

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO**  
**CENTRO TECNOLÓGICO**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL**

**ELISA VALENTIM GOULART**

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA EVAPORAÇÃO DE LÍQUIDOS**  
**EM MEIOS POROSOS EXPOSTOS À ATMOSFERA**  
**ATRAVÉS DE MODELO DE ESCALA DE POROS**

VITÓRIA

2007



ELISA VALENTIM GOULART

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA EVAPORAÇÃO DE  
LÍQUIDOS EM MEIOS POROSOS EXPOSTOS À  
ATMOSFERA ATRAVÉS DE MODELO DE ESCALA DE  
POROS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Ambiental, na área de concentração em Poluição do Ar.

Orientador: Prof. Dr. Neyval Costa Reis Jr.  
Co-Orientadora: Prof<sup>ª</sup> Dr<sup>ª</sup> Jane Méri Santos

VITÓRIA

2007

**ELISA VALENTIM GOULART**

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA EVAPORAÇÃO DE  
LÍQUIDOS EM MEIOS POROSOS EXPOSTOS À  
ATMOSFERA ATRAVÉS DE MODELO DE ESCALA DE  
POROS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Ambiental, na área de concentração em Poluição do Ar.

**COMISSÃO EXAMINADORA**

---

**Prof. Dr. Neyval Costa Reis Jr.**  
**Universidade Federal do Espírito Santo**  
**Orientador**

---

**Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Jane Méri Santos**  
**Universidade Federal do Espírito Santo**  
**Co-Orientadora**

---

**Prof. Dr. Julio Chacaltana**  
**Universidade Federal do Espírito Santo**  
**Examinador Interno**

---

**Dr. Julio Cesar C. B. R. Moreira**  
**Instituto Nacional da Propriedade Industrial**  
**Examinador Externo**

## **AGRADECIMENTOS**

Ao Programa de Pós-Graduação da Universidade Federal do Espírito Santo.

Aos meus orientadores, professor Neyval Costa Reis Júnior e a professora Jane Meri Santos.

Aos colegas do laboratório de Poluição do Ar, em especial à Fernanda e ao Rafael. A Teca por ter buscado um livro na biblioteca da USP.

Aos meus familiares e amigos.

## RESUMO

A investigação experimental e a modelagem matemática da evaporação de líquido a partir de superfícies porosas é extremamente importante em um grande número de aplicações práticas, variando desde aplicações industriais, como processos de tratamento superficial, às aplicações em problemas ambientais, como a utilização de agrotóxicos e estudos de impacto ambiental do lançamento de líquidos nocivos na atmosfera. Os modelos de escala de poros surgem com importante ferramenta para o cálculo das taxas de evaporação de líquidos. Este trabalho visa implementar um modelo de escala de poros que seja capaz de prever as taxas de evaporação dos líquidos e as distribuições de fase dentro da matriz porosa. Além de analisar a influência dos parâmetros governantes no processo de evaporação. O modelo de escala de poros obteve boa acurácia quando comparado com os resultados de Yiotis et al. (2001). Os resultados mostram que sob escoamento mais intenso a influência do meio poroso fica mais evidente, limitando o processo de evaporação, do que quando expostos a escoamento menos intenso.

Palavras chaves: evaporação, meio poroso, modelo de escala de poros, exposição à atmosfera

## **ABSTRACT**

The mathematical modeling of the evaporation of liquid from porous surfaces are extremely important in a great number of practical applications, varying since industrial applications, as processes of superficial treatment, to the applications in ambient problems, as the use of hazard liquid and studies of ambient impact of launching harmful liquids in the atmosphere. The pore network models appear with important tool for the calculation of the taxes of evaporation of liquids. This work aims at to implement a pore network model capable predict the drying rates of the liquids and the phase distributions of liquids and vapor. And analyzing the influence of the governing parameters in the evaporation process. The model was able to predict with reasonable agreement the results of Yiotis et al. (2001). The results show that under more intensive flow the influence of the porous medium is more evident, limiting the evaporation process, then when under less intensive flow.

Keywords: evaporation, porous media, pore network, atmosphere.

