para a aproximação LS seguido do UDS-Explícito, para $\tau = 64$. Outro fato importante, é que a medida que aumentamos a razão espaço-tempo, temos valores mais elevados para o UDS-Explícito.

7.5 O ESFORÇO COMPUTACIONAL

Uma das formas de se avaliar o esforço computacional de um método numérico é através da análise do comportamento dos tempos de execução (t , em segundos), ou tempo de *CPU*, em função do número de VC de cada malha (GONÇALVES, 2013), ou seja, analisar o efeito do número de incógnitas (N) sobre o tempo de CPU.

Segundo Pinto (2006), entende-se por tempo de CPU (t_{CPU}) o tempo gasto para realizar a geração de malhas, atribuição da estimativa inicial, cálculo dos coeficientes e resolução do sistema até atingir o critério de convergência (critério de parada). Os valores do tempo de CPU das simulações desta seção, são encontrados em formato de tabelas no Apêndice (A.1).

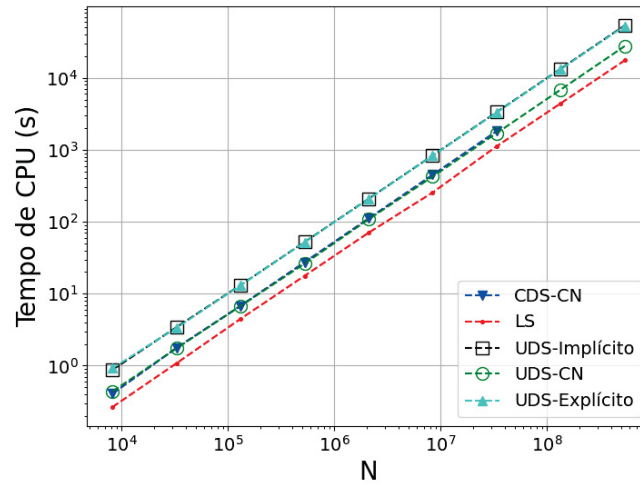
De acordo com Burden e Faires (2016), para determinarmos a complexidade do método (ou algoritmo) que é dado pelo efeito do número de incógnitas em relação t_{CPU} , fazemos um ajuste não linear do tipo

$$t_{CPU}(N) = c(N)^p, \quad (7.3)$$

onde c é o coeficiente do método, p representa a ordem de complexidade e N é o número total de incógnitas do problema. Com p representando a ordem do algoritmo, isto é, a inclinação da curva em escala bilogarítmica, e c é uma constante que depende do método. É importante notar que na nova escala bilogarítmica, uma reta é obtida com o ajuste não linear, onde c é o coeficiente linear de tal reta e representa o valor inicial da relação entre tempo e N , enquanto p é o coeficiente angular e indica a tendência de crescimento.

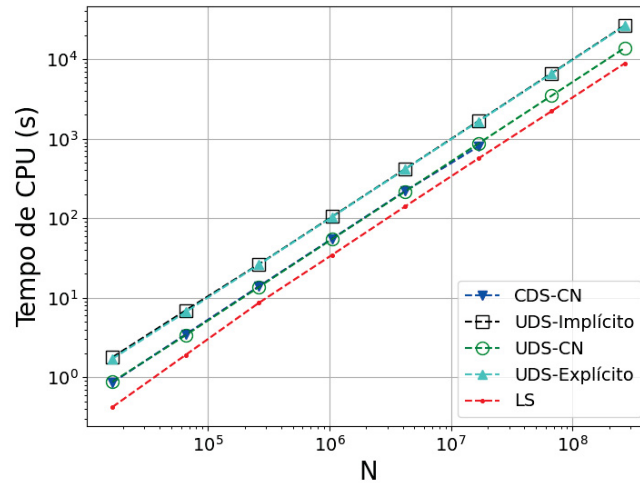
As Figs. 49 e 50 retratam o tempo de CPU *versus* N para todas as aproximações consideradas, nesta ordem, para $\tau = 2$ e 4.

FIGURA 49 – EFEITO DO NÚMERO DE INCÓGNITAS SOBRE O TEMPO DE CPU PARA CADA APROXIMAÇÃO UTILIZADA COM $\tau = 2$.



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 50 – EFEITO DO NÚMERO DE INCÓGNITAS SOBRE O TEMPO DE CPU PARA CADA APROXIMAÇÃO UTILIZADA COM $\tau = 4$.

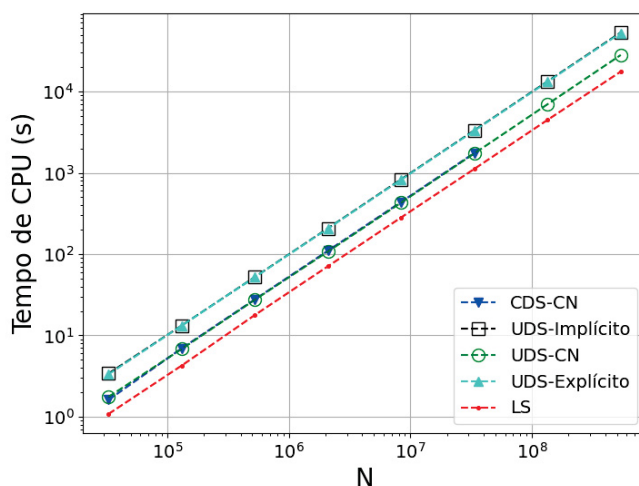


FONTE: O autor (2023).

A princípio, o LS tem o tempo de CPU menor em relação aos demais métodos, seguido do CDS-CN e UDS-CN, com os piores tempos para o UDS-Explícito e UDS-Implícito. Entretanto, elevando o número de variáveis, isto é, refinando a malha, o CDS-CN não pode ser avaliado, seguindo com o melhor tempo o LS, seguido do UDS-CN, UDS-Explícito e UDS-Implícito nas últimas duas malhas analisadas. Note que esta análise é válida para ambas as razões espaço-tempo, conforme as Figs. 49 e 50.

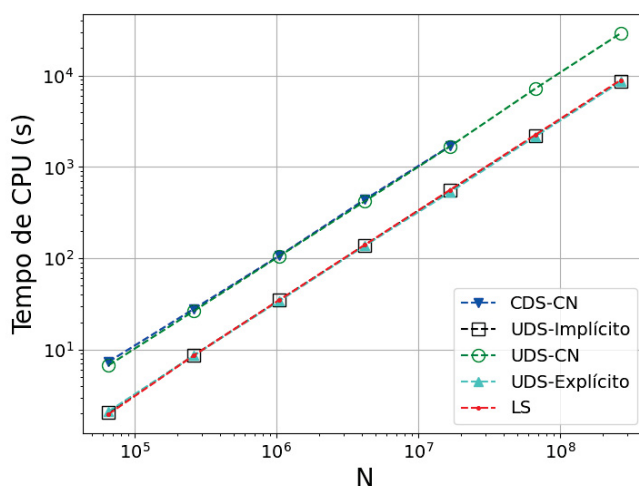
Nas Figs. 51 e 52 temos o tempo em relação ao refino da malha com as razões espaço-tempo $\tau = 8$ e 16 , respectivamente.

FIGURA 51 – EFEITO DO NÚMERO DE INCÓGNITAS SOBRE O TEMPO DE CPU PARA CADA APROXIMAÇÃO UTILIZADA COM $\tau = 8$.



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 52 – EFEITO DO NÚMERO DE INCÓGNITAS SOBRE O TEMPO DE CPU PARA CADA APROXIMAÇÃO UTILIZADA COM $\tau = 16$.



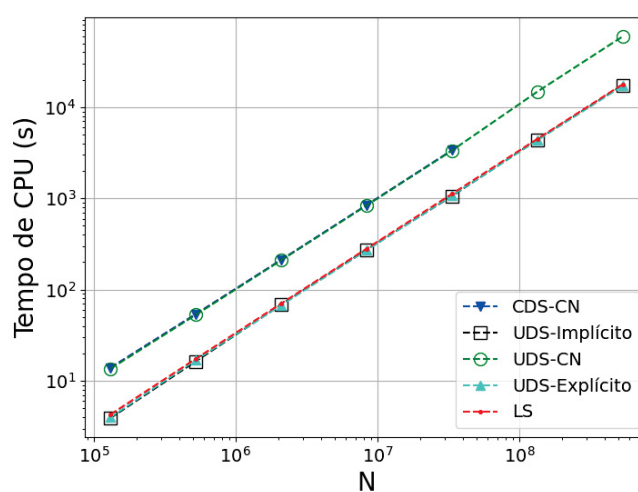
FONTE: O autor (2023).

As Figs. 51 e 52 apresentaram comportamento semelhante aos das Figs. 49 e 50, ou seja, inicialmente o LS apresentou o tempo de CPU menor, seguido das aproximações CDS-CN e UDS-CN, tendo os piores tempos as aproximações UDS-Explícito e UDS-Implícito. Por outro lado, a razão espaço-tempo $\tau = 16$, ilustrado pela Fig. 52, mostra-nos que os menores tempos são para as aproximações LS,

UDS-Explícito e UDS-Implicito, sendo as piores aproximações CDS-CN e UDS-CN, indiferente do número de incógnitas.

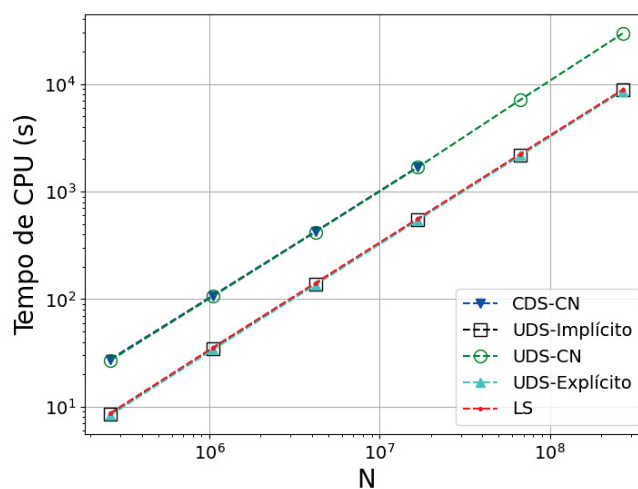
As Figs. 53 e 54 apresentam, respectivamente para $\tau = 32$ e $\tau = 64$, o comportamento para o tempo de CPU *versus* número de variáveis, confirmando um comportamento semelhante ao apresentado pela Fig. 52, onde os menores tempos de CPU são dados pelos métodos LS, UDS-Explícito e UDS-Implicito.

FIGURA 53 – EFEITO DO NÚMERO DE INCÓGNITAS SOBRE O TEMPO DE CPU PARA CADA APROXIMAÇÃO UTILIZADA COM $\tau = 32$.



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 54 – EFEITO DO NÚMERO DE INCÓGNITAS SOBRE O TEMPO DE CPU PARA CADA APROXIMAÇÃO UTILIZADA COM $\tau = 64$.



FONTE: O autor (2023).

As Tabs. 13 e 14 foram criadas a partir dos dados apresentados nas Figs. 49 a 54 para analisar os valores de c e p gerados pelo ajuste dado pela Eq. (7.3). Notamos dessas tabelas que, enquanto as inclinações (representadas por p) são semelhantes, os valores de c são bem distintos (por uma ou duas ordens).

TABELA 13 – PARÂMETROS DO AJUSTE GEOMÉTRICO PARA OS MÉTODOS DE PRIMEIRA ORDEM.

τ	UDS-CN		UDS-Explícito		UDS-Implícito	
	p	c	p	c	p	c
2	0,970	1,676E-02	0,981	2,088E-02	0,993	1,929E-02
4	0,991	1,466E-02	0,981	2,070E-02	0,976	2,147E-02
8	1,017	1,229E-02	0,990	1,955E-02	0,979	2,125E-02
16	0,993	1,953E-02	1,012	1,031E-02	1,048	8,066E-03
32	0,999	1,884E-02	1,004	1,080E-02	1,007	1,063E-02
64	0,979	2,170E-02	1,001	1,110E-02	0,999	1,133E-02

FONTE: O autor (2023).

TABELA 14 – PARÂMETROS DO AJUSTE GEOMÉTRICO PARA OS MÉTODOS DE SEGUNDA ORDEM.

τ	CDS-CN		LS	
	p	c	p	c
2	0,965	1,718E-2	0,998	1,135E-2
4	0,993	1,431E-2	0,961	1,456E-2
8	0,999	1,555E-2	0,999	1,137E-2
16	0,980	2,309E-2	0,989	1,218E-2
32	0,981	2,092E-2	1,012	1,039E-2
64	0,960	2,397E-2	0,997	1,154E-2

FONTE: O autor (2023).

Ao comparar os valores de p para $\tau = 2$, para as aproximações de primeira ordem, os valores mais próximos da unidade é para o UDS-Implícito (sexta coluna da Tab. 13). Para a mesma razão espaço-tempo $\tau = 2$, nas aproximações de segunda ordem, o mais próximo à unidade é o LS (quarta coluna da Tab. 14), com relação, a uma razão espaço-tempo elevada, por exemplo, $\tau = 64$, os valores de p mais próximos a unidade são UDS-Explícito e UDS-Implícito (quarta e sexta colunas da Tab. 13 respectivamente) e LS (quarta coluna da Tab. 14), respectivamente, para os métodos de primeira e segunda ordens.

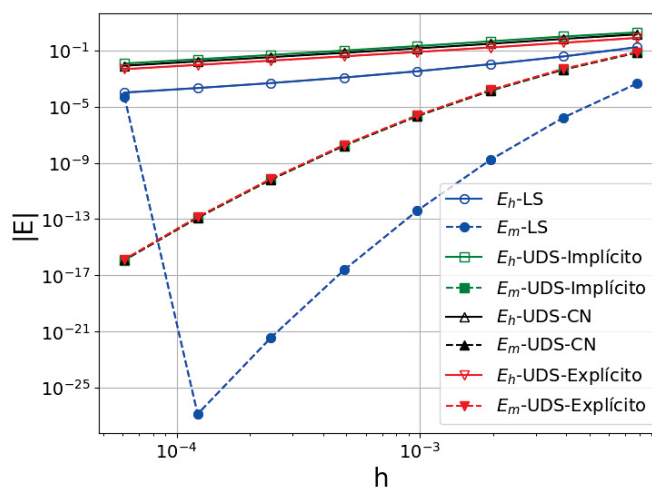
7.6 MÚLTIPLA EXTRAPOLAÇÃO DE RICHARDSON (MER)

A princípio, mostraremos nesta seção o uso de Múltiplas Extrapolações de Richardson (MER) para reduzir o erro de discretização na simulação do modelo do processo de aeração da massa de grãos, assim, comparando tais erros com e sem a aplicação da MER, respectivamente denotados por E_m e E_h . Posteriormente, apresentaremos o uso de estimadores de erros baseados em MER, mostrando que é possível obter soluções com alta ordem de acurácia e de forma confiável.

Roache (1994) enfatiza a necessidade de convergência de malha com refinamentos elevados para obter boa estimativa da ordem de acurácia. Conseqüentemente, descartaremos as malhas mais grossas para o estudo da MER, visto que, nas malhas mais finas a ordem efetiva (p_E) tende para a ordem assintótica (p_L).

A Fig. 55 representa o erro com a aplicação da MER (E_m) e sem sua utilização (E_h).

FIGURA 55 – ERRO NUMÉRICO COM E SEM MER PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES COM $\tau = 2$.



FONTE: O autor (2023).

Observamos que a aplicação da MER reduz drasticamente os erros E_h para todos os métodos utilizados, dando destaque ao LS que teve a maior redução (note que o método LS foi afetado pelo erro de arredondamento na malha mais refinada). Essa redução drástica do erro pode ser confirmada pela seguinte análise.