## LISTA DE FIGURAS

<a href="#">FIGURA 1.1: REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DA MÉDIA DO VOLUME (FONTE REIS,2000)</a> .....	16
<a href="#">FIGURA 2.1: ESQUEMA DA EVAPORAÇÃO. (YIOTIS ET AL.,2005)</a> .....	20
<a href="#">FIGURA 2.2: DIAGRAMA DOS PADRÕES DE DISTRIBUIÇÃO DE FASE. (PLOURDE, 2003)</a> .....	22
<a href="#">FIGURA 2.3: DISTRIBUIÇÃO DE LÍQUIDO E VAPOR DENTRO DO MEIO POROSO. (TSIMPANOIANNIS,1999)</a> .....	24
<a href="#">FIGURA 2.4: REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DA EVAPORAÇÃO DE LÍQUIDO DURANTE O PTD. (GRIFFITHS E ROBERTS, 1999)</a> .....	25
<a href="#">FIGURA 2.5: REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DA (A) MICROESTRUTURA DE UM MEIO POROSO, (B) REPRESENTAÇÃO DA MICROESTRUTURA COMO UMA SÉRIE DE POROS E LIGAÇÕES E (C) COMO UMA MATRIZ DE POROS E LIGAÇÕES USUALMENTE UTILIZADA EM MODELOS DE ESCALA DE POROS.</a> .....	27
<a href="#">FIGURA 2.6: REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DOS POROS E LIGAÇÕES NA MATRIZ POROSA DO SUBSTRATO.</a> .....	27
<a href="#">FIGURA 2.7: ESQUEMA DE (A) SECAGEM E (B) DRENAGEM EM 2D. AS SETAS INDICAM A DIREÇÃO DO FLUXO.(PRAT, 1995)</a> .....	28
<a href="#">FIGURA 2.8: DISTRIBUIÇÃO DE FASE PARA DRENAGEM E SECAGEM EM MESMA MATRIZ POROSA E COM AUSÊNCIA DE GRAVIDADE (B=0). O LÍQUIDO ESTÁ EM PRETO E O VAPOR EM BRANCO. (PRAT, 1995)</a> .....	29
<a href="#">FIGURA 2.9: ESQUEMA DO MODELO BIDIMENSIONAL UTILIZADO POR PRAT PARA REALIZAÇÃO DOS EXPERIMENTOS. (LAURINDO E PRAT, 1996)</a> .....	30
<a href="#">FIGURA 2.10: ESQUEMA DAS TRÊS CONFIGURAÇÕES DE EVAPORAÇÃO. (LAURINDO E PRAT, 1996)</a> .....	30
<a href="#">FIGURA 2.11: DISTRIBUIÇÃO DE FASE. ANTES DA INTRODUÇÃO DO CORANTE TODOS OS CLUSTERES ERAM TRANSLÚCIDOS. APÓS A INTRODUÇÃO DO CORANTE TODOS OS CLUSTERES SE TORNAM VERMELHOS, INCLUSIVE OS CLUSTERES DESCONECTADOS. (LAURINDO E PRAT, 1997)</a> .....	31
<a href="#">FIGURA 2.12: FIGURAS DE TAXA DE EVAPORAÇÃO. (A) EXPERIMENTAL E (B) SIMULAÇÃO. (LAURINDO E PRAT, 1997).</a> .....	32
<a href="#">FIGURA 2.13: CONFIGURAÇÃO ESTUDADA (3D). (LE BRAY, 1999)</a> .....	32
<a href="#">FIGURA 2.14: (A) REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DA FRATURA NO MEIO POROSO. (B) MEIO POROSO REPRESENTADO ATRAVÉS DE MODELO DE ESCALA DE POROS. (YIOTIS ET AL., 2001)</a> .....	33
<a href="#">FIGURA 2.15: PADRÕES DE SECAGEM NA PRESENÇA DE GRADIENTES TÉRMICOS E COM AUSÊNCIA DE FORÇA VISCOSA E DE GRAVIDADE. (PLOURDE E PRAT, 2003)</a> .....	35
<a href="#">FIGURA 2.16: DISTRIBUIÇÃO DE FASE LÍQUIDA E GASOSA, INDICANDO OS VÁRIOS TIPOS DE POROS PRESENTES. (YIOTIS, 2003)</a> .....	36
<a href="#">FIGURA 2.17: EVOLUÇÃO DO RAIO DO FILME DESENVOLVIDO NOS CANTOS DE CAPILARES COM SEÇÃO QUADRADA. (A) SEÇÃO MAIS PRÓXIMA DO PORO E (B) SEÇÃO MAIS AFASTADA COM FILME MAIS FINO. (YIOTIS, 2005)</a> .....	36
<a href="#">FIGURA 2.18: EVOLUÇÃO GERAL DA EVAPORAÇÃO. (A) SEM CAMADA DE DIFUSÃO E (B) COM CAMADA DE DIFUSÃO. (YIOTIS, 2006)</a> .....	38
<a href="#">FIGURA 2.19: CURVAS DE EVAPORAÇÃO PARA SIMULAÇÃO E EXPERIMENTOS. PRAT, 2007</a> .....	39
<a href="#">FIGURA 2.20: ESQUEMA DA GEOMETRIA CONSIDERADA PARA O ESTUDO. (A) INÍCIO DO PROCESSO DE EVAPORAÇÃO, REGIÃO DE FILME ATINGE A SUPERFÍCIE. (B) APÓS ALGUNS ESTÁGIOS O FILME NÃO ALCANÇA A SUPERFÍCIE. O PERÍODO DE TAXA CONSTANTE (PTC) TERMINA.</a> .....	40



<u>FIGURA 2.21: CURVA TAXA DE EVAPORAÇÃO PARA DIFERENTES ESPESSURAS DA CAMADA DE DIFUSÃO. TRANSFERÊNCIA DE MASSA EXTERNA APENAS POR DIFUSÃO (VELOCIDADE NULA). A LINHA TRACEJADA MOSTRA O CPD. (YIOTIS, 2007).</u> .....	41
<u>FIGURA 3.1: REPRESENTAÇÃO DO MEIO POROSO E DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO. (YIOTIS, 2001)</u> .....	42
<u>FIGURA 3.2: REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DA EVOLUÇÃO DA SECAGEM, ONDE ESTÃO INDICADOS OS TIPOS DE POROS (1, 2, 3 E 4), ONDE (A) É O INSTANTE INICIAL COM DOIS POROS CHEIOS, (B) UM DOS POROS É INVADIDO, (C) E (D) A INVASÃO DO SEGUNDO PORO.</u> .....	45
<u>FIGURA 3.3: CLUSTERS CONTÍNUOS E DESCONTÍNUOS. (YIOTIS ET AL., 2001)</u> .....	48
<u>FIGURA 3.4: VOLUME DE CONTROLE TÍPICO UTILIZADO NESTE TRABALHO.</u> .....	53
<u>FIGURA 3.5: VISÃO GERAL DO ALGORITMO IMPLEMENTADO.</u> .....	55
<u>FIGURA 4.1: CURVA DE EVAPORAÇÃO PARA AS CONFIGURAÇÕES (A) 1, (B) 2 E (C) 3. A LINHA CHEIA REPRESENTA A MÉDIA DAS DEZ INTERAÇÕES SIMULADAS E AS LINHAS TRACEJADAS REPRESENTAM OS MAIORES E MENORES VALORES ENCONTRADOS NAS DEZ SIMULAÇÕES. OS TRIÂNGULOS SÃO OS DADOS OBTIDOS POR YIOTIS ET AL. (2001).</u> .....	59
<u>FIGURA 4.2: DISTRIBUIÇÃO DE LÍQUIDO PARA CONFIGURAÇÃO NÚMERO 2 COM (A) 80%, (B) 60%, (C) 40% E (D) 20% DE MASSA. O LÍQUIDO ESTÁ REPRESENTADO POR PRETO E O GÁS POR BRANCO. A COLUNA DA ESQUERDA APRESENTA A DISTRIBUIÇÃO SIMULAÇÃO PELO MODELO PROPOSTO E A COLUNA DA DIREITA AS DISTRIBUIÇÕES APRESENTADAS POR YIOTIS ET AL.(2001)</u> .....	61
<u>FIGURA 4.3: DISTRIBUIÇÃO DE LÍQUIDO PARA CONFIGURAÇÃO NÚMERO 3 COM (A) 80%, (B) 60%, (C) 40% E (D) 20% DE MASSA. O LÍQUIDO ESTÁ REPRESENTADO POR PRETO E O GÁS POR BRANCO. A COLUNA DA ESQUERDA APRESENTA A DISTRIBUIÇÃO SIMULAÇÃO PELO MODELO PROPOSTO E A COLUNA DA DIREITA AS DISTRIBUIÇÕES APRESENTADAS POR YIOTIS ET AL.(2001)</u> .....	62
<u>FIGURA 4.4: DISTRIBUIÇÃO DE VAPOR PARA SIMULAÇÃO NÚMERO 2 COM (A) 80%, (B) 60%, (C) 40% E (D) 20% DE MASSA. AS CORES MAIS ESCURAS REPRESENTAM CONCENTRAÇÕES MENORES. A COLUNA DA ESQUERDA APRESENTA A DISTRIBUIÇÃO SIMULAÇÃO PELO MODELO PROPOSTO E A COLUNA DA DIREITA AS DISTRIBUIÇÕES APRESENTADAS POR YIOTIS ET AL.(2001).</u> .....	64
<u>FIGURA 4.5: DISTRIBUIÇÃO DE FASE DO CASO BASE. OS CONTORNOS REPRESENTAM AS ISOLINHAS DE CONCENTRAÇÃO DE VAPOR E OS CÍRCULOS REPRESENTAM OS POROS QUE AINDA POSSUI LÍQUIDO PARA INTERVALOS DE TEMPO COM (A) 80%, (B) 60%, (C) 40% E (D) 20% DE MASSA.</u> .....	68
<u>FIGURA 4.6: CURVA DE SATURAÇÃO PARA O CASO BASE. (A) ESCALA DE TEMPO ADIMENSIONAL E (B) O TEMPO REAL DE EVAPORAÇÃO.</u> .....	69
<u>FIGURA 4.7: CURVA DE SATURAÇÃO PARA TRÊS DIFERENTES DISTRIBUIÇÕES DE DIÂMETROS DOS POROS E DAS LIGAÇÕES. (A) ESCALA DE TEMPO ADIMENSIONAL E (B) O TEMPO REAL DE EVAPORAÇÃO.</u> .....	70
<u>FIGURA 4.8: DISTRIBUIÇÃO DE FASE PARA DIVERSAS DISTRIBUIÇÕES DE DIÂMETROS DAS LIGAÇÕES E DOS POROS. OS CONTORNOS REPRESENTAM AS ISOLINHAS DE CONCENTRAÇÃO DE VAPOR E OS CÍRCULOS REPRESENTAM OS POROS QUE AINDA POSSUI LÍQUIDO PARA INTERVALOS DE TEMPO COM (A) 80%, (B) 60%, (C) 40% E (D) 20% DE MASSA. A COLUNA DA ESQUERDA REPRESENTA A EVOLUÇÃO DA CONFIGURAÇÃO 1, A CENTRAL A CONFIGURAÇÃO 2 E A COLUNA DA DIREITA A CONFIGURAÇÃO 3.</u> .....	71
<u>FIGURA 4.9: CURVA DE SATURAÇÃO PARA DIFERENTES VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE SATURAÇÃO DO LÍQUIDO. (A) ESCALA DE TEMPO ADIMENSIONAL E (B) O TEMPO REAL DE EVAPORAÇÃO.</u> .....	72