A Tab. 15 mostra a razão entre E_h e E_m (E_h/E_m) para os métodos analisados nas diversas malhas. Portanto, quanto maior tal razão, maior a redução de E_m com relação a E_h , ou seja, maior o efeito da MER na redução do erro.

TABELA 15 – E_h/E_m COM $\tau = 2$ PARA OS MÉTODOS ESTUDADOS.

$N_y \times N_t$	LS	UDS-CN	UDS-Explícito	UDS-Implicito
128 × 256	1.214E+04	6.003E+01	4.445E+01	7.230E+01
256 × 512	1.940E+06	8.008E+02	5.352E+02	9.985E+02
512 × 1024	6.324E+08	1.706E+04	9.930E+03	2.274E+04
1024 × 2048	4.121E+11	6.197E+05	3.183E+05	8.950E+05
2048 × 4096	1.498E+15	3.793E+07	1.832E+07	5.878E+07
4096 × 8192	2.743E+19	4.363E+09	2.160E+09	6.817E+09
8192 × 16384	2.275E+24	1.046E+12	5.309E+11	1.601E+12
16384 × 32768	-	5.188E+14	2.664E+14	7.849E+14

FONTE: O autor (2023).

Observamos que a aplicação da MER reduz significativamente o erro de discretização. Este fato pode ser evidenciado pela razão E_h/E_m na Tab. 15. Note a tendência dessas razões aumentarem com o refino de malha, o que já era esperada devido ao aspecto das curvas da Fig. 55, ou seja, tais curvas vão se distanciando à medida que refinamos a malha. As aproximações pelo método LS obteve os maiores valores para as razões comparando com as outras aproximações, em todas as malhas. Isso significa, por exemplo, que ao aplicar a MER para o método de Leith na malha $N_y \times N_t = 8192 \times 16384$ com 8 níveis de extrapolação, obtemos uma solução aproximadamente $2,275 \times 10^{24}$ vezes mais acurada, caso não aplicássemos a MER.

Por sua vez a Tab. 16 apresenta a razão entre E_h e E_m para os métodos analisados nas diversas malhas.

TABELA 16 – E_h/E_m COM $\tau = 4$ PARA OS MÉTODOS ESTUDADOS.

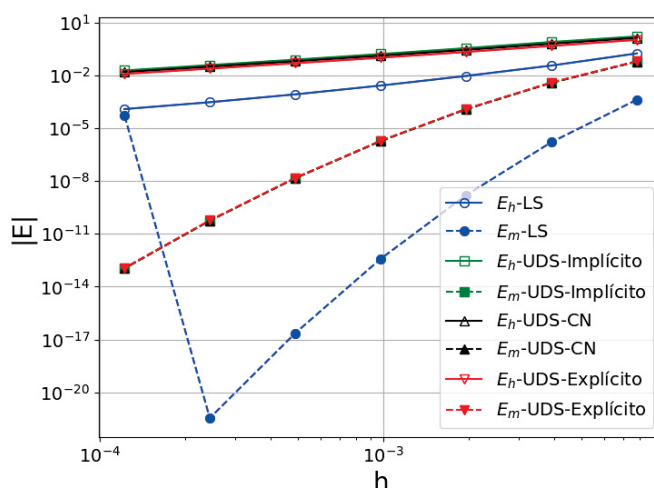
$N_y \times N_t$	LS	UDS-CN	UDS-Explícito	UDS-Implicito
128 × 512	7.440E+03	5.913E+01	5.046E+01	6.635E+01
256 × 1024	6.593E+05	6.433E+02	5.170E+02	7.507E+02
512 × 2048	1.119E+08	1.114E+04	8.369E+03	1.370E+04
1024 × 4096	9.375E+10	3.311E+05	2.406E+05	4.221E+05
2048 × 8192	3.956E+14	1.896E+07	1.392E+07	2.412E+07
4096 × 16384	7.375E+18	2.274E+09	1.690E+09	2.862E+09
8192 × 32768	-	5.641E+11	4.215E+11	7.056E+11

FONTE: O autor (2023).

Verificamos na Tab. 16 que os valores da razão E_h/E_m no geral são menores que os valores apresentado para $\tau = 2$. Novamente o LS apresentou o maior valor em todas as malhas.

Na Fig. 56, apresentamos o erro numérico com (E_m) e sem (E_h) a aplicação da MER, para os métodos avaliados utilizando razão espaço-tempo $\tau = 4$.

FIGURA 56 – ERRO NUMÉRICO COM E SEM MER PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES COM $\tau = 4$.



FONTE: O autor (2023).

Notamos na Fig. 56 que os métodos de primeira ordem reduzem de forma menos acentuada o erro de discretização com a MER (E_m) e sem (E_h), já o de segunda ordem foi o melhor em ambos os casos. Outro fator importante, é o refino da malha: mesmo com a razão espaço-tempo maior, o decaimento da MER não foi significativo.

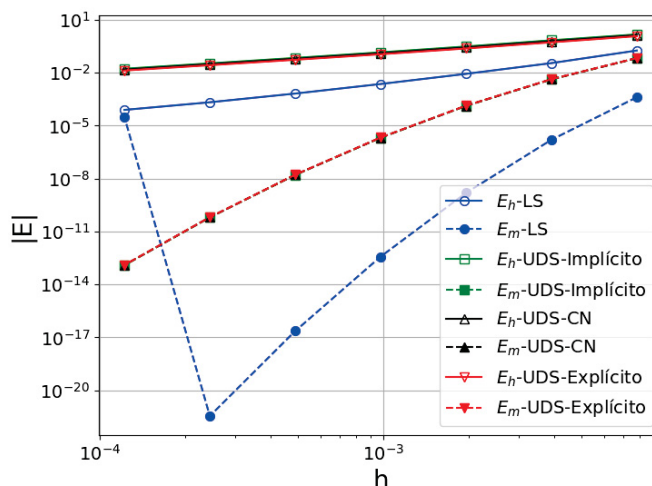
A Tab. 17 apresenta a razão E_h/E_m , para $\tau = 8$, para todos os métodos analisados.

TABELA 17 – E_h/E_m COM $\tau = 8$ PARA OS MÉTODOS ESTUDADOS.

$N_y \times N_t$	LS	UDS-CN	UDS-Explícito	UDS-Implícito
128×1024	7.342E+03	5.190E+01	4.818E+01	5.544E+01
256×2048	6.735E+05	5.694E+02	5.153E+02	6.211E+02
512×4096	1.171E+08	9.973E+03	8.731E+03	1.119E+04
1024×8192	9.301E+10	2.898E+05	2.494E+05	3.314E+05
2048×16384	3.753E+14	1.650E+07	1.428E+07	1.881E+07
4096×32768	6.545E+18	1.979E+09	1.722E+09	2.242E+09
8192×65536	-	4.907E+11	4.283E+11	5.544E+11

FONTE: O autor (2023).

A Fig. 57 mostra a comparação do erro com e sem a MER, para $\tau = 8$, para todos os métodos avaliados nas diversas malhas.

FIGURA 57 – ERRO NUMÉRICO COM E SEM MER PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES COM $\tau = 8$.

FONTE: O autor (2023).

Constatamos na Fig. 57 que o comportamento continua padrão, destacando-se o método LS em relação às Figs. 55 a 56. Com relação à Tab. 17, os valores para a razão entre E_h e E_m foram maiores para LS, repetindo o comportamento quando $\tau = 2$ e 4.

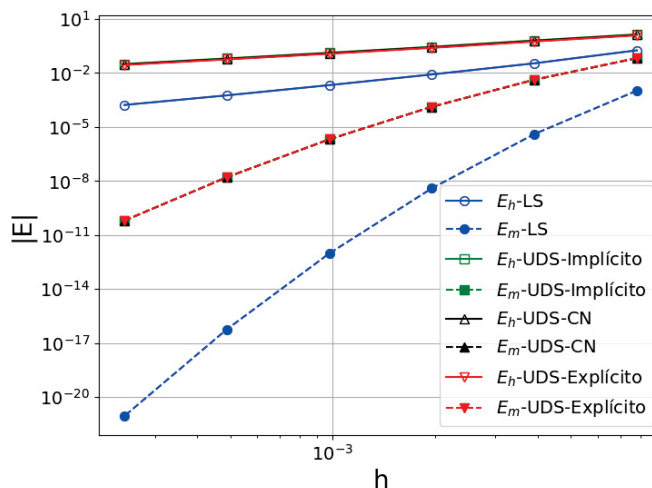
Na Tab. 18, apresentamos a razão E_h/E_m para os diversos métodos e malhas e a Fig. 58 apresenta o comportamento do erro numérico com e sem MER para a razão espaço-tempo $\tau = 16$. Como podemos notar na Tab. 18 que os maiores valores evidenciados para a razão E_h/E_m são para o LS em todas as malhas também para $\tau = 16$. Podemos observar na Fig. 58, o comportamento do erro com (E_m) e sem (E_h) a MER continua satisfatório.

TABELA 18 – E_h/E_m COM $\tau = 16$ PARA OS MÉTODOS ESTUDADOS.

$N_y \times N_t$	LS	UDS-CN	UDS-Explícito	UDS-Implicito
128×2048	1.012E+03	3.523E+01	3.351E+01	3.693E+01
256×4096	4.473E+04	3.100E+02	2.900E+02	3.300E+02
512×8192	8.724E+06	4.516E+03	4.185E+03	4.854E+03
1024×16384	8.594E+09	1.280E+05	1.189E+05	1.372E+05
2048×32768	3.604E+13	7.666E+06	7.143E+06	8.198E+06
4096×65536	6.383E+17	9.500E+08	8.865E+08	1.014E+09

FONTE: O autor (2023).

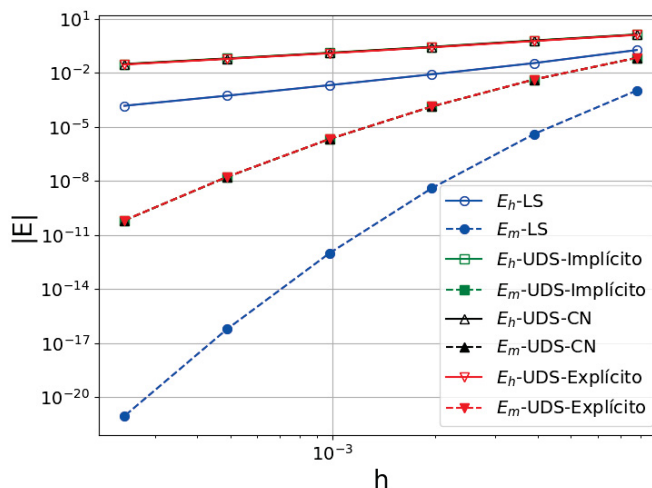
FIGURA 58 – ERRO NUMÉRICO COM E SEM MER PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES COM $\tau = 16$.



FONTE: O autor (2023).

Finalmente, na Fig. 59, apresentamos o comportamento do erro numérico para a razão espaço-tempo $\tau = 32$ com (E_m) e sem (E_h) a aplicação da MER e a Tab. 19 apresenta a razão E_h/E_m para os diversos métodos e malhas.

FIGURA 59 – ERRO NUMÉRICO COM E SEM MER PARA TODAS AS APROXIMAÇÕES COM $\tau = 32$.



FONTE: O autor (2023).

O comportamento apresentado na Fig. 59 para razão espaço-tempo $\tau = 32$ é semelhante ao apresentado para as demais razões espaço-tempo ($\tau = 2, 4, 8$ e 16), destacando-se o LS tanto com (E_m) como sem (E_h) a aplicação da MER. Os

resultados apresentados na Tab. 19 mostram que para a razão E_h/E_m o comportamento é semelhante as Tabs. 15, 16, 17 e 18, destacando-se o LS como evidenciado graficamente.

TABELA 19 – E_h/E_m COM $\tau = 32$ PARA OS MÉTODOS ESTUDADOS.

$N_y \times N_t$	LS	UDS-CN	UDS-Explícito	UDS-Implicito
128×4096	1.024E+03	3.520E+01	3.433E+01	3.606E+01
256×8192	4.505E+04	3.063E+02	2.963E+02	3.162E+02
512×16384	8.734E+06	4.486E+03	4.319E+03	4.654E+03
1024×32768	8.498E+09	1.272E+05	1.226E+05	1.319E+05
2048×65536	3.490E+13	7.621E+06	7.357E+06	7.888E+06
4096×131072	5.955E+17	9.445E+08	9.123E+08	9.768E+08

FONTE: O autor (2023).

Portanto, com os erros numéricos com MER (E_m) e sem sua aplicação (E_h), utilizando diferentes razões espaço-tempo ($\tau = 2, 4, 8, 16$ e 32) dados pelas Figs. 55 a 59; e as razões E_h/E_m dadas pelas Tabs. 15 a 19, podemos observar que os melhores resultados foram atingidos com o uso do método de Leith para as menores razões espaço-tempo e para malhas mais refinadas, mas mesmo assim, excelentes resultados foram alcançados para todos os métodos, razões espaço-tempo e malhas.

7.7 ANÁLISE DOS ESTIMADORES PARA A MER

Nesta seção apresentaremos os resultados dos estimadores $U_\Delta, U_{pm}, U_{pmc}, U_\Psi$ e U_{Ψ^*} (estimadores apresentados na Seção 4.2), além de suas efetividades Γ (dada pela Eq. (4.22)) para os erros numéricos após a aplicação de MER (E_m). Inicialmente apresentando para a razão espaço-tempo $\tau = 2$ e em seguida, para $\tau = 32$. Para as demais razões, as figuras encontram-se no Apêndice (B.1).

A Tab. 20 apresenta a efetividade Γ dos cinco estimadores analisados para o método LS e $\tau = 2$. Devemos lembrar que a estimativa é considerada acurada se $\Gamma \approx 1$ e confiável se $\Gamma \geq 1$ (MARCHI, 2001).

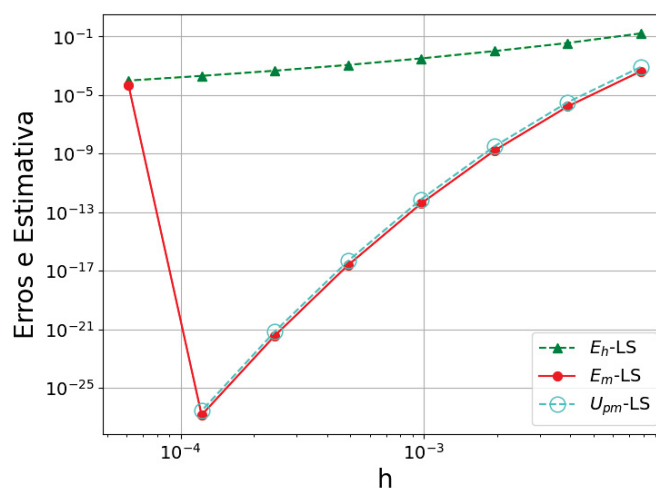
Notamos na Tab. 20 que $\Gamma \approx 1,449$ para o estimador de Richardson (U_{pmc}) e que os demais estimadores não atendem a condição $\Gamma \approx 1$. A efetividade do estimador Δ cresce com o refino da malha, ou seja, ele não é um bom estimador para E_m (é confiável mas não é acurado). Os demais estimadores tendem a um valor, mas não próximos da unidade. Podemos notar também que, mesmo o estimador U_{pmc} sendo um pouco acurado devido ao valor $\Gamma \approx 1,449$ quando deveria ser $\Gamma \geq 1$, ainda assim, ele é confiável, pois $\Gamma > 1$ em todas as malhas.