<u>FIGURA 4.10: DISTRIBUIÇÃO DE FASE PARA DIFERENTES VALORES DE CONCENTRAÇÃO DE SATURAÇÃO DO LÍQUIDO. OS CONTORNOS REPRESENTAM AS ISOLINHAS DE CONCENTRAÇÃO DE VAPOR E OS CÍRCULOS REPRESENTAM OS POROS QUE AINDA POSSUI LÍQUIDO PARA INTERVALOS DE TEMPO COM (A) 80%, (B) 60%, (C) 40% E (D) 20% DE MASSA. A COLUNA DA ESQUERDA REPRESENTA A EVOLUÇÃO PARA CONCENTRAÇÃO DE SATURAÇÃO IGUAL A <math>C_{SAT}=C_{SAT}/2</math>, A CENTRAL O CASO BASE E A COLUNA DA DIREITA O PARA CONCENTRAÇÃO DE SATURAÇÃO IGUAL A <math>C_{SAT}=2C_{SAT}</math>.</u> .....	73
<u>FIGURA 4.11: CURVA DE SATURAÇÃO PARA DIFERENTES VALORES DE COEFICIENTES DE DIFUSÃO DO LÍQUIDO. (A) ESCALA DE TEMPO ADIMENSIONAL E (B) O TEMPO REAL DE EVAPORAÇÃO.</u> .....	75
<u>FIGURA 4.12: DISTRIBUIÇÃO DE FASE PARA DIFERENTES VALORES DE COEFICIENTE DE DIFUSÃO DO LÍQUIDO. OS CONTORNOS REPRESENTAM AS ISOLINHAS DE CONCENTRAÇÃO DE VAPOR E OS CÍRCULOS REPRESENTAM OS POROS QUE AINDA POSSUI LÍQUIDO PARA INTERVALOS DE TEMPO COM (A) 80%, (B) 60%, (C) 40% E (D) 20% DE MASSA. A COLUNA DA ESQUERDA REPRESENTA A EVOLUÇÃO PARA CONCENTRAÇÃO DE SATURAÇÃO IGUAL A <math>D=D/2</math>, A CENTRAL O CASO BASE E A COLUNA DA DIREITA O PARA CONCENTRAÇÃO DE SATURAÇÃO IGUAL A <math>D=2D</math>.</u> .....	77
<u>FIGURA 4.13: VARIAÇÃO DE <math>v_r</math> COM A VELOCIDADE DE FRICÇÃO. (REIS, 2000)</u> .....	78
<u>FIGURA 4.14: VARIAÇÃO DE <math>v_r</math> COM O COMPRIMENTO DE MONIN-OBUKHOV</u> .....	78
<u>FIGURA 4.15: CURVA DE SATURAÇÃO PARA DIFERENTES VALORES DE VELOCIDADE DE FRICÇÃO. (A) ESCALA DE TEMPO ADIMENSIONAL E (B) O TEMPO REAL DE EVAPORAÇÃO.</u> .....	80
<u>FIGURA 4.16: DISTRIBUIÇÃO DE FASE PARA DIFERENTES VALORES DE VELOCIDADE DE FRICÇÃO. OS CONTORNOS REPRESENTAM AS ISOLINHAS DE CONCENTRAÇÃO DE VAPOR E OS CÍRCULOS REPRESENTAM OS POROS QUE AINDA POSSUI LÍQUIDO PARA INTERVALOS DE TEMPO COM (A) 80%, (B) 60%, (C) 40% E (D) 20% DE MASSA. A COLUNA DA ESQUERDA REPRESENTA A EVOLUÇÃO PARA VALORES DE <math>v_r</math> IGUAL A 0,002 M/S . A COLUNA CENTRAL PARA VALORES DE <math>v_r</math> IGUAL A 0,4 M/S. E A COLUNA DA DIREITA VALORES DE <math>v_r</math> IGUAL A 1M/S.</u> .....	82
<u>FIGURA 4.17: CURVA DE SATURAÇÃO PARA DIFERENTES VALORES DO COMPRIMENTO DE MONIN-OBUKHOV. (A) ESCALA DE TEMPO ADIMENSIONAL E (B) O TEMPO REAL DE EVAPORAÇÃO.</u> .....	83
<u>FIGURA 4.18: CURVA DE SATURAÇÃO PARA DIVERSAS POROSIDADES DO SUBSTRATO. (A) ESCALA DE TEMPO ADIMENSIONAL E (B) O TEMPO REAL DE EVAPORAÇÃO.</u> .....	84
<u>FIGURA 4.19: DISTRIBUIÇÃO DE FASE PARA POROSIDADE IGUAL A 0,2. OS CONTORNOS REPRESENTAM AS ISOLINHAS DE CONCENTRAÇÃO DE VAPOR E OS CÍRCULOS REPRESENTAM OS POROS QUE AINDA POSSUI LÍQUIDO PARA INTERVALOS DE TEMPO COM (A) 80%, (B) 60%, (C) 40% E (D) 20% DE MASSA. MATRIZ 40x40 E VOLUME MÉDIO DE LÍQUIDO IGUAL A <math>1,2 \times 10^{-6} m^3</math>.</u> .....	85
<u>FIGURA 4.20: DISTRIBUIÇÃO DE FASE PARA POROSIDADE IGUAL A 0,9. OS CONTORNOS REPRESENTAM AS ISOLINHAS DE CONCENTRAÇÃO DE VAPOR E OS CÍRCULOS REPRESENTAM OS POROS QUE AINDA POSSUI LÍQUIDO PARA INTERVALOS DE TEMPO COM (A) 80%, (B) 60%, (C) 40% E (D) 20% DE MASSA. MATRIZ 80x80 E VOLUME MÉDIO DE LÍQUIDO IGUAL A <math>5,0 \times 10^{-6} m^3</math>.</u> .....	86
<u>FIGURA 7.1: VOLUME DE CONTROLE PARA SOLUÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE VAPOR NA FRATURA. OS PONTOS PRETOS REPRESENTAM OS POROS, QUE SÃO OS VOLUMES DE CONTROLE DENTRO DA MATRIZ, E A LINHA ADICIONADA À SUPERFÍCIE DO MEIO POROSO. (ADAPTADO DE YIOTIS ET AL., 2001).</u> .....	94

## LISTA DE TABELAS

<a href="#">TABELA 3.1: PROPRIEDADES DO HEXANO</a> .....	43
<a href="#">TABELA 3.2: PARÂMETROS FÍSICOS UTILIZADOS NAS SIMULAÇÕES</a> .....	44
<a href="#">TABELA 3.3: INTERPRETAÇÃO DO COMPRIMENTO DE MONIN-ÖBUKHOV (L) COM RESPEITO A ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA</a> .....	50
<a href="#">TABELA 3.4: PERFIL DO GÁS NA ATMOSFERA</a> .....	51
<a href="#">TABELA 3.5: NÚMERO DE REYNOLDS RUGOSO PARA SUPERFÍCIES LISAS E RUGOSAS</a> .....	52
<a href="#">TABELA 4.1 : VALORES DE <math>v_r</math> SIMULAÇÕES DE INFLUÊNCIA DE VELOCIDADE DE FRICÇÃO</a> .....	79
<a href="#">TABELA 4.2: VALORES DE <math>v_r</math> UTILIZADOS PARA AS SIMULAÇÕES DE INFLUÊNCIA DE ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA</a> ..	81
<a href="#">TABELA 4.3: VALORES DAS POROSIDADES DAS SIMULAÇÕES</a> .....	83