TABELA 20 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 2$ COM O MÉTODO LS.

$N_y \times N_t$	$\Gamma(U_\Delta)$	$\Gamma(U_{pm})$	$\Gamma(U_{pmc})$	$\Gamma(U_\Psi)$	$\Gamma(U_{\Psi^*})$
128×256	2,896E+03	1,951E+00	1,458E+00	9,038E+01	1,974E+00
256×512	2,986E+05	1,938E+00	1,451E+00	7,380E+01	1,943E+00
512×1024	2,787E+08	1,934E+00	1,450E+00	7,054E+01	1,936E+00
1024×2048	2,237E+11	1,933E+00	1,449E+00	6,977E+01	1,934E+00
2048×4096	2,125E+15	1,933E+00	1,449E+00	6,958E+01	1,933E+00
4096×8192	9,511E+20	1,933E+00	1,449E+00	6,953E+01	1,933E+00
8192×16384	2,385E+26	1,933E+00	1,449E+00	6,952E+01	1,933E+00

FONTE: O autor (2023).

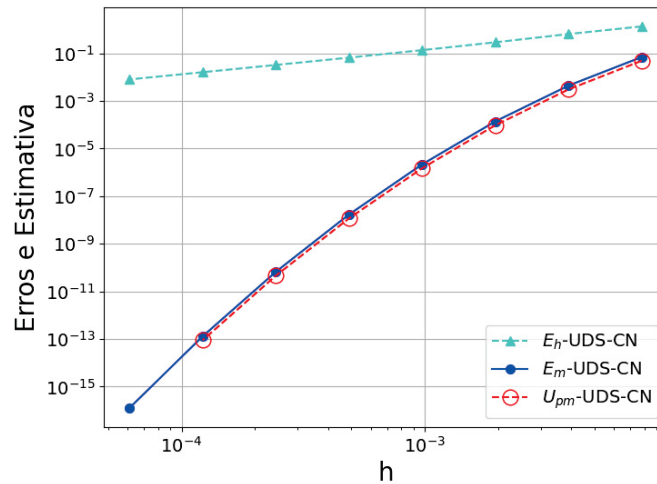
A Fig. 60 mostra o erro numérico com a aplicação de MER (E_m) e sem sua utilização (E_h), além da estimativa de Richardson (U_{pm}), para o método LS e $\tau = 2$. Nesta seção estamos optando por esboçar sempre as figuras com o estimador U_{pm} para a visualização dos erros e suas estimativas apenas por questões didáticas, pois, como veremos, este não será sempre o melhor estimador.

FIGURA 60 – COMPARAÇÃO ENTRE O ERRO E_m E SUA ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 2$ COM O MÉTODO LS.

FONTE: O autor (2023).

Verificamos que a estimativa para o erro (U_{pm}) está em grande conformidade com o erro numérico após a aplicação de MER (E_m), apesar de estar visualmente um pouco acima, conforme Fig. 60.

Apresentamos na Fig. 61, uma comparação do erro numérico com a aplicação de MER (E_m) e sem sua utilização (E_h), além da estimativa de Richardson (U_{pm}), para o método UDS-CN e $\tau = 2$. Verificamos que a estimativa e o erro estão em grande conformidade, porém com a estimativa tendo valores levemente inferiores.

FIGURA 61 – COMPARAÇÃO ENTRE O ERRO (E_m) E SUA ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 2$ COM O MÉTODO UDS-CN.

FONTE: O autor (2023).

A Tab. 21 apresenta a efetividade Γ dos cinco estimadores analisados para o método UDS-CN e $\tau = 2$.

TABELA 21 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 2$ COM O MÉTODO UDS-CN.

$N_y \times N_t$	$\Gamma(U_\Delta)$	$\Gamma(U_{pm})$	$\Gamma(U_{pmc})$	$\Gamma(U_\Psi)$	$\Gamma(U_{\Psi^*})$
128×256	4,251E+00	6,980E-01	3,368E-01	2,349E+00	7,543E-01
256×512	6,039E+01	6,922E-01	3,182E-01	1,484E+00	7,169E-01
512×1024	1,901E+03	6,897E-01	3,095E-01	1,238E+00	7,013E-01
1024×2048	5,600E+04	6,886E-01	3,053E-01	1,140E+00	6,942E-01
2048×4096	4,786E+06	6,880E-01	3,033E-01	1,097E+00	6,908E-01
4096×8192	7,971E+08	6,878E-01	3,023E-01	1,076E+00	6,891E-01
8192×16384	1,908E+11	6,876E-01	3,017E-01	1,066E+00	6,883E-01

FONTE: O autor (2023).

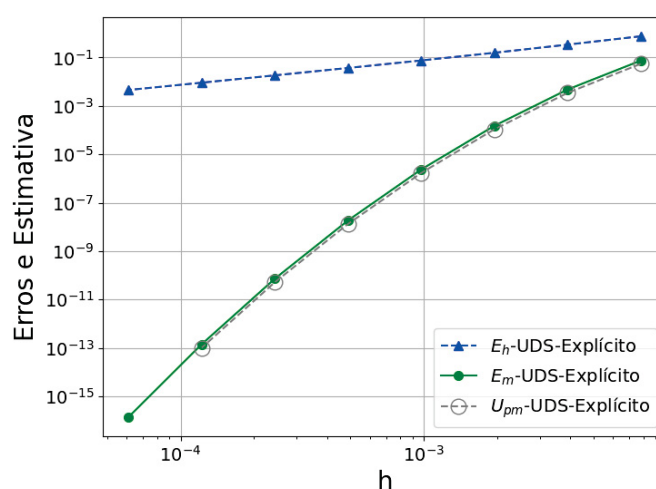
Observando os valores da efetividade (Γ), apresentados nesta tabela, verificamos que entre os estimadores com $\Gamma \approx 1$, temos o estimador U_{pm} , o estimador U_{Ψ^*} e o estimador U_Ψ , apresentando respectivamente, as efetividades $\Gamma \approx 0,688$, $0,688$ e $1,066$, ou seja, Γ está mais próxima da unidade do que o LS.

Note que as efetividades dos estimadores U_Δ e U_{pmc} , além de não atenderem a condição $\Gamma \approx 1$, tais efetividades tende a crescer (no caso de U_Δ) ou tende a uma constante não próxima da unidade (no caso de U_{pmc}), com o refino da malha, ou seja, não são bons estimadores. Neste caso temos que os estimadores U_{pm} e U_{Ψ^*} são

pouco acurados e não confiáveis, enquanto que, o estimador U_Ψ é acurado e confiável, para o método analisado.

Na Fig. 62 apresentamos o erro numérico com a aplicação de MER (E_m), sem sua aplicação (E_h) e a estimativa de Richardson (U_{pm}), para o método UDS-Explícito e $\tau = 2$. Verificamos que há grande concordância entre U_{pm} e E_m , apesar de estar visualmente um pouco abaixo.

FIGURA 62 – COMPARAÇÃO ENTRE O ERRO (E_m) E SUA ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 2$ COM O MÉTODO UDS-Explícito.



FONTE: O autor (2023).

A Tab. 22 apresenta a efetividade Γ dos cinco estimadores analisados para o método UDS-Explícito e $\tau = 2$.

TABELA 22 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 2$ COM O MÉTODO UDS-EXPLÍCITO.

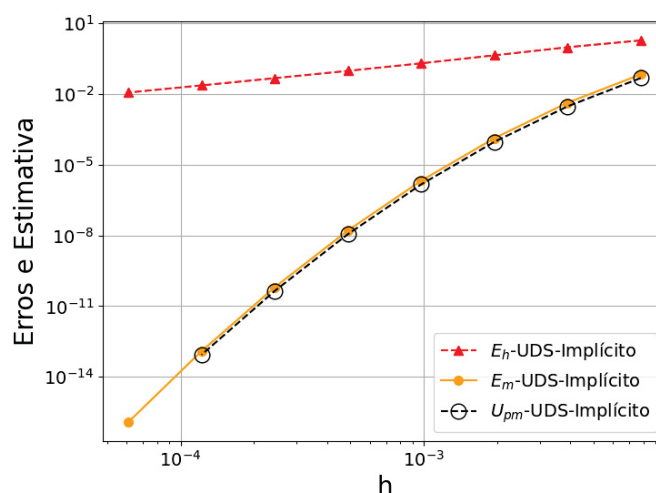
$N_y \times N_t$	$\Gamma(U_\Delta)$	$\Gamma(U_{pm})$	$\Gamma(U_{pmc})$	$\Gamma(U_\Psi)$	$\Gamma(U_{\Psi^*})$
128×256	3,360E+00	7,383E-01	3,267E-01	1,911E+00	7,996E-01
256×512	2,746E+01	7,261E-01	3,085E-01	1,286E+00	7,523E-01
512×1024	6,276E+02	7,206E-01	2,999E-01	1,097E+00	7,326E-01
1024×2048	2,471E+04	7,179E-01	2,958E-01	1,020E+00	7,237E-01
2048×4096	5,543E+05	7,166E-01	2,938E-01	9,850E-01	7,195E-01
4096×8192	4,770E+07	7,160E-01	2,928E-01	9,684E-01	7,174E-01
8192×16384	9,675E+10	7,157E-01	2,923E-01	9,602E-01	7,174E-01

FONTE: O autor (2023).

Notamos que para UDS-Explícito, temos $\Gamma \approx 0,716$, $0,717$ e $\Gamma \approx 1$, respectivamente para U_{pm} , U_{Ψ^*} e U_{Ψ} . Novamente os outros estimadores não são bons, pois suas efetividades tendem a crescer ou tendem a uma constante não próxima da unidade com o refino da malha. E os estimadores U_{pm} e U_{Ψ^*} são um pouco mais acurados que os demais, porém não confiáveis. O estimador U_{Ψ} é acurado e confiável em malhas mais grosseiras, mas não confiável em malhas mais refinadas.

Para o método UDS-Implícito e $\tau = 2$, a Fig. 63 apresenta E_m , E_h e U_{pm} e a Tab. 23 apresenta a efetividade Γ dos cinco estimadores analisados. Tivemos resultados análogos aos obtidos com o método UDS-Explícito exceto para U_{Ψ} que além de confiável é acurado.

FIGURA 63 – COMPARAÇÃO ENTRE O ERRO (E_m) E SUA ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 2$ COM O MÉTODO UDS-IMPLÍCITO.



FONTE: O autor (2023).

TABELA 23 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 2$ COM O MÉTODO UDS-IMPLÍCITO.

$N_y \times N_t$	$\Gamma(U_{\Delta})$	$\Gamma(U_{pm})$	$\Gamma(U_{pmc})$	$\Gamma(U_{\Psi})$	$\Gamma(U_{\Psi^*})$
128×256	3,772E+00	7,041E-01	3,382E-01	2,419E+00	7,606E-01
256×512	4,395E+01	7,015E-01	3,195E-01	1,489E+00	7,266E-01
512×1024	1,375E+03	7,004E-01	3,108E-01	1,233E+00	7,120E-01
1024×2048	6,577E+04	7,000E-01	3,065E-01	1,132E+00	7,056E-01
2048×4096	5,632E+06	6,997E-01	3,045E-01	1,088E+00	7,025E-01
4096×8192	1,323E+09	6,996E-01	3,034E-01	1,066E+00	7,010E-01
8192×16384	4,419E+11	6,996E-01	3,029E-01	1,056E+00	7,003E-01

FONTE: O autor (2023).

Agora apresentaremos os resultados das efetividades Γ dos estimadores U_{Δ} , U_{pm} , U_{pmc} , U_{Ψ} e U_{Ψ^*} , para os erros numéricos após a aplicação de MER (E_m) considerando a razão espaço-tempo $\tau = 32$. As Tabs. 24, 25, 26 e 27 apresentam Γ , respectivamente para os métodos LS, UDS-CN, UDS-Explícito e UDS-Implicito.

TABELA 24 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 32$ COM O MÉTODO LS.

N	$\Gamma(U_{\Delta})$	$\Gamma(U_{pm})$	$\Gamma(U_{pmc})$	$\Gamma(U_{\Psi})$	$\Gamma(U_{\Psi^*})$
128×4096	8,699E+02	7,311E-01	5,213E-01	1,296E+01	7,397E-01
256×8192	1,173E+05	7,274E-01	5,191E-01	5,975E-01	7,296E-01
512×16384	5,940E+07	7,267E-01	5,186E-01	2,656E-01	7,271E-01
1024×32768	6,918E+10	7,264E-01	5,185E-01	1,245E-01	7,265E-01
2048×65536	3,914E+06	7,263E-01	5,185E-01	6,036E-02	7,263E-01

FONTE: O autor (2023).

TABELA 25 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 32$ COM O MÉTODO UDS-CN.

N	$\Gamma(U_{\Delta})$	$\Gamma(U_{pm})$	$\Gamma(U_{pmc})$	$\Gamma(U_{\Psi})$	$\Gamma(U_{\Psi^*})$
128×4096	2,101E+01	7,311E-01	3,208E-01	2,091E+01	7,909E-01
256×8192	2,564E+00	7,285E-01	2,991E-01	1,267E+01	7,547E-01
512×16384	1,278E+00	7,277E-01	2,888E-01	1,031E+01	7,400E-01
1024×32768	8,319E+02	7,275E-01	2,839E-01	9,380E-01	7,334E-01
2048×65536	3,566E+04	7,274E-01	2,815E-01	8,960E-01	7,303E-01

FONTE: O autor (2023).

TABELA 26 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 32$ COM O MÉTODO UDS-EXPLÍCITO.

N	$\Gamma(U_{\Delta})$	$\Gamma(U_{pm})$	$\Gamma(U_{pmc})$	$\Gamma(U_{\Psi})$	$\Gamma(U_{\Psi^*})$
128×4096	2,585E+00	7,326E-01	3,211E-01	2,082E+01	7,927E-01
256×8192	3,102E+00	7,297E-01	2,993E-01	1,266E+01	7,560E-01
512×16384	6,488E+02	7,288E-01	2,892E-01	1,031E+01	7,411E-01
1024×32768	2,106E+04	7,286E-01	2,843E-01	9,386E-01	7,345E-01
2048×65536	1,531E+06	7,284E-01	2,819E-01	8,968E-01	7,313E-01

FONTE: O autor (2023).

Dessa forma, observamos em todas as tabelas (Tabs. 24, 25, 26 e 27), que os valores dos estimadores U_{pm} e U_{Ψ^*} para $\tau = 32$, tem respectivamente $\Gamma \approx 0,726$ e $0,730$, indiferente do método aplicado para a discretização. Neste caso os estimadores U_{pm} e U_{Ψ^*} são um pouco acurados e não confiáveis ($\Gamma < 1$). O estimador U_{Δ} é confiável mas não acurado, o estimador U_{pmc} não é nem confiável e nem acurado. Por sua vez

TABELA 27 – EFETIVIDADE DOS ESTIMADORES PARA $\tau = 32$ COM O MÉTODO UDS-IMPLÍCITO.

N	$\Gamma(U_{\Delta})$	$\Gamma(U_{pm})$	$\Gamma(U_{pmc})$	$\Gamma(U_{\Psi})$	$\Gamma(U_{\Psi^*})$
128×4096	2,096E+01	7,297E-01	3,206E-01	2,100E+01	7,894E-01
256×8192	3,215E+00	7,273E-01	2,988E-01	1,2683E+01	7,536E-01
512×16384	1,831E+00	7,268E-01	2,886E-01	9,373E-01	7,390E-01
1024×32768	4,017E+01	7,266E-01	2,836E-01	8,951E-01	7,325E-01
2048×65536	1,515E+01	7,266E-01	2,812E-01	8,751E-01	7,294E-01

FONTE: O autor (2023).

o estimador U_{Ψ} é pouco acurado e não confiável para os métodos UDS-CN, UDS-Explícito e UDS-Implícito, e não sendo nem acurado e nem confiável para o método LS.

Portanto, com os erros numéricos e suas estimativas para $\tau = 2$, dadas pelas Figs. 60 a 63; e as efetividades dos estimadores para $\tau = 2$ e 32, dadas pelas Tabs. 20 a 27, podemos observar que, dentre todos os estimadores, o estimador U_{Δ} não é acurado mas é confiável, independente do método de discretização e da razão espaço-tempo utilizados. Portanto, nossa análise a seguir irá desconsiderar tal estimador.

Para baixas razões espaço-tempo, o método UDS-Explícito não teve nenhum estimador que fosse acurado e confiável simultaneamente. Entretanto, o método LS para U_{pm} e U_{Ψ^*} são confiáveis e não acurados, U_{pmc} é confiável e pouco acurado e U_{Ψ} é acurado mas não confiável. Para os métodos UDS-CN e UDS-Implícito os estimadores U_{pm} e U_{Ψ^*} são acurados e não confiáveis, U_{pmc} não é confiável e nem acurado e U_{Ψ} é acurado e confiável.

Para altas razões espaço-tempo, todos métodos tiveram estimadores não confiáveis, pois $\Gamma < 1$ para todos eles exceto para U_{Δ} , o que na prática significa que os erros são superiores às suas estimativas, causando um pouco de insegurança ao admitir tais estimativas. Entretanto, pelas Figs. 60 a 63, vimos que, apesar das estimativas serem não confiáveis, elas são precisas, podendo ser usadas com cautela. Para isso, vemos que todos os métodos tiveram estimadores acurados, exceto o estimador U_{pmc} que não foi acurado para nenhum dos métodos.

Uma ressalva deve-se fazer: na busca por estimadores acurados e confiáveis para altas razões espaço-tempo, podemos usar qualquer um dos métodos, mas levando em consideração apenas as malhas mais grossas.

Uma possível explicação para não termos estimadores acurados e confiáveis para qualquer método, qualquer razão espaço-tempo ou qualquer grau de refino de malha, pode ser pelo fato da análise de erros (MER e estimativas) ser feita a partir

de uma solução analítica fabricada a partir de dados experimentais, ou seja, não é uma solução analítica do modelo teórico de Thorpe e que não tem solução analítica conhecida. Outra possível explicação, pode ser por conta das ordens verdadeiras teóricas utilizadas na aplicação da MER. A partir da segunda ordem verdadeira não conseguimos definir com precisão seus valores no modelo, dado que o mesmo possui muitos parâmetros que influenciam diretamente esses valores.

Assim, se faz necessário mais estudos para se obter um estimador acurado e confiável para nossos modelos numéricos, independente da razão espaço-tempo. Apesar disso, conseguimos encontrar estimadores acurados e em alguns casos também confiáveis para as baixas razões espaço-tempo.

8 CONCLUSÃO

Nesta seção apresentamos as conclusões gerais obtidas ao longo do trabalho, bem como as principais contribuições e finalmente as propostas para trabalhos futuros.

8.1 OBSERVAÇÕES GERAIS

Inicialmente, propomos a comparação entre as soluções numéricas pelos MDF e MVF com diferentes esquemas de aproximações numéricas para o problema de aeração da massa de grãos dado pelo modelo de Thorpe. Tais esquemas de aproximação são: UDS-CN, UDS-Explícito e UDS-Implícito (métodos de primeira ordem) e CDS-CN e LS (métodos de segunda ordem). No caso dos métodos de segunda ordem, aplicamos a viscosidade artificial para evitar oscilações. Usando a variável de interesse do tipo da Fig. 11 e razão espaço-tempo $\tau = 2$, foram efetuadas análises do erro de discretização (E_h) para diferentes malhas (Ω^h) utilizando a solução fabricada. Neste caso, o MVF destacou-se por apresentar o menor erro se comparado com o MDF (método comumente usado na literatura para este tipo de problema). Portanto, decidimos utilizar tal método na análises posteriores.

Dando sequência, fizemos um estudo das ordens efetiva (p_E) do erro de discretização para o MVF, para as aproximações abordadas, com diferentes razões espaço-tempo ($\tau = 2, 4, 8, 16, 32$ e 64). Mostramos que, para um coeficiente de viscosidade artificial (λ) fixo, p_E tende à ordem assintótica (p_L) nas aproximações de segunda ordem (CDS-CN e LS), somente para razões espaço-tempo elevadas, por exemplo, $\tau = 64$.

Assim, para obter uma convergência adequada de p_E para $p_L = 2$, independente de τ , foi estabelecida uma relação para a variação λ , onde a razão dos erros entre as malhas fina e grossa é levada em consideração.

Posteriormente, analisamos a influência da razão espaço-tempo no modelo. Para isso, efetuamos verificações através do decaimento da norma do erro e constatamos que $\tau = 2$ é a melhor razão espaço-tempo. Verificamos também que os métodos de segunda ordem apresentaram decaimento do erro mais rápido do que os de primeira ordem, conforme esperado. Devemos frisar que o método LS destaca-se entre os métodos de segunda ordem, enquanto que o método UDS-Explícito entre os de primeira ordem.

No passo seguinte, foram efetuadas análises das ordens de complexidade de todos os métodos, usando para isto, o efeito do número de incógnitas (N) sobre o tempo de CPU (t_{CPU}), para diferentes razões espaço-tempo. O método LS apresentou

melhor tempo de CPU que os demais e foi seguido pelo UDS-Explícito.

Na sequência, aplicamos MER para obtermos uma redução dos erros de discretização em todos os métodos, exceto CDS-CN por apresentar problemas de convergência em malhas refinadas. Novamente o LS se sobressaiu entre os métodos. Efetuamos a análise da MER para diferentes razões espaço-tempo e mais uma vez o $\tau = 2$ apresentou os melhores resultados.

Finalmente, efetuando o teste de efetividade para os diversos métodos estudados, verificamos que o estimador U_{Δ} não é acurado nem confiável, independente do método de discretização e razões espaço-tempo utilizadas. Com relação aos estimadores U_{pm} , U_{pmc} , U_{Ψ} e U_{Ψ^*} : para baixas razões espaço-tempo, o método UDS-Explícito não teve nenhum estimador que fosse acurado e confiável simultaneamente exceto o U_{Δ} que é confiável mas não acurado. Entretanto, os métodos LS, UDS-CN e UDS-Implícito tiveram resultados variando de acordo com o estimador.

Ainda, para baixas abn isotropias o método de segunda ordem LS para os estimadores U_{pm} e U_{Ψ^*} são confiáveis e não acurados, U_{pmc} é confiável e pouco acurado e U_{Ψ} é acurado mas não confiável. Os métodos de primeira ordem UDS-CN e UDS-Implícito os estimadores U_{pm} e U_{Ψ^*} são acurados e não confiáveis, U_{pmc} não é confiável e nem acurado e U_{Ψ} é acurado e confiável.

Para altas razões espaço-tempo, todos os métodos tiveram estimadores não confiáveis, exceto para o estimador U_{Δ} que é confiável mas não acurado. Portanto, na busca por estimadores acurados e confiáveis para tais razões espaço-tempo, podemos usar qualquer um dos métodos (LS, UDS-CN, UDS-Implícito e UDS-Explícito), mas levando em consideração o estimador mais adequado.

Portanto, o modelo do processo de aeração da massa de grãos proposto por Thorpe (2001b) é descrito muito bem pelo MVF, provando que o LS é a melhor aproximação a serem utilizada com e sem a aplicação da MER. O método também foi eficiente em relação à razão espaço-tempo, pois em diversas simulações, a menor razões espaço-tempo ($\tau = 2$) obteve melhores resultados.

8.2 PRINCIPAIS CONTRIBUIÇÕES

- Propomos uma solução numérica para o modelo de Thorpe pelo MVF, mostramos sua concordância e melhor acurácia se comparada ao MDF (método comumente utilizado na literatura).
- Propomos uma relação na escolha do fator de viscosidade artificial para garantir a ordem adequada do erro de discretização em métodos de segunda ordem, mesmo para razões espaço-tempo baixas.

- Analisamos a influência dos diferentes razões espaço-tempo nos diferentes métodos numéricos propostos.
- Reduzimos radicalmente o erro de discretização com a aplicação da Múltipla Extrapolação de Richardson (MER) para diferentes razões espaço-tempo.
- Mostramos o comportamento de diversos estimadores de erros e elegemos o estimador de Richardson para o modelo proposto.

8.3 PROPOSTAS DE TRABALHOS FUTUROS

- Analisar os estimadores para outras sequências de ordens verdadeiras.
- Utilizar outras aproximações de segunda ordem, ou ordens mais elevadas, que possam minimizar ou eliminar as oscilações.
- Desenvolver o MVF utilizando arranjo desencontrado para as variáveis.
- Analisar a influência da anisotropia física.
- Usar outras técnicas para discretizar os volumes no contorno, como por exemplo, a técnica de balanços para os volumes de fronteira.
- Utilizar outros tipos de grãos verificando a influência das constantes do grão no modelo proposto.
- Implementar o modelo matemático em 2D e fazer uma análise de erros similar ao que foi feita.
- Resolver os sistemas gerados pelos problemas 2D com outros *solvers* e aceleradores de convergência.
- Discretizar o modelo em outros tipos de malhas.
- Aplicar paralelismo para otimizar o tempo de simulação, quando possível.
- Verificar a melhor técnica ou das melhores combinações de técnicas para sistemas em escala comercial.
- Efetuar simulações de sistemas de controle em que a tomada de decisões é baseada na simulação do processo.

REFERÊNCIAS

- ALAGUSUNDARAM, K.; JAYAS, D. S.; WHITE, N. D. G.; MUIR, W. E. *et al.* Finite difference model of three-dimensional heat transfer in grain bins. **Canadian Agricultural Engineering**, Citeseer, v. 32, n. 2, p. 315–321, 1990. Citado 2 vezes nas páginas 28, 40.
- ALÉ, J. V. **Industrial Ventilation Systems: Fans (in Portuguese)**. [S.l.]: Department of Mechanical e Mechatronic Engineering, LSFM, PUCRS, 2001. Citado 1 vez na página 69.
- ANDRADE, E. T. **Simulação da variação de temperatura em milho armazenado em silo metálico**. 2001. Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, Minas Gerais. Citado 1 vez na página 35.
- BILOBROVEC, M. **Sistema especialista em lógica fuzzy para o controle, gerencialmente e manutenção da qualidade em processo de aeração de grãos**. 2005. Diss. (Mestrado) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Campus Ponta Grossa. Curso de Pós-Graduação em Engenharia de Produção. Ponta Grossa. Citado 1 vez na página 32.
- 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**, v. 164, p. 104923, 2019. ISSN 0168-1699. Citado 1 vez na página 27.
- BOND, E. J. **Manual of fumigation for insect control**. Edição: 1. Canada: FAO Plant Production and Protection Paper, n.54., 1984. P. 440. Citado 1 vez na página 34.
- BREZINSKI, C.; ZAGLIA, M. R. A review of vector convergence acceleration methods, with applications to linear algebra problems. **International Journal of Quantum Chemistry**, Wiley Online Library, v. 109, n. 8, p. 1631–1639, 2009. Citado 1 vez na página 58.
- BRIGGS, W. L.; HENSON, V. E.; MCCORMICK, S. F. **A Multigrid Tutorial**. 2nd. Philadelphia: SIAM, 2000. Citado 1 vez na página 56.
- BROOKER, D. B.; BAKKER-ARKEMA, F. W.; HALL, C. W. **Drying cereal grains and their products**. 1. ed. New York - USA: Westport, Connecticut AVI Publishing Co, Inc, Westport, C, 1974. P. 265. Citado 1 vez na página 69.
- BROOKER, D. B.; BARKER-ARKEMA, F. W.; HALL, C. W. **Drying and storage of grains and oilseeds**. 1. ed. New York - USA: AVI Book Van Nostrand Reinhold, 1992. ISBN 0-442-20515-5. Citado 2 vezes nas páginas 67, 69.

- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. **Numerical Analysis**. 10nd. Boston: Cengage Learning, 2016. Citado 3 vezes nas páginas 28, 58, 107.
- CAMPBELL, J.; VIGNJEVIC, R. Artificial Viscosity Methods for Modeling Shock Wave Propagation. In: PREDICTIVE Modeling of Dynamic Processes. Boston, MA: Springer US, 2009. P. 349–365. ISBN 978-1-4419-0727-1. Citado 1 vez na página 54.
- CHANG, C. S.; CONVERSE, H. H.; STEELE, J. L. 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 1 vez na página 28.
- _____. 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 1 vez na página 28.
- 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 68.
- CONAB. **Armazenagem**. [S.l.: s.n.], 2023. Disponível em: <<https://www.conab.gov.br/armazenagem>>. Acesso em: 28 fev. 2023. Citado 1 vezes nas páginas 36, 37.
- CUNHA, M. C. C. **Métodos Numéricos**. 2nd. Campinas - SP: Ed. Unicamp, 2000. Citado 1 vez na página 55.
- DA SILVA, L. P.; MARCHI, C.; MENEGUETTE, M.; FOLTRAN, A. Robust RRE technique for increasing the order of accuracy of SPH numerical solutions. **Mathematics and Computers in Simulation**, v. 199, p. 231–252, 2022. ISSN 0378–4754. Citado 1 vez na página 46.
- DA SILVA, N. D. P.; MARCHI, C. H.; ARAKI, L. K.; BORGES, R. B. R.; BERTOLDO, G.; SHU, C. W. Completed repeated Richardson extrapolation for compressible fluid flows. **Applied Mathematical Modelling**, v. 77, p. 724–737, 2020. ISSN 0307–904X. Citado 1 vez na página 46.
- DEMIRDZIC, I.; LILEK, Z.; PERIC, M. Fluid Flow and Heat Transfer Test Problems for Non-Orthogonal Grids: Bench-Mark Solutions. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 15, p. 329–354, 1992. Citado 1 vez na página 61.
- EMBRAPA. **Soja em números (safra 2021/22)**. online. Brasília - BR: Embrapa:online, 2022. Disponível em: <<https://www.embrapa.br/soja/cultivos/soja1/dados-economicos>>. Acesso em: 31 jan. 2023. Citado 1 vez na página 36.
- ERTUK, E.; CORKE, T. C.; GOKÇOL, C. Numerical solutions of 2-d steady incompressible driven cavity flow at high reynolds numbers. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 48, p. 747–774, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 31, 45.

- FAORO, V. **Modelagem Matemática e Otimização do Fluxo de Ar em Armazéns Graneleiros**. 2018. Tese (Doutorado) – Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul, Íjuí–RS, Brazil. Citado 1 vez na página 27.
- FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. 3rd. New York: Springer, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 47, 48.
- 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 35, 67.
- FORTUNA, A. O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: conceitos básicos e aplicações**. 2nd. São Paulo: Edusp, 2000. 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. Citado 2 vezes nas páginas 53, 107.
- GREENBERG, M. D. **Advanced engineering mathematics**. 2nd. New Jersey: Pearson, 1998. Citado 1 vez na página 51.
- HAN, G.; WANG, R. Richardson extrapolation of iterated discrete Galerkin solution for two-dimensional Fredholm integral equations. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v. 139, n. 1, p. 49–63, 2002. ISSN 0377-0427. Citado 1 vez na página 44.
- HELLEVANG, K.; CASADA, M. **Chapter 12 - Grain aeration systems and storage management**. Edição: Kurt A. Rosentrater. Fifth Edition. Ames - USA: Woodhead Publishing, 2022. P. 347–370. Citado 2 vezes nas páginas 27, 28.
- HOOD, T. J. A.; THORPE, G. R. **The Effects of the Anisotropic Resistance to Air Flow on the Design of Aeration Systems for Bulk Stored Grains**. Barton, ACT: Agricultural Engineering Australia, 1992. v. 21, p. 8–23. Citado 1 vez na página 43.
- HUGHES, T. J. R. **The Finite Element Method : Linear Static And Dynamic Finite Element Analysis**. [S.l.]: Prentice-Hall, 2000. Citado 1 vez na página 28.
- 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 68.
- JAYAS, D. S.; CENKOWSKI, S. **Grain Property Values and Their Measurement**. Boca Raton: CRC Press, 2006. cap. 24. ISBN 9780429136092. Citado 1 vez nas páginas 67, 69.
- 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 1 vez na página 28.