## LISTA DE SIGLAS

PTC	Período da taxa constante
PTD	Período de taxa decrescente
CPD	<i>Cluster</i> principal desconectado
BT	<i>Breakthrough</i>
CP	<i>Cluster</i> principal
CD	<i>Cluster</i> desconectado
IPGD	Invasão por gradiente desestabilizador
IPGE	Invasão por gradiente estabilizador

## LISTA DE SÍMBOLOS

### Letras romanas

2D	Bidimensional
3D	Tridimensional
$a_p$	Coefficiente ponto P
$a_w$	Coefficiente ponto W
$a_E$	Coefficiente ponto E
$a_S$	Coefficiente ponto S
$a_N$	Coefficiente ponto N
$a_p^0$	Coefficiente ponto interação anterior
$C$	Concentração de vapor [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]
$C_r$	Concentração de vapor na altura de referencia [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]
$C_p$	Concentração ponto P [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]
$C_w$	Concentração ponto W [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]
$C_E$	Concentração ponto E [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]
$C_S$	Concentração ponto S [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]
$C_N$	Concentração ponto N [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]
$C_p^0$	Concentração interação anterior [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]
$D$	Coefficiente de difusão [ $\text{m}^2/\text{s}$ ]
$E_e$	Fluxo externo
E	Ponto leste do volume de controle
$e$	Face leste do volume de controle
$g$	Aceleração da gravidade [ $\text{m}/\text{s}^2$ ]
$L$	Comprimento de Monin-Obukhov [m]
$l$	Comprimento entre centro dos poros [m]
$L_A$	Escala da amostra [m]
$L_{cap}$	Escala que caracteriza o comprimento típico da frente de invasão estabilizada pela gravidade [m]

$L_g$	Escala que caracteriza o comprimento típico da frente de invasão estabilizada por efeitos viscosos [m]
$L_T$	Escala característica associada ao gradiente térmico [m]
N	Ponto norte do volume de controle
$n$	Face norte do volume de controle
$P$	Pressão [Pa]
$P_c$	Pressão capilar [Pa]
P	Ponto central do volume de controle
Pe	Número de Pecle
Q	Vazão mássica [m <sup>3</sup> /s]
$r$	Raio do poro [m]
R	Raio das ligações (geral) [m]
$r_{Xw}$	Raio da ligação face w [m]
$r_{Xe}$	Raio da ligação face e [m]
$r_{Yn}$	Raio da ligação face n [m]
$r_{Ys}$	Raio da ligação face s [m]
Sc	Número de Schimidt
S	Ponto sul do volume de controle
s	Face sul do volume de controle
$t_{Adm}$	Tempo em que a matriz iria evaporar se mantivesse a taxa de evaporação máxima (Yiotis et al.,2001).
t*	Tempo adimensional para análise dos parâmetros governantes no processo de evaporação.
$t_o$	Tempo em que a matriz iria evaporar se mantivesse a taxa de evaporação máxima durante todo o processo [s]
$T_{ij}$	Taxa de evaporação [kg/s]
$\overline{u'w'}$	Fluxo turbulento de momento
$u_*$	Velocidade de fricção [m/s]
$V_{Poros}$	Volume do poro [m <sup>3</sup> ]
$v_r$	Velocidade de transporte externo de vapor [m/s]

$Z_{O_v}$	Comprimento de rugosidade [m]
$Z_{O+}$	Número de Reynolds rugoso
$Z_v$	Altura de referência [m]
W	Ponto oeste do volume de controle
w	Face oeste do volume de controle

#### Letras gregas

$\pi$	Pi
$\gamma$	Tensão superficial [N/m]
$\tau_{xy}$	Tensão de Reynolds [N/m <sup>2</sup> ]
$\rho$	Massa específica [kg/m <sup>3</sup> ]
$k$	Constante de von Karman
$\psi_v$	Perfil do gás na atmosfera
$\xi$	Estabilidade atmosférica
$\nu$	Viscosidade cinemática [Pa s]
$\delta_x$	Espessura do volume de controle na direção x [m]
$\delta_y$	Espessura do volume de controle na direção y [m]
$\Delta t$	Intervalo de tempo [s]
$\Delta V$	Variação de volume [m <sup>3</sup> ]

# SUMÁRIO

<u>1</u>	<u>INTRODUÇÃO</u>	15
<u>2</u>	<u>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</u>	18
<u>2.2</u>	<u>Modelos de evaporação em meios porosos</u>	23
<u>2.2.1</u>	<u>Modelos de escala de poros</u>	26
<u>3</u>	<u>METODOLOGIA</u>	42
<u>3.1</u>	<u>Modelos de escala de poros</u>	42
<u>3.1.1</u>	<u>Transporte na interface meio poroso/atmosfera</u>	49
<u>3.2</u>	<u>Método numérico para solução da equação de transporte de vapor</u>	52
<u>3.3</u>	<u>Código computacional</u>	54
<u>4</u>	<u>RESULTADOS</u>	57
<u>4.1</u>	<u>Análise da precisão do algoritmo</u>	57
<u>4.1.1</u>	<u>Curvas de evaporação</u>	58
<u>4.1.2</u>	<u>Comparação da distribuição de líquido</u>	59
<u>4.1.3</u>	<u>Comparação da distribuição de vapor</u>	63
<u>4.2</u>	<u>Análises dos parâmetros governantes</u>	65
<u>4.2.1</u>	<u>Parametrização</u>	66
<u>4.2.2</u>	<u>Caso base</u>	67
<u>4.2.3</u>	<u>Influência da concentração de saturação</u>	72
<u>4.2.4</u>	<u>Influência do coeficiente de difusão</u>	74
<u>4.2.5</u>	<u>Influência do fluxo de remoção</u>	76
<u>4.2.5.1</u>	<u>Influência da velocidade de fricção</u>	79
<u>4.2.5.2</u>	<u>Influência da estabilidade atmosférica</u>	81
<u>4.2.6</u>	<u>Influência da porosidade da matriz</u>	83
<u>5</u>	<u>CONCLUSÃO E RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS</u>	87
<u>6</u>	<u>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</u>	89
<u>7</u>	<u>APÊNDICE A</u>	93
<u>7.1</u>	<u>Cálculo da concentração de vapor na fratura</u>	93



## 1 INTRODUÇÃO

A evaporação de líquidos é uma área de interesse em diversas áreas industriais, como na indústria alimentícia, de papel e celulose e de cerâmica. Em um diferente contexto, está a evaporação de líquidos em meios porosos, que abrange problemas de extração de hidrocarbonetos de rochas através de injeção de gás (Ho,1995) e em remediação de solos contaminados (Le Gallo, 1997).

Dentre os problemas de evaporação de líquidos em meios porosos encontram-se problemas de exposição da área à atmosfera. Neste caso os gases podem causar impacto na saúde e bem estar da comunidade localizada ao seu redor. Dessa forma muitos estudos estão sendo realizados com a finalidade de quantificar a taxa de evaporação de líquidos em diferentes situações de exposição na atmosférica (Prat, 2007 e Yiotis et al. (2007)). Nessas situações após a evaporação dentro da matriz porosa o gás será disperso através das condições locais de estabilidade atmosférica, velocidade e direção do vento.

A taxa de evaporação de líquidos em meios porosos expostos a atmosfera é descrita pelo acoplamento das equações de transporte de vapor dentro e fora da matriz porosa. A taxa de transporte de vapor em superfícies porosas em atmosfera turbulenta incorpora a teoria de Brutsaert (1982). Esse transporte pode ser dividido em duas etapas. O primeiro é o transporte na subcamada laminar que é feito pelo transporte molecular na escala de Kolmogorov. E o segundo nas camadas adjacentes, quando o transporte é descrito através da teoria de similaridade, levando em consideração as condições de estabilidade

atmosférica, velocidade e direção do vento (Roberts et al., (1995)). Dentro do meio poroso a evaporação do líquido fica determinada pelas propriedades do meio poroso, como a porosidade e das propriedades físicas e químicas do líquido, como tensão superficial, coeficiente de difusão e concentração de saturação.

O estudo do processo de secagem em meios porosos pode ser dividido em duas principais abordagens. A primeira é a aproximação contínua e a segunda a é a aproximação discreta. Tradicionais descrições do processo, baseados em um tratamento macroscópico do problema, recaem na aproximação de que o meio poroso é considerado uma estrutura contínua e fictícia (*volume average*). A Figura 1.1 mostra o esquema de um volume representativo utilizado na abordagem macroscópica, também mostrado as fases líquidas e sólidas. Usando a técnica macroscópica, o transporte de líquido e vapor é descrito pela equação de difusão sendo que os coeficientes de transporte de massa são função do substrato poroso. Tal aproximação essencialmente ignora o efeito microscópico da estrutura porosa, o que é uma peça fundamental para o entendimento do processo de evaporação.

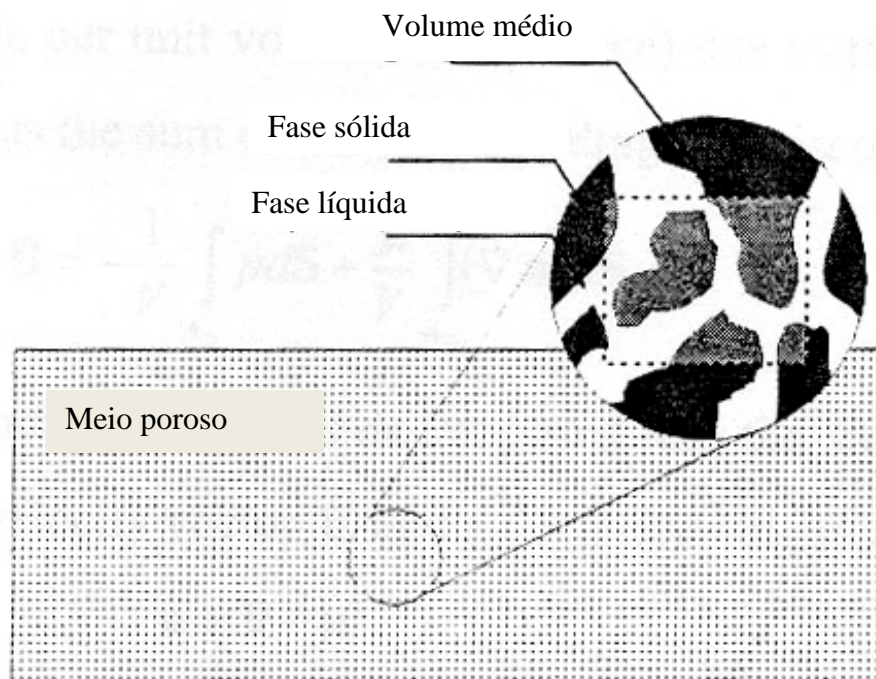


Figura 1.1: Representação esquemática da média do volume (fonte Reis,2000)

Como discutido por Masmoudi et al.(1992) a relevância da aproximação tradicional não foi totalmente comprovada. A falta de condições no método tradicional de predizer os coeficientes de transferência de massa na interface e a negligência sobre os efeitos

microscópicos do meio poroso, como reportado por Yiotis et al.(2001), que é um importante mecanismo para o entendimento do processo de evaporação levou ao desenvolvimento de um método completamente novo (Plumb e Prat, 1992).

Dessa forma, surgiu uma nova linha de modelos que passou a considerar os efeitos microscópicos da matriz porosa, os modelos de escala de poros. Essa aproximação foi extensivamente utilizada nos últimos anos para modelar vários processos em meios porosos, como a secagem. Modelos de escala de poros descrevem o processo poro a poro e oferecem um melhor entendimento da física envolvida no processo do que os modelos macroscópicos utilizados no passado.