- KHATCHATOURIAN, O. A.; SAVICKI, D. L. Mathematical modelling of airflow in an aerated soya bean store under non-uniform conditions. **Biosystems Engineering**, Elsevier, v. 88, n. 2, p. 201–211, 2004. Citado 1 vez na página 28.
- KHATCHATOURIAN, O.; TONIAZZO, N.; GORTYSHOV, Y. Simulation of airflow in grain bulks under anisotropic conditions. **Biosystems Engineering**, v. 104, n. 2, p. 205–215, 2009. ISSN 1537-5110. Citado 2 vezes nas páginas 43, 44.
- KHATCHATOURIAN, O. A.; BINELO, M. O.; NEUTZLING, R.; FAORO, V. Models to predict the thermal state of rice stored in aerated vertical silos. **Biosystems Engineering**, v. 161, p. 14–23, 2017. ISSN 1537-5110. Citado 0 vez na página 50.
- KNOB, A. H. **Aplicação do Processamento de Imagens Digitais para Análise da Anisotropia da Massa de Grãos**. 2010. Diss. (Mestrado) – Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul, Íjuí-RS, Brazil. Citado 1 vez na página 43.
- KOLDITZ, O. Finite Volume Method. In: **COMPUTATIONAL Methods in Environmental Fluid Mechanics**. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2002. P. 173–190. Citado 1 vez na página 49.
- KWIATKOWSKI JR., J. E. **Simulation and Control of the Aeration System for Soybeans Mass (in portuguese)**. 2011. Diss. (Mestrado) – Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul, Íjuí-RS, Brazil. Citado 12 vezes nas páginas 32, 34, 41, 42, 66, 69, 85, 152.
- LAX, P.; WENDROFF, B. Systems of conservation laws. **Communications on Pure and Applied Mathematics**, v. 13, p. 217, 1960. Citado 1 vez na página 54.
- LEITH, C. E. Numerical simulation of the earth's atmosphere. **Methods in Computational Physics**, v. 4, p. 1–28, 1965. Cited by: 97. Citado 2 vezes nas páginas 78, 79.
- LIMA, P. M. Richardson extrapolation in boundary value problems for differential equations with nonregular right-hand side. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, Elsevier, v. 50, n. 1-3, p. 385–400, 1994. Citado 1 vez na página 44.
- 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 1 vez na página 28.
- LOPES, D. C. **Simulação e controle em tempo real para sistemas de aeração de grão**. 2006. Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Viçosa, Viçosa-MG. Citado 5 vezes nas páginas 27, 28, 31, 33, 41.

- 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**, v. 42, n. 1, p. 115–120, 2006. Citado 14 vezes nas páginas 27, 32, 34, 41, 42, 66, 68, 69, 85.
- LOPES, D. C.; STEIDLE NETO, A. J.; SANTIAGO, J. K. Comparison of equilibrium and logarithmic models for grain drying. **Biosystems Engineering**, v. 118, n. 1, p. 105–114, 2014. Citado 2 vez na página 41.
- 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 32, 41, 42.
- MACCORMACK, R.; PAULLAY, A. Computational efficiency achieved by time splitting of finite difference operators. In: 10. 10TH aerospace sciences meeting. California - USA: NASA, 1972. P. 154. Citado 1 vez na página 49.
- MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacionais**. 2nd Edição rev. e ampliada. Rio de Janeiro: LTC, 2017. Citado 9 vezes nas páginas 28, 29, 50–52, 74, 75.
- MARCHI, C. H. **Verificação de Soluções Numéricas Unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos**. 2001. Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Santa Catarina. Citado 8 vezes nas páginas 30, 47–49, 62, 65, 117.
- MARCHI, C. H.; ARAKI, L. K.; ALVES, A. C.; SUERO, R.; GONÇALVES, S. F. T.; PINTO, M. A. V. Repeated Richardson extrapolation applied to the two-dimensional Laplace equation using triangular and square grids. **Applied Mathematical Modelling**, v. 37, n. 7, p. 4661–4675, 2013. ISSN 0307-904X. Citado 1 vez na página 45.
- MARCHI, C. H.; GERMER, E. M. Effect of Ten CFD Numerical Schemes on Repeated Richardson Extrapolation (RRE). **Journal of Applied & Computational Mathematics**, v. 2, n. 128, p. 1–8, 2013. Citado 1 vez na página 45.
- MARCHI, C. H.; MARTINS, M. A.; NOVAK, L. A.; ARAKI, L. K.; PINTO, M. A. V.; GONÇALVES, S. F. T.; MORO, D. F.; FREITAS, I. S. Polynomial interpolation with repeated Richardson extrapolation to reduce discretization error in CFD. **Applied Mathematical Modelling**, v. 40, p. 8872–8885, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 46, 60.
- MARCHI, C. H.; NOVAK, L. A.; SANTIAGO, C. D. Múltiplas extrapolações de Richardson para reduzir e estimar o erro de discretização da equação de Laplace 2D. **Proceedings of the XXIX Iberian Latin American Congress on the Computational Methods in Engineering (CILAMCE)**, Maceió, Brazil, 2008. Citado 3 vezes nas páginas 59, 62.

MARCHI, C. H.; NOVAK, L. A.; SANTIAGO, C. D.; VARGAS, A. P. S. Highly accurate numerical solutions with repeated richardson extrapolation for 2d laplace equation. **Applied Mathematical Modelling**, v. 37, p. 7386–7397, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 31, 45.

MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Unidimensional numerical solution error estimation for convergent apparent order. **Numerical Heat Transfer: Part B: Fundamentals**, Taylor & Francis, v. 42, n. 2, p. 167–188, 2002. Citado 1 vez na página 63.

MARCHI, C. H.; SUERO, R.; ARAKI, L. K. The lid-driven square cavity flow: numerical solution with a 1024 x 1024 grid. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, FapUNIFESP (SciELO)**, v. 31, 2009. Citado 1 vez na página 61.

MARTINS, M. A. **Multiextrapolação de Richardson com Interpolação para Reduzir e Estimar o Erro de Discretização em CFD**. 2013. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba. Citado 17 vezes nas páginas 31, 32, 44–47, 58–62, 64.

MCDONALD, P. W. **The computation of transonic flow through two-dimensional gas turbine cascades**. USA: American Society of Mechanical Engineers, 1971. v. 79825. Citado 1 vez na página 49.

MONTERO, R. S.; LLORENTE, I. M.; SALAS, M. D. Robust Multigrid Algorithms for the Navier–Stokes Equations. **Journal of Computational Physics**, v. 173, n. 2, p. 412–432, 2001. ISSN 0021-9991. Citado 1 vez na página 30.

MUIR, W. E.; JAYAS, D. S. Temperatures of stored grains and oilseeds. **National Science Programs**, 2003. Citado 1 vez na página 157.

MUIR, W.; FRASER, B.; SINHA, R. Simulation model of two-dimensional heat transfer in controlled-atmosphere grain bins. Elsevier, v. 1, p. 385–398, 1980. Citado 2 vezes nas páginas 28, 39.

NATIVIDAD, M. C.; STYNES, M. Richardson extrapolation for a convection–diffusion problem using a Shishkin mesh. **Applied Numerical Mathematics**, v. 45, n. 2, p. 315–329, 2003. ISSN 0168-9274. Citado 1 vez na página 45.

NAVARRO, S.; NOYES, R. T. **The mechanics and physics of modern grain aeration management**. USA: CRC Press, 2001. ISBN 0-8493-1355-4. Citado 10 vezes nas páginas 32–35, 67, 68, 70, 157.

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 1 vez na página 28.

OLIVEIRA, F. **Efeito de malhas anisotrópicas bidimensionais sobre o desempenho do método multigrid geométrico**. 2010. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba. Citado 2 vez na página 56.

- OLIVEIRA, F.; KHATCHATOURIAN, O. A.; BILHAIN, A. Thermal status of products stored in silos with aeration system: a theoretical and experimental study (*in Portuguese*). **Engenharia Agrícola**, v. 27, p. 247–258, 2007. Citado 5 vezes nas páginas 41, 69, 71, 86.
- 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, Curitiba. Citado 1 vez na página 55.
- OLIVEIRA, R. P.; GREGO, C. R.; BRANDÃO, C. N. **Geoestatística aplicada na agricultura de precisão utilizando o Vesper**. Brasília - BR: Ministério da Agricultura, 2015. v. 1, p. 159. Citado 2 vezes nas páginas 30, 56.
- 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**, v. 179, 2020. ISSN 0168-1699. Citado 2 vezes nas páginas 27, 33, 39.
- 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 0 vez na página 67.
- PEREIRA, J. A. M. **Grain Aeration: Fundamentals and Management (in portuguese)**. Brazil: Viçosa-MG: Cetreinar, 1995. Citado 3 vezes nas páginas 28, 34, 35.
- PFOST, H. B.; REGIFO, G. E.; SAUER, D. B. **High temperature, high humidity grain storage**. [S.l.]: ASAE, St. Joseph, MI, 1976. P. 76–3520. Citado 1 vez nas páginas 68, 69.
- PINTO, M. A. V. **Comportamento do Multigrid Geométrico em Problemas de Transferência de Calor**. 2006. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba. Citado 1 vez na página 107.
- PUZZI, D. **Manual de armazenamento de grãos. Armazenagem e silos**. agronomica ceres. Campinas - SP: Woodhead Publishing, 1977. Citado 2 vez na página 35.
- 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 41, 66, 69, 85.
- RAHUL, K.; BHATTACHARYYA, S. N. One-sided finite-difference approximations suitable for use with Richardson extrapolation. **Journal of Computational Physics**, v. 219, p. 13–20, 2006. Citado 1 vez na página 45.

RICE, P. A.; FONTUGNE, D. J.; LATINI, R. G.; BARDUHN, A. J. Anisotropic permeability in porous media. **Industrial & Engineering Chemistry**, ACS Publications, v. 62, n. 6, p. 23–31, 1970. Citado 1 vez na página 42.

RICHARDSON, L. F. The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a Masonry Dam. **Philosophical Proceedings of the Royal Society of London**, Series A, p. 307–357, 1910. Citado 1 vez na página 44.

RICHARDSON, L. F.; GAUNT, J. A. The deferred approach to the limit. **Philosophical Proceedings of the Royal Society of London**, Series A, v. 226, n. 1, p. 299–361, 1927. Citado 4 vezes nas páginas 31, 44, 58.

RIGONI, D. **VERIFICAÇÃO E ANÁLISE DE ERROS DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE AERAÇÃO DA MASSA DE GRÃOS UTILIZANDO O MÉTODO DAS SOLUÇÕES FABRICADAS**. 2022. Diss. (Mestrado) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba. Citado 3 vezes nas páginas 68, 69, 75.

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 1 vez na página 41.

RIGONI, D.; PINTO, M. A. V.; 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**, U, 2021. Citado 3 vezes nas páginas 42, 85, 86.

_____. Verification and error analysis for the simulation of the grain mass aeration process using the method of manufactured solutions. **Biosystems Engineering**, v. 223, p. 149–160, 2022. ISSN 1537-5110. Citado 25 vezes nas páginas 31, 32, 41, 42, 53, 54, 66, 68, 69, 71, 75, 78, 79, 82, 84–86, 89, 91.

ROACHE, P. J. **Fundamentals of Computational Fluid Dynamics**. Toronto-CA: Hermosa Publishers, 1998. ISBN 9780913478097. Citado 2 vezes nas páginas 47, 48.

_____. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies, 1994. Citado 1 vez na página 112.

RODRIGUES, S.; PINTO, M. A. V.; MARTINS, M. A.; FRANCO, S. R. Reducing the discretization error for a poroelasticity problem in variables having extreme values. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, Springer, v. 37, n. 1, p. 44–147, 2022. Citado 1 vez na página 31.

- ROY, C. J.; BLOTTNER, F. G. Review and assessment of turbulence models for hypersonic flows. **Progress in Aerospace Sciences**, Elsevier, v. 42, n. 7-8, p. 469–530, 2006. Citado 1 vez na página 30.
- ROY, C. J.; OBERKAMPF, W. L. A comprehensive framework for verification, validation, and uncertainty quantification in scientific computing. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, Elsevier, v. 200, n. 25-28, p. 2131–2144, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 30, 32.
- ROY, J. C. Review of code and solution verification procedures for computational simulation. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 205, n. 1, p. 131–156, 2005. Citado 1 vez na página 31.
- SANTIAGO, C. D. **Estudo de Parâmetros do Método Multigrid para Sistemas de Equações 2D em CFD**. 2010. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba. Citado 1 vezes nas páginas 28, 29.
- SIDI, A. **Practical extrapolation methods: Theory and applications**. Cambridge - UK: Cambridge University Press, 2003. v. 10. Citado 1 vez na página 58.
- SILVA, J. S.; LACERDA FILHO, A. F.; DEVILLA, I. A. **Aeração de grãos armazenados**. Edição: J. S. SILVA. Viçosa – MG: Editora Aprenda Fácil, 2000. Citado 2 vezes nas páginas 32, 34.
- SINICIO, R.; MUIR, W. Fluxos de ar e métodos de controle do ventilador recomendados para aerar trigo armazenado no Brasil. **Revista Brasileira de Armazenamento**, v. 20, 1 e 2, p. 03–17, 1995. Citado 1 vez na página 36.
- SULEIMAN, R. A.; ROSENTRATER, K. A. Chapter 5 - Grain storage in developing countries. In: **Storage of Cereal Grains and Their Products**. Edição: Kurt A. Rosentrater. Fifth Edition. Ames - USA: Woodhead Publishing, 2022. P. 113–133. Citado 1 vez na página 27.
- TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. **Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer**. Washington - USA: Taylor & Francis, 1997. v. 2. Citado 2 vezes nas páginas 28, 80.
- 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 55.
- 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 28, 39, 42, 67.
- THOMPSON, T. L.; PEART, R. M.; FOSTER, G. H. 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 39.

THORPE, G. R. Ambient Air Properties in Aeration. In: *THE Mechanics and Physics of Modern Grain Aeration Management*. Boca Raton - USA: CRC Press, 2001. cap. 3, p. 79–120. Citado 7 vezes nas páginas 32, 68, 69, 82, 152–154.

_____. Modelling ecosystems in ventilated conical bottomed farm grain silos. **Ecological Modelling**, v. 94, n. 2, p. 255–286, 1997. ISSN 0304–3800. Citado 2 vezes nas páginas 40, 41.

_____. On the rate of cooling of aerated food grains. **Biosystems Engineering**, v. 222, p. 106–116, 2022. ISSN 1537-5110. Citado 1 vez na página 39.

_____. Physical basic of aeration. In: **S. Navarro, R. T. Noyes, The Mechanics and Physics of Modern Grain Aeration Management**, v. 1, n. 1, p. 125–185, 2001. Citado 21 vezes nas páginas 28, 31, 32, 37, 38, 41, 42, 46, 53, 66, 69, 70, 88, 126.