Apesar do grande interesse no estudo e modelagem da secagem de líquidos em meios porosos, somente recentemente foi elucidada as questões a respeito da influência dos filmes de líquidos na taxa de evaporação (Prat, 2007 e Yiotis et al. (2007)). Também as informações a respeito da relação entre o transporte de massa dentro e fora da matriz porosa é limitada.

Dentro deste contexto o objetivo deste trabalho é implementar um modelo de escala de poros bidimensional baseado na teoria da percolação que esteja exposto a atmosfera, analisar a acurácia deste modelo através de comparações com dados disponíveis em literatura, e também avaliar a influência dos parâmetros governantes sobre o processo, inclusive das condições atmosféricas ao qual o meio poroso estará em contato.

Essa dissertação está dividida em 5 capítulos. Seguindo as considerações iniciais no Capítulo 1, o Capítulo 2 faz uma revisão dos estudos desenvolvidos por outros autores. O Capítulo 3 descreve o modelo matemático utilizado para representar a evaporação de líquidos em meios porosos e os dados utilizados para a validação do modelo em questão. Já o Capítulo 4 avalia a acurácia do modelo desenvolvido e analisa a influência dos parâmetros governantes da evaporação. E finalmente o Capítulo 5 apresenta as conclusões e recomendações para futuros trabalhos.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O objetivo deste capítulo é descrever o problema da evaporação de líquidos em meios porosos, sumarizar os estudos prévios realizados na área e apresentar os principais conceitos do modelo de escala de poros utilizado no desenvolvimento deste estudo. Este capítulo está dividido em três seções. A Seção 2.1 descreve de maneira sucinta a secagem em meios porosos expostos a atmosfera. A Seção 2.2 apresenta uma breve revisão dos modelos de evaporação de líquidos em meios porosos. A Seção 2.3 apresenta uma revisão dos trabalhos realizados concernente a evaporação de líquidos em meios porosos, que empregam uma abordagem de escala de poros.

### 2.1 Secagem em meios porosos.

A secagem de líquidos em substratos porosos é objeto de muitos estudos e ainda é um desafio para o desenvolvimento e acurácia de modelos matemáticos. Durante o processo de secagem, o líquido vai gradualmente evaporando e depois é removido da estrutura porosa através da transferência de massa.

O problema de secagem envolve diversos mecanismos de escala microscópica (escala de poros) que afetam o comportamento macroscópico da secagem. Entre outros são incluídos a mudança de fase na interface gás/líquido no interior dos poros, transporte de massa por difusão e convecção, a presença de filmes e o deslocamento da frente de evaporação sobre efeito combinados de capilaridade, das forças viscosas e gravidade.

Segundo Yiotis et al. (2005), a evaporação pode ser macroscopicamente caracterizada pela curva da taxa de evaporação, que é uma curva estabelecida entre a quantidade de vapor gerado no substrato, e o tempo em que isso ocorre. Tipicamente, nos primeiros estágios de evaporação essa taxa permanece praticamente constante, esse período é chamado de Período de Taxa Constante (PTC), sendo caracterizado pelo excesso de líquido na superfície da matriz porosa e a alta taxa de evaporação. Essa taxa de evaporação elevada se deve a baixa concentração de vapor próxima da superfície, uma vez que o vapor gerado é normalmente removido da superfície do meio poroso por um escoamento externo. Na maioria das vezes, os estudos de evaporação iniciam com a concentração da superfície igual a zero. Desse modo, a mudança de fase é máxima.

Também de acordo com Yiotis et al., (2005), o PTC é seguido pelo Período de Taxa Decrescente (PTD), na qual a taxa de evaporação decai rapidamente. Durante o PTD, a evaporação é controlada pela transferência de massa no meio poroso seco, isto é, o transporte de vapor no interior do meio poroso e a eficiência de se remover vapor para a superfície controlam a taxa de evaporação. Os gradientes de concentração de vapor no início do período são mais elevados que os gradientes do final da evaporação, dessa forma a taxa de evaporação decai continuamente.

Associados aos períodos típicos de secagem existem padrões de percolação típicos que são (Yiotis et al.,2005): *breakthrough* (BT) e o *cluster* principal desconectado (CPD). O BT ocorre quando o gás alcança o lado oposto ao lado aberto para a atmosfera. A partir deste ponto, passam a existir regiões cheias de líquido (*cluster* de líquido) e regiões cheias de vapor (*cluster* de gás). Segundo o autor, durante esse período a maioria dos poros pertence ao *cluster* principal (CP) e apenas uma pequena percentagem pertence aos *clusters* de líquido isolado (*clusters* desconectados, CD). O segundo padrão, o *cluster* principal perde o contato com a superfície pela primeira vez. Próximo a esse rompimento ocorre a transição entre o PTC e o PTD. A partir desse ponto, o *cluster* principal se quebra em pequenos *clusters* desconectados e a média dos tamanhos desses *clusters* se tornam menores com o passar do tempo. Os *clusters* desconectados evaporam mais rapidamente por estarem cercados por concentrações de vapores mais baixas, dessa forma as taxas de evaporação desses *clusters* são maiores que o do *cluster* principal que está em contato com poros com a concentração de vapor muito próximo a concentração de saturação.