THORPE, G. R.; CUFF, W. R.; LONGSTAFF, B. C. Control of *Sitophilus oryzae* infestation of stored wheat: An ecosystem model of the use of aeration. **Ecological Modelling**, v. 15, n. 4, p. 331–351, 1982. ISSN 0304-3800. Citado 1 vez na página 40.

THORPE, G. R.; ELDER, W. B. Modelling the effects of aeration on the persistence of chemical pesticides applied to stored bulk grain. **Journal of Stored Products Research**, v. 18, n. 3, p. 103–114, 1982. ISSN 0022-474X. Citado 1 vez na página 40.

THORPE, G. R.; HUNTER, A. J. Expressions for pressure and velocity distributions in non-uniformly aerated grain bulks. **Journal of Agricultural Engineering Research**, v. 22, n. 1, p. 27–35, 1977. ISSN 0021-8634. Citado 1 vez na página 39.

THORPE, G. R.; STOKES, A. N.; WILSON, S. G. The integral heat of wetting of food grains. **Journal of Agricultural Engineering Research**, v. 46, p. 71–76, 1990. ISSN 0021-8634. Citado 1 vez na página 40.

THORPE, G. R.; TAPIA, J. A. O.; WHITAKER, S. The diffusion of moisture in food grains—I. The development of a mass transport equation. **Journal of Stored Products Research**, v. 27, n. 1, p. 1–9, 1991. ISSN 0022-474X. Citado 1 vez na página 40.

_____. The diffusion of moisture in food grains—II. Estimation of the effective diffusivity. **Journal of Stored Products Research**, v. 27, n. 1, p. 11–30, 1991. ISSN 0022-474X. Citado 1 vez na página 40.

TOZINNI, F. **Estudo do escoamento do ar em massa de grãos sob condições anisotrópicas**. 2010. Diss. (Mestrado) – Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul, Íjuí–RS, Brazil. Citado 3 vezes nas páginas 43, 66.

TRYGGVASON, G. *Computational Fluid Dynamics*, 2017. Citado 2 vez na página 54.

VAN GENUCHTEN, M.; SERVICE, U. S. A. R.; ALVES, W. **Analytical Solutions of the One-dimensional Convective-dispersive Solute Transport Equation**. Riverside - USA: Department of Agriculture, Agricultural Research Service, 1982. Citado 3 vezes nas páginas 71, 82.

- VASCONCELLOS, M. B. T. de. **Modelagem Matemática do Escoamento do Ar em Meio Particulado em Condições Não Homogêneas e Anisotrópica**. 2012. Diss. (Mestrado) – Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul, Ijuí–RS, Brazil. Citado 1 vez na página 44.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method**. 2. ed. New York - USA: Pearson education, 2007. 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 31, 42, 53.
- WEBER, É. A. **Exelência em beneficiamento e armazenagem de grãos**. Panambi - RS: Salles, 2005. Citado 1 vez na página 33.
- ZESHENG, Z.; LING, S. A Model for Aeration Management of Stored Grain Based on Bayesian Network. **IFAC Proceedings Volumes**, v. 30, n. 5, p. 93–98, 1997. IMACS/IFAC 2nd International Symposium on mathematical Modelling and Simulation in Agricultural and Bio-Industries, Budapest, Hungary, 7-9 May. ISSN 1474-6670. Citado 2 vezes nas páginas 32, 39.
- ZHU, J.; ZIENKIEWICZ, O. Superconvergence recovery technique and a posteriori error estimators. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, Wiley Online Library, v. 30, n. 7, p. 1321–1339, 1990. Citado 1 vez na página 64.

APÊNDICES

APÊNDICE A –

A.1 TEMPO DE CPU EM RELAÇÃO AS RAZÕES ESPAÇO-TEMPO $\tau = 2, 4, 8, 16, 32$ E 64

TABELA 28 – TEMPO DE CPU EM RELAÇÃO À τ PARA O MÉTODO CDS-CN.

N_y	$\tau = 2$	$\tau = 4$	$\tau = 8$	$\tau = 16$	$\tau = 32$	$\tau = 64$
8	1,562E-02	1,562E-02	4,688E-02	1,406E-01	2,500E-01	5,625E-01
16	3,125E-02	4,688E-02	9,375E-02	5,625E-01	9,375E-01	2,172E+00
32	1,094E-01	2,188E-01	4,062E-01	1,906E+00	3,547E+00	7,453E+00
64	4,062E-01	8,594E-01	1,609E+00	7,359E+00	1,391E+01	2,759E+01
128	1,766E+00	3,453E+00	6,922E+00	2,792E+01	5,397E+01	1,078E+02
256	6,781E+00	1,386E+01	2,767E+01	1,065E+02	2,120E+02	4,245E+02
512	2,745E+01	5,500E+01	1,101E+02	4,386E+02	8,446E+02	1,696E+03
1024	1,111E+02	2,197E+02	4,383E+02	1,688E+03	3,370E+03	-
2048	4,498E+02	7,985E+02	1,755E+03	-	-	-
4096	1,821E+03	-	-	-	-	-

FONTE: O autor (2023).

TABELA 29 – TEMPO DE CPU EM RELAÇÃO À τ PARA O MÉTODO LS.

N_y	$\tau = 2$	$\tau = 4$	$\tau = 8$	$\tau = 16$	$\tau = 32$	$\tau = 64$
8	7,812E-03	3,125E-02	1,562E-02	4,688E-02	6,250E-02	1,719E-01
16	1,562E-02	3,125E-02	7,812E-02	1,406E-01	2,500E-01	4,688E-01
32	3,125E-02	1,562E-01	2,656E-01	5,156E-01	8,594E-01	1,922E+00
64	2,656E-01	4,219E-01	1,078E+00	1,969E+00	4,266E+00	8,719E+00
128	1,078E+00	1,906E+00	4,250E+00	8,656E+00	1,742E+01	3,544E+01
256	4,469E+00	8,609E+00	1,780E+01	3,492E+01	7,036E+01	1,413E+02
512	1,772E+01	3,450E+01	7,089E+01	1,398E+02	2,806E+02	5,607E+02
1024	7,044E+01	1,408E+02	2,826E+02	5,595E+02	1,119E+03	2,237E+03
2048	2,553E+02	5,630E+02	1,119E+03	2,245E+03	4,487E+03	8,848E+03
4096	1,122E+03	2,217E+03	4,479E+03	8,932E+03	1,785E+04	-
8192	4,433E+03	8,855E+03	1,758E+04	-	-	-
16384	1,756E+04	-	-	-	-	-

FONTE: O autor (2023).

TABELA 30 – TEMPO DE CPU EM RELAÇÃO À τ PARA O MÉTODO UDS-CN.

N_y	$\tau = 2$	$\tau = 4$	$\tau = 8$	$\tau = 16$	$\tau = 32$	$\tau = 64$
8	1,562E-02	1,562E-02	1,562E-02	1,250E-01	2,188E-01	6,094E-01
16	3,125E-02	6,250E-02	1,094E-01	4,375E-01	9,375E-01	1,938E+00
32	1,094E-01	2,031E-01	4,219E-01	1,797E+00	3,438E+00	7,297E+00
64	4,375E-01	8,750E-01	1,750E+00	6,734E+00	1,356E+01	2,695E+01
128	1,734E+00	3,375E+00	6,797E+00	2,650E+01	5,289E+01	1,062E+02
256	6,750E+00	1,361E+01	2,742E+01	1,054E+02	2,102E+02	4,203E+02
512	2,616E+01	5,462E+01	1,077E+02	4,196E+02	8,380E+02	1,680E+03
1024	1,082E+02	2,171E+02	4,301E+02	1,677E+03	3,353E+03	7,127E+03
2048	4,242E+02	8,668E+02	1,733E+03	7,201E+03	1,480E+04	2,957E+04
4096	1,709E+03	3,467E+03	6,984E+03	2,901E+04	5,974E+04	-
8192	6,883E+03	1,386E+04	2,814E+04	-	-	-
16384	2,772E+04	-	-	-	-	-

FONTE: O autor (2023).

TABELA 31 – TEMPO DE CPU EM RELAÇÃO À τ PARA O MÉTODO UDS-EXPLÍCITO.

N_y	$\tau = 2$	$\tau = 4$	$\tau = 8$	$\tau = 16$	$\tau = 32$	$\tau = 64$
8	1,562E-02	3,125E-02	4,688E-02	3,125E-02	6,250E-02	1,406E-01
16	7,813E-02	1,406E-01	2,656E-01	9,375E-02	2,969E-01	4,844E-01
32	2,187E-01	4,375E-01	9,844E-01	5,312E-01	8,281E-01	2,031E+00
64	9,219E-01	1,703E+00	3,312E+00	2,109E+00	3,984E+00	8,359E+00
128	3,344E+00	6,609E+00	1,319E+01	8,609E+00	1,686E+01	3,391E+01
256	1,308E+01	2,606E+01	5,198E+01	3,406E+01	6,748E+01	1,358E+02
512	5,183E+01	1,034E+02	2,066E+02	1,368E+02	2,692E+02	5,415E+02
1024	2,069E+02	4,131E+02	8,241E+02	5,281E+02	1,076E+03	2,162E+03
2048	8,282E+02	1,648E+03	3,304E+03	2,159E+03	4,340E+03	8,594E+03
4096	3,311E+03	6,573E+03	1,318E+04	8,549E+03	1,716E+04	-
8192	1,324E+04	2,621E+04	5,258E+04	-	-	-
16384	5,281E+04	-	-	-	-	-

FONTE: O autor (2023).

TABELA 32 – TEMPO DE CPU EM RELAÇÃO À τ PARA O MÉTODO UDS-IMPLÍCITO.

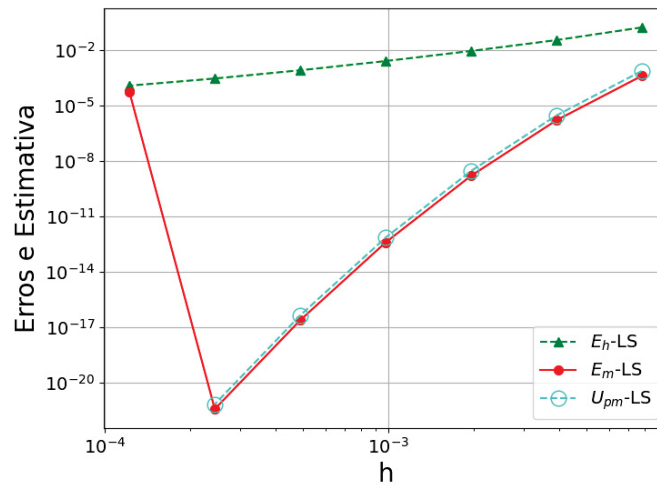
N_y	$\tau = 2$	$\tau = 4$	$\tau = 8$	$\tau = 16$	$\tau = 32$	$\tau = 64$
8	1,562E-02	4,688E-02	7,812E-02	1,562E-02	6,250E-02	1,562E-01
16	4,688E-02	1,094E-01	2,344E-01	7,812E-02	2,969E-01	5,000E-01
32	2,344E-01	4,062E-01	9,375E-01	5,000E-01	7,969E-01	1,859E+00
64	8,750E-01	1,781E+00	3,391E+00	2,062E+00	3,906E+00	8,516E+00
128	3,422E+00	6,922E+00	1,322E+01	8,672E+00	1,638E+01	3,480E+01
256	1,316E+01	2,634E+01	5,227E+01	3,480E+01	6,850E+01	1,381E+02
512	5,223E+01	1,045E+02	2,082E+02	1,384E+02	2,739E+02	5,512E+02
1024	2,087E+02	4,165E+02	8,335E+02	5,515E+02	1,064E+03	2,199E+03
2048	8,345E+02	1,664E+03	3,335E+03	2,186E+03	4,400E+03	8,786E+03
4096	3,345E+03	6,649E+03	1,334E+04	8,630E+03	1,743E+04	-
8192	1,341E+04	2,656E+04	5,336E+04	-	-	-
16384	5,374E+04	-	-	-	-	-

FONTE: O autor (2023).

APÊNDICE B –

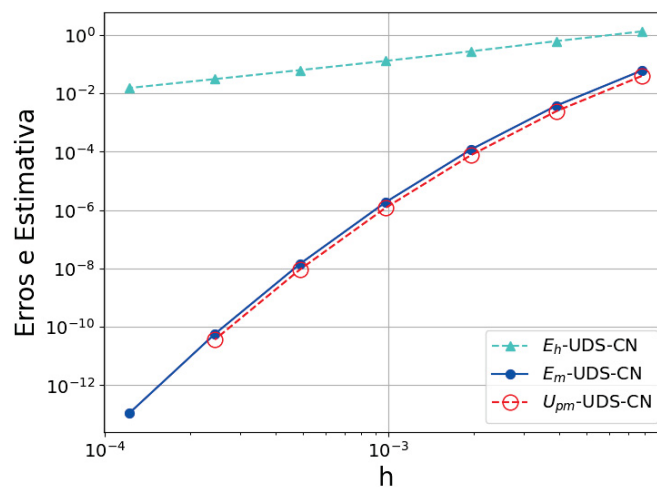
B.1 COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA DE RICHARDSON U_{pm} PARA AS RAZÕES ESPAÇO-TEMPO $\tau = 4, 8, 16$ E 32 COM OS DIVERSOS MÉTODOS

FIGURA 64 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 4$ COM LS.



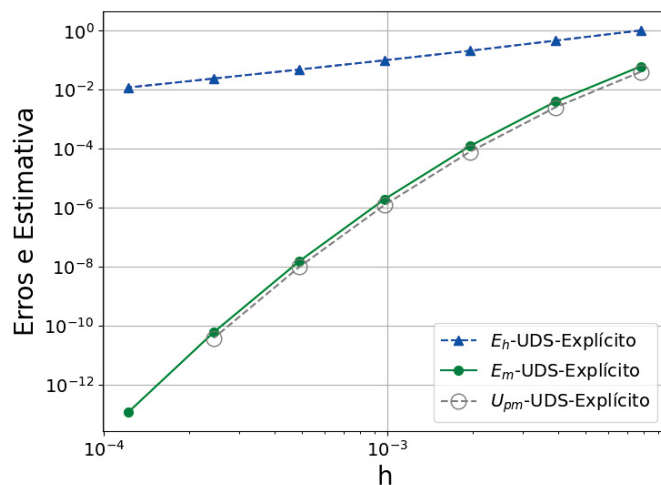
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 65 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 4$ COM UDS-CN.



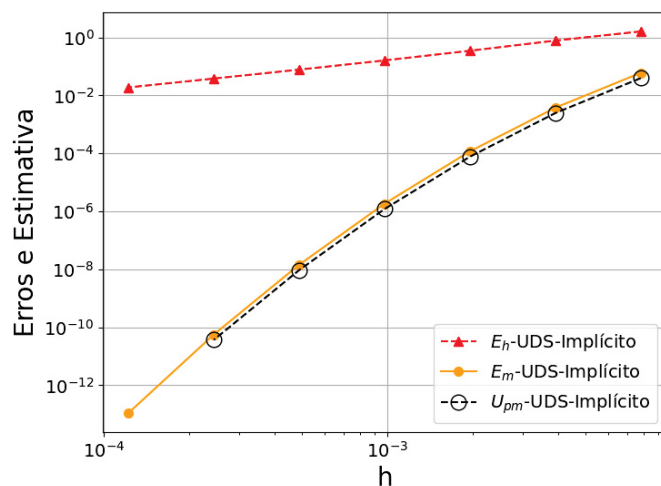
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 66 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 4$ COM UDS-EXPLÍCITO.



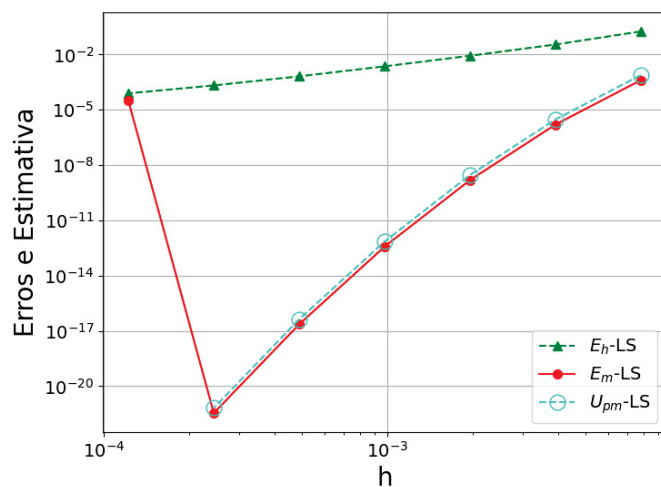
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 67 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 4$ COM UDS-IMPLÍCITO.



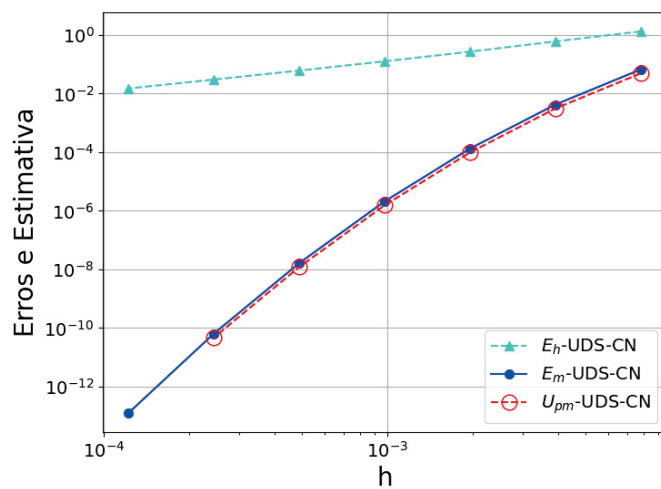
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 68 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 8$ COM LS.



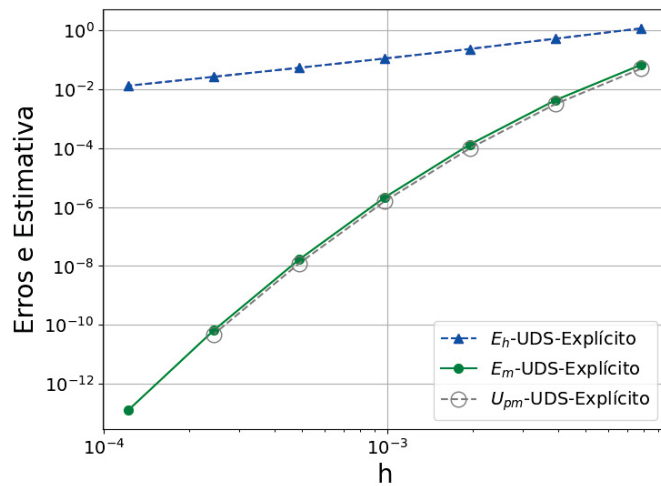
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 69 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 8$ COM UDS-CN.



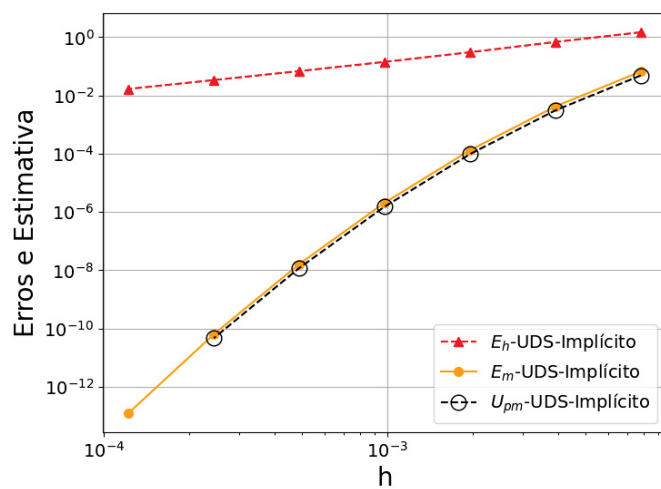
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 70 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 8$ COM UDS-EXPLÍCITO.



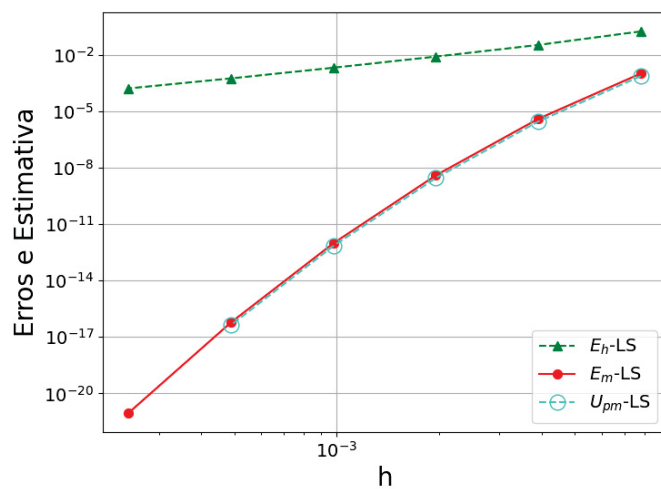
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 71 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 8$ COM UDS-IMPLÍCITO.



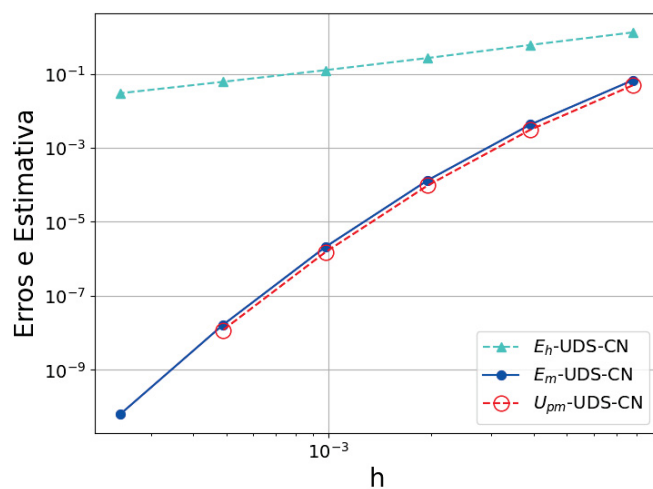
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 72 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 16$ COM LS.



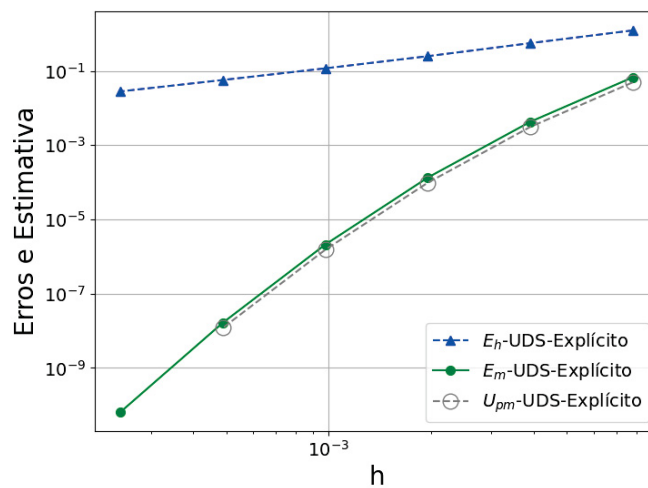
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 73 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 16$ COM UDS-CN.



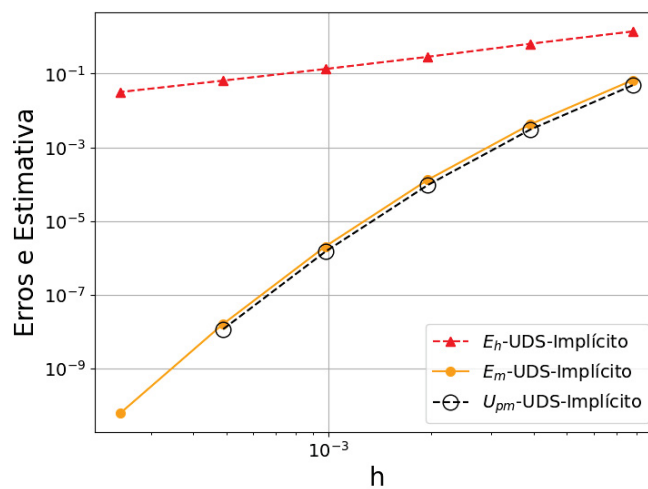
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 74 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 16$ COM UDS-EXPLÍCITO.



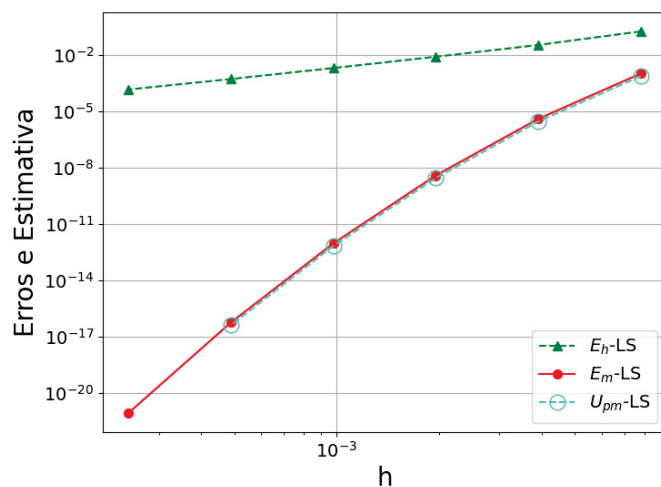
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 75 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 16$ COM UDS-IMPLÍCITO.



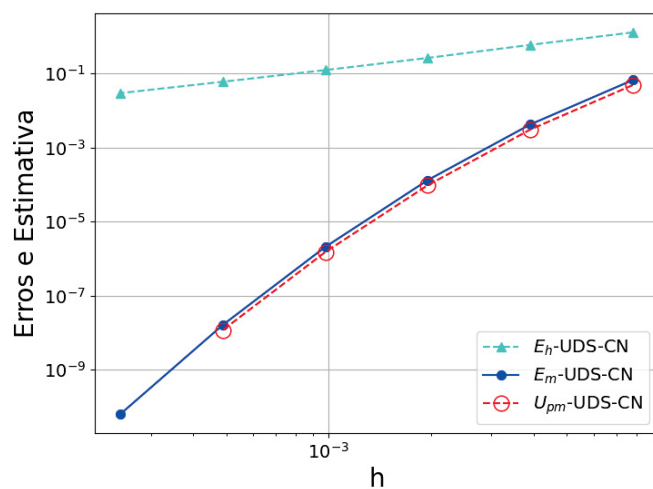
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 76 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 32$ COM LS.



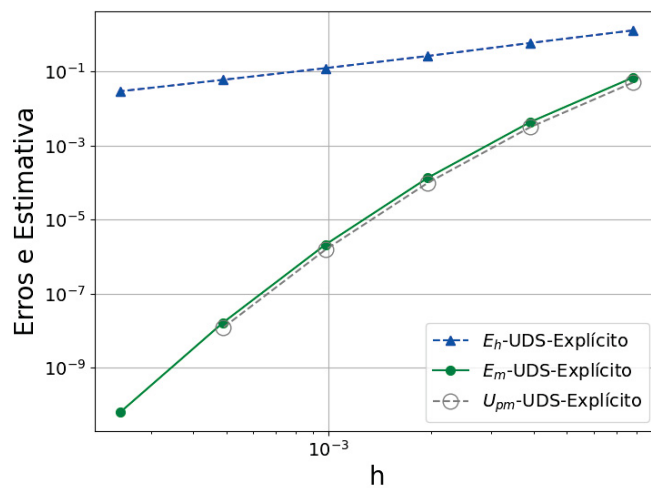
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 77 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 32$ COM UDS-CN.



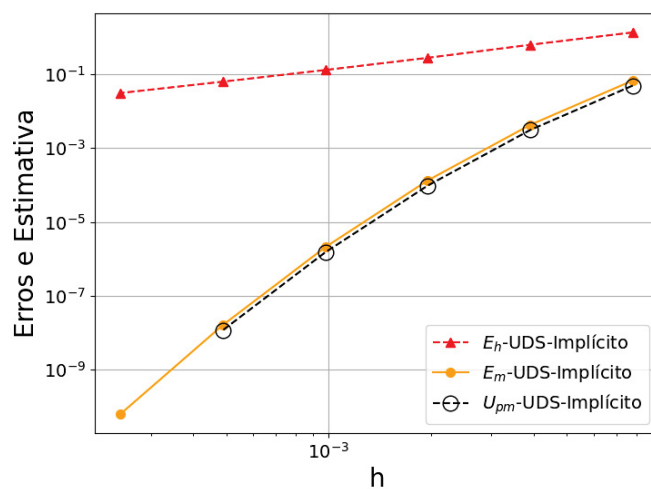
FONTE: O autor (2023).

FIGURA 78 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 32$ COM UDS-EXPLÍCITO.



FONTE: O autor (2023).

FIGURA 79 – COMPARAÇÃO ENTRE MER E A ESTIMATIVA U_{pm} PARA $\tau = 32$ COM UDS-IMPLÍCITO.



FONTE: O autor (2023).

ANEXOS

ANEXO A –

A.1 DETALHES DO MODELO MATEMÁTICO

Neste capítulo, é apresentado com detalhes o modelo matemático desenvolvido por Thorpe (2001a), utilizando a descrição apresentada por Kwiatkowski Jr. (2011).

O modelo considera as relações psicrométricas nas equações de balanço de massa e energia. Assim, considerando um volume da camada de grãos, a lei de conservação da massa de grãos implica que não há criação nem destruição da massa neste volume de controle. Sendo que a taxa na qual o ar seco entra na massa de grãos está sendo expresso por $\rho_a u_a$, onde o último termo é a velocidade do ar, e considerando um deslocamento Δy , após este deslocamento a densidade do ar e a velocidade mudam respectivamente para $\rho_a + \frac{\partial \rho_a}{\partial y} \Delta y$ e $u_a + \frac{\partial u_a}{\partial y} \Delta y$.

Sendo a taxa de massa acumulada no volume da massa de grãos igual à taxa de massa que entra neste volume menos a taxa que sai, e considerando ε a porosidade, o volume de ar no domínio (dado por $\varepsilon \cdot 1 \cdot \Delta y$) e a taxa de mudança de densidade do ar no domínio (dada por $\frac{\partial \rho_a}{\partial t}$), temos:

$$\varepsilon \frac{\partial \rho_a}{\partial t} \Delta y = \rho_a u_a - \left(u_a + \frac{\partial u_a}{\partial y} \Delta y \right) \left(\rho_a + \frac{\partial \rho_a}{\partial y} \Delta y \right), \quad (\text{A.1})$$

onde: u_a - velocidade do ar seco ($m s^{-1}$), ρ_a - massa específica do ar intergranular ($kg m^{-3}$), ε - porosidade da massa de grãos (decimal), t - tempo (s) e Δy - altura da camada (m).

Efetuando as operações elementares na Eq. (A.1) e fazendo Δy tender a zero, obtemos assim a equação de conservação da massa de ar seco fluindo em um meio poroso unidimensional, dada por

$$\varepsilon \frac{\partial \rho_a}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_a u_a)}{\partial y} = 0. \quad (\text{A.2})$$

Considerando a porosidade (ε) da massa de grãos e a densidade dos grãos (ρ_σ) constantes, o balanço da massa de conservação de massa de água (a umidade acumulada na massa de grãos) é dada por $\rho_\sigma (1 - \varepsilon) \frac{\partial U}{\partial t}$. O balanço de massa de umidade ocorre de forma análoga ao balanço do ar seco, portanto,

$$\varepsilon \frac{\partial \rho_\varphi}{\partial t} + u_\varphi \frac{\partial \rho_\varphi}{\partial y} + \rho_\varphi \frac{\partial u_\varphi}{\partial y} + \rho_\sigma (1 - \varepsilon) \frac{\partial U}{\partial t} = 0, \quad (\text{A.3})$$

onde: u_φ - velocidade de Darcy do vapor da água ($m s^{-1}$), ρ_φ - densidade do vapor da umidade do ar intersticial ($kg m^{-3}$) e ρ_σ - densidade dos grãos, ($kg m^{-3}$).

Sempre que a primeira lei da termodinâmica é aplicada a processos que envolvem fluxo, mudanças na energia potencial e cinética do ar podem, frequentemente, ser ignoradas. Considerando um sistema fechado como a aeração, e dado que nenhum trabalho é realizado pelo sistema, o balanço de energia se reduz ao balanço de entalpia (THORPE, 2001a), pois a primeira lei da termodinâmica diz que a energia total transferida para um sistema é igual à variação da sua energia interna, isto é:

$$\text{Energia interna} = \text{calor} + \text{trabalho} + \text{radiação.}$$

Quando esta variação forma um sistema fechado como da aeração da massa de grãos onde depende unicamente de dois estados o inicial e o final esta variação é dada por:

$$\text{Energia interna} = \text{calor} - \text{trabalho.}$$

A quantidade de radiação é nula pois, em sistema fechado, não se verificam absorções nem emissões de radiação. A energia interna é definida como a soma das energias cinéticas e de interação de seus constituintes. Este princípio enuncia, então, a conservação de energia.

Logo, o balanço de entalpia é expresso por:

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{\partial \rho_a h_a}{\partial t} \Delta y + \varepsilon \frac{\partial \rho_\varphi h_\vartheta}{\partial t} \Delta y + (1 - \varepsilon) \rho_\sigma \frac{\partial H}{\partial t} \Delta y = & \left(\rho_a u_a h_a + \rho_\varphi u_\varphi h_\vartheta - k_{eff} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \\ - \left(\rho_a u_a h_a + \frac{\partial \rho_a u_a h_a}{\partial y} \Delta y + \rho_\varphi u_\varphi h_\vartheta + \frac{\partial \rho_\varphi u_\varphi h_\vartheta}{\partial y} \Delta y - k_{eff} \left(\frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right) \right) \right) & \Delta y. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Aplicando a regra do produto da diferenciação na Eq. (A.4) temos,

$$\begin{aligned} (1 - \varepsilon) \rho_\sigma \frac{\partial H}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial (h_a \rho_a)}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial (h_\vartheta \rho_\varphi)}{\partial t} h_a + \frac{\partial (\rho_a u_a)}{\partial y} + \\ + \rho_a u_a \frac{\partial h_a}{\partial y} + h_\vartheta \frac{\partial (\rho_\varphi u_\varphi)}{\partial y} + \rho_\varphi u_\varphi \frac{\partial h_\vartheta}{\partial y} = k_{eff} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

onde: u_a - velocidade de Darcy do ar seco ($m s^{-1}$), u_φ - velocidade de Darcy do vapor da água ($m s^{-1}$), ρ_a - densidade do ar seco ($kg m^{-3}$), ρ_φ - densidade do vapor da umidade do ar intersticial ($kg m^{-3}$), ρ_σ - densidade dos grãos ($kg m^{-3}$), h_a - entalpia específica do ar seco ($J kg^{-1}$), h_ϑ - entalpia específica da umidade ($J kg^{-1}$), H - entalpia específica dos grãos úmidos ($J kg^{-1}$), T - temperatura dos grãos ($^{\circ}C$), k_{eff} - condutividade térmica da massa de grãos ($W m^{-1} s^{-1}$), ε - porosidade da massa de grãos (decimal), t - tempo (s) e Δy - altura da camada (m).

Multiplicando a entalpia do ar seco (h_a) pela Eq. (A.2) do balanço da massa de ar seco, e fazendo o produto entre a Eq. (A.3) do balanço de massa da umidade pela entalpia da umidade (h_{ϑ}), temos, respectivamente as Eqs. (A.6) e (A.7):

$$\varepsilon h_a \frac{\partial \rho_a}{\partial t} + h_a \frac{\partial(\rho_a u_a)}{\partial y} = 0 \quad (\text{A.6})$$

e

$$\varepsilon h_{\vartheta} \frac{\partial \rho_{\varphi}}{\partial t} + h_{\vartheta} u_{\varphi} \frac{\partial \rho_{\varphi}}{\partial y} + h_{\vartheta} \rho_{\varphi} \frac{\partial u_{\varphi}}{\partial y} = -h_{\vartheta} \rho_{\sigma} (1 - \varepsilon) \frac{\partial U}{\partial t}. \quad (\text{A.7})$$

Substituindo as Eqs. (A.6) e (A.7) na Eq. (A.5) de balanço de entalpia, obtemos:

$$\rho_{\sigma} (1 - \varepsilon) \frac{\partial H}{\partial t} + \varepsilon \rho_a \frac{\partial h_a}{\partial t} + \varepsilon \rho_{\varphi} \frac{\partial h_{\vartheta}}{\partial t} + \rho_a u_a \frac{\partial h_a}{\partial y} + \rho_{\varphi} u_{\varphi} \frac{\partial h_{\vartheta}}{\partial y} - \rho_{\sigma} h_{\vartheta} (1 - \varepsilon) \frac{\partial U}{\partial t} = k_{eff} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}. \quad (\text{A.8})$$

Segundo Thorpe (2001a), a entalpia específica dos grãos úmidos, é dada por

$$H = h_{\sigma}^{\circ} + c_{\sigma} (T - T^{\circ}) + U \left[h_{\vartheta}^{\circ} + c_W (T - T^{\circ}) \right] + H_W, \quad (\text{A.9})$$

onde: H - entalpia específica dos grãos úmidos (Jkg^{-1}), H_W - calor de umedecimento dos grãos (Jkg^{-1}), U - teor de água da massa de grãos (*b.s.*), T - temperatura dos grãos $^{\circ}C$; T° - temperatura de referência ($0^{\circ}C$), h_{σ}° - entalpia específica dos grãos na temperatura de referência (Jkg^{-1}), h_{ϑ}° - entalpia específica da umidade na temperatura de referência, (Jkg^{-1}), c_{σ} - calor específico dos grãos ($Jkg^{-1}^{\circ}C$) e c_W - calor específico do vapor da água ($Jkg^{-1}^{\circ}C$).

Diferenciando a Eq. (A.9) obtemos o calor de umedecimento dos grãos e logo após, aplicando as propriedades de integração no intervalo $[0, U]$ e substituindo na Eq. (A.9), temos:

$$\frac{\partial H}{\partial U} = h_{\vartheta}^{\circ} + c_W (T - T^{\circ}) + h_W, \quad (\text{A.10})$$

sendo: h_W - entalpia específica do vapor de água ($Jkg^{-1}^{\circ}C$).

Diferenciando a Eq. (A.9) em relação à temperatura, obtemos:

$$\frac{\partial H}{\partial T} = c_{\sigma} + c_W U + \frac{\partial H_W}{\partial T}. \quad (\text{A.11})$$

Utilizando as Eqs. (A.10) e (A.11) em

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (\text{A.12})$$

temos,

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \left(h_{\vartheta}^{\circ} + c_W (T - T^{\circ}) + h_W \right) \frac{\partial U}{\partial t} + \left(c_{\sigma} + c_W U + \frac{\partial H_W}{\partial T} \right) \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (\text{A.13})$$

Em substâncias como o ar, que não há mudança de fase indiferente da temperatura em condições atmosféricas normais, a entalpia específica por unidade de massa é,

$$h_a = h^o + c_a(T - T^o), \quad (\text{A.14})$$

onde: h_a - entalpia específica do ar (Jkg^{-1}), T - temperatura dos grãos ($^{\circ}C$), T^o - temperatura de referência ($0^{\circ}C$), h^o - entalpia específica do ar na temperatura de referência (Jkg^{-1}) e c_a - calor específico do ar ($Jkg^{-1}^{\circ}C$).

Assumindo que o calor específico do ar e do vapor de água são constantes, diferenciando a Eq. (A.14), obtemos,

$$\frac{\partial h_a}{\partial t} = c_a \frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{A.15})$$

e

$$\frac{\partial h_a}{\partial y} = c_a \frac{\partial T}{\partial y}. \quad (\text{A.16})$$

A equação que define a entalpia específica do vapor de água, é dada por

$$h_W = h_W^o + c_W(T - T_W^o) + h_{\varphi}, \quad (\text{A.17})$$

onde: h_W - entalpia específica do vapor da água (Jkg^{-1}), T - temperatura dos grãos ($^{\circ}C$), T_W^o - temperatura de referência ($0^{\circ}C$) com relação ao vapor de água nos grãos ($^{\circ}C$), h_W^o - entalpia específica da água na temperatura de referência T_W^o (Jkg^{-1}), c_W - calor específico da água, ($Jkg^{-1}^{\circ}C$) e h_{φ} - entalpia específica de vaporização da água (Jkg^{-1}).

Aplicando a regra da cadeia da derivação na Eq. (A.17), mas para isto deixaremos claro que a entalpia específica de vaporização da água é uma função que depende somente da temperatura, logo podemos aplicar tal regra. Assim, teremos

$$\frac{\partial h_{\varphi}}{\partial t} = c_W \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{A.18})$$

e

$$\frac{\partial h_{\varphi}}{\partial y} = c_W \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial y}. \quad (\text{A.19})$$

Substituindo as Eqs. (A.13), (A.15), (A.16), (A.18) e (A.19) na Eq. (A.8), temos

$$\begin{aligned} & \rho_{\sigma}(1 - \varepsilon) \left[\left(h_{\vartheta}^o + c_W(T - T^o) + h_W \right) \frac{\partial U}{\partial t} + \left(c_{\sigma} + c_W U + \frac{\partial H_W}{\partial T} \right) \frac{\partial T}{\partial t} \right] + \\ & + \varepsilon \rho_a c_a \frac{\partial T}{\partial t} + \varepsilon \rho_{\varphi} \left(c_W \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \right) + \rho_a u_a c_a \frac{\partial T}{\partial y} + \rho_{\varphi} u_{\varphi} \left(c_W \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \\ & - \rho_{\sigma} h_{\vartheta}(1 - \varepsilon) \frac{\partial U}{\partial t} = k_{eff} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Assim reescrevendo a Eq. (A.8) do balanço de entalpia, teremos a expressão

$$\begin{aligned} & \rho_{\sigma}(1 - \varepsilon) \left[h_{\vartheta}^{\circ} + c_W(T - T^{\circ}) + h_W \right] \frac{\partial U}{\partial t} + \rho_{\sigma}(1 - \varepsilon) \left[c_{\sigma} + c_W U + \frac{\partial H_W}{\partial T} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \\ & + \varepsilon \left[\rho_a c_a + \rho_{\varphi} c_W + \rho_{\varphi} \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \left[\rho_a u_a c_a + \rho_{\varphi} u_{\varphi} c_W + \rho_{\varphi} u_{\varphi} \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T} \right] \frac{\partial T}{\partial y} + \quad (A.21) \\ & - \rho_{\sigma}(1 - \varepsilon) \left[h_{\vartheta}^{\circ} + c_W(T - T^{\circ}) + h_W \right] \frac{\partial U}{\partial t} = k_{eff} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}. \end{aligned}$$

Considerando as velocidades do vapor da água (u_{φ}) e do ar seco (u_a) iguais. Já a umidade do ar (R) nos poros intergranulares, pode ser aproximada por

$$R = \frac{\rho_{\varphi}}{\rho_a}. \quad (A.22)$$

Reescrevendo a Eq. (A.21) por meio das Eqs. (A.6) e (A.7) e substituindo $u_a \rho_a$ por f_a , obteremos

$$\begin{aligned} & \rho_{\sigma}(1 - \varepsilon) \left[c_{\sigma} + c_W U + \frac{\partial H_W}{\partial T} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \varepsilon \rho_{\sigma} \left[c_a + R \left(c_W + \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T} \right) \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \quad (A.23) \\ & - \rho_{\sigma}(1 - \varepsilon) h_s \frac{\partial U}{\partial t} + f_a \left[c_{\sigma} + c_W U + \frac{\partial H_W}{\partial T} \right] \frac{\partial T}{\partial t} = k_{eff} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}. \end{aligned}$$

A fim de considerarmos a deteriorização dos grãos, incluímos o termo fonte

$$(1 - \varepsilon) \rho_{\sigma} \frac{dm}{dt} (Q_r - 0,6 h_{\varphi}), \quad (A.24)$$

em que, ε - porosidade da massa de grãos (decimal), ρ_{σ} - densidade dos grãos (kgm^{-3}), $\frac{dm}{dt}$ - derivada da perda de materia seca em relação ao tempo ($kg s^{-1}$), Q_r - calor de oxidação dos grãos ($J s^{-1} m^{-3}$) e h_{φ} - entalpia específica de vaporização da água ($J kg^{-1}$).

Expressando em termos de f_a a Eq. (A.3), utilizando a Eq. (A.22) e logo após usando a Eq. (A.2), teremos

$$(1 - \varepsilon) \rho_{\sigma} \frac{\partial U}{\partial t} + f_a \frac{\partial R}{\partial y} = 0. \quad (A.25)$$

Levando em conta a deteriorização dos grãos, obtemos o termo fonte,

$$\frac{dm}{dt} (0,6 + U). \quad (A.26)$$

Logo, a equação de balanço de massa e energia, é dada por

$$\begin{aligned} & \left\{ \rho_{\sigma}(1 - \varepsilon) \left[c_{\sigma} + c_W U + \frac{\partial H_W}{\partial T} \right] + \varepsilon \rho_a \left[c_a + R \left(c_W + \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T} \right) \right] \right\} \frac{\partial T}{\partial t} = \\ & = \rho_{\sigma}(1 - \varepsilon) h_s \frac{\partial U}{\partial t} - f_a \left[c_{\sigma} + R \left(c_W + \frac{\partial h_{\varphi}}{\partial T} \right) \right] \frac{\partial T}{\partial y} + \\ & + k_{eff} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + (1 - \varepsilon) \rho_{\sigma} \frac{dm}{dt} (Q_r - 0,6 h_{\varphi}) \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

e

$$(1 - \varepsilon) \rho_{\sigma} \frac{\partial U}{\partial t} = -f_a \frac{\partial R}{\partial y} + \frac{dm}{dt} (0,6 + U). \quad (\text{A.28})$$

Segundo Muir e Jayas (2003), a condutividade térmica (k_{eff}) pode ser desconsiderada, pois a massa de grãos apresenta baixa condutividade térmica tendo maior influência nos grãos próximos a parede do silo. Como o modelo apresentado é unidimensional, o termo $k_{eff} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}$ não apresentou grande importância durante as simulações.

De acordo com Navarro e Noyes (2001) o termo $\frac{\partial H_W}{\partial T}$ pode resultar em valores incoerentes, pois ele depende de valores empíricos. Os autores negligenciarão este termo durante o processo de aeração sem afetar os dados.