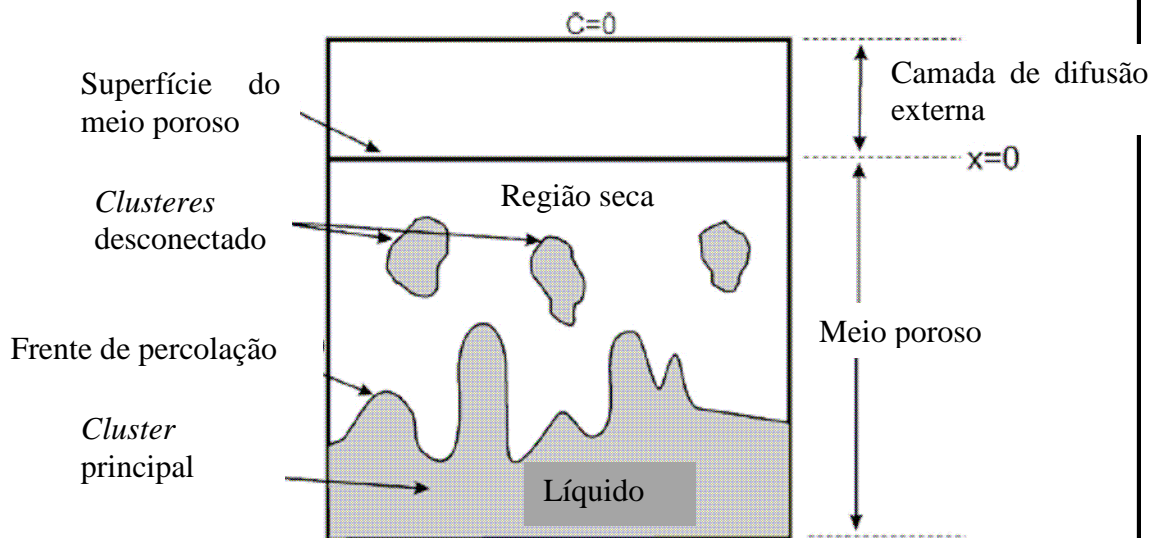


Figura 2.1: Esquema da evaporação. (Yiotis et al.,2005)

Em aplicações industriais, como tratamento de superfícies, ou em locais expostos a derramamento de líquidos no solo, aplicação de agrotóxicos em lavouras, o meio poroso está sujeito a um escoamento em sua superfície porosa. O líquido evapora na interface líquido-gás e depois o vapor é transferido para a superfície externa através de processos de difusão e convecção. Assim a interface move-se para regiões mais profundas da matriz, e esse movimento é controlado por capilaridade, viscosidade e forças térmicas. Apesar de intensa turbulência a taxa de evaporação fica limitada pelo meio poroso. Com a frente de evaporação mais profunda, a remoção mais eficiente de vapores acima da superfície não torna a evaporação de líquido mais rápida. Reis et al. (2006) apresentam resultados experimentais que sugerem que sob diferentes condições de fluxos acima da superfície livre da matriz as propriedades do líquido (tensão superficial e viscosidade) afeta significativamente a difusão do vapor no interior do substrato. Embora o líquido tenda a apresentar taxas de evaporação maiores para fluxos acima da superfície mais intensa, o efeito limitante da matriz é mais evidente.

Dependendo das condições do processo, cada força pode ser dominante sobre a outra. Para condições de contorno com escoamento sobre a superfície com velocidade baixa e processo de evaporação lento é a capilaridade quem controla a evaporação. Neste caso o movimento da interface líquido-gás pode ser descrito pelo mecanismo de percolação. Essa teoria foi descrita por Wilkinson and Willemsen, (1983).

Os estudos realizados por Prat (1993) mostram a similaridade entre a percolação e a evaporação de líquidos, a percolação é um processo dinâmico introduzido no modelo de evaporação lenta onde um fluido desloca outro dentro da matriz porosa. Secagem e drenagem apresentam analogia óbvia com o processo de percolação. Ambos são caracterizados pelo movimento do menisco (interface gás/líquido) dentro da matriz porosa e por uma invasão progressiva do fluido no meio poroso. Para a secagem o líquido que está invadindo é o gás gerado pela mudança de fase.

Naturalmente, os processos de drenagem e secagem são diferentes. No processo de drenagem os parâmetros dominantes são dois números adimensionais: a taxa de viscosidade entre os dois líquidos e o número de capilaridade. Já para o processo de secagem o parâmetro dominante é o número de capilaridade (Prat, 2002).

No caso da percolação, os padrões de distribuição de líquido no meio poroso são dominados pelos efeitos capilares ligados a diferença de pressão capilar entre os meniscos (interface gás/líquido) nos diversos espaços vazios do meio poroso. Neste caso a força motriz para a movimentação do líquido no interior do meio poroso será a diferença de pressão capilar por interface localizadas em vazios de grandes dimensões (maior raio de curvatura) e vazios de menores dimensões (menor raio de curvatura). Assim, a distribuição de líquidos apresentará padrões fractais devido à natureza randômica da distribuição de vazios no meio poroso.

Quando o fenômeno da evaporação é mais rápido, a redistribuição de líquido não é função apenas das diferenças de pressão capilar geradas pela distribuição randômica dos tamanhos dos vazios no meio poroso. Neste caso a redistribuição do líquido é influenciada pelos efeitos da viscosidade e a formação dos padrões fractais tende a ser suavizada.

Os efeitos de gravidade também tendem a suavizar ou estabilizar os padrões fractais gerados, uma vez que a pressão no interior do líquido será função não apenas do raio de curvatura das interfaces gás/líquido, mas também função da distribuição hidrostática de pressão.

A distribuição de fase para secagem lenta e sem influência de gradientes térmicos é controlada por um conjunto de forças, são elas: capilaridade, gravidade e viscosidade. Com ausência de gravidade ou de viscosidade os padrões gerados pela percolação são esperados. Como apresentado por Laurindo et al. (1996), a orientação do vetor gravidade em respeito à direção principal da invasão leva a dois padrões de secagem. O primeiro desestabilizando os padrões e levando a um novo padrão conhecido como invasão com gradiente desestabilizador (IPGD). O segundo padrão é estabilizado pela força de gravidade e é então conhecido como invasão com gradiente estabilizador (IPGE). Sequentemente foi discutido por Le Bray (1999), que os efeitos de viscosidade são sempre uma força estabilizante do processo levando a um padrão caracterizado como invasão com gradiente estabilizador (IPGE). Esses padrões são sumarizados no diagrama abaixo (Figura 2.2).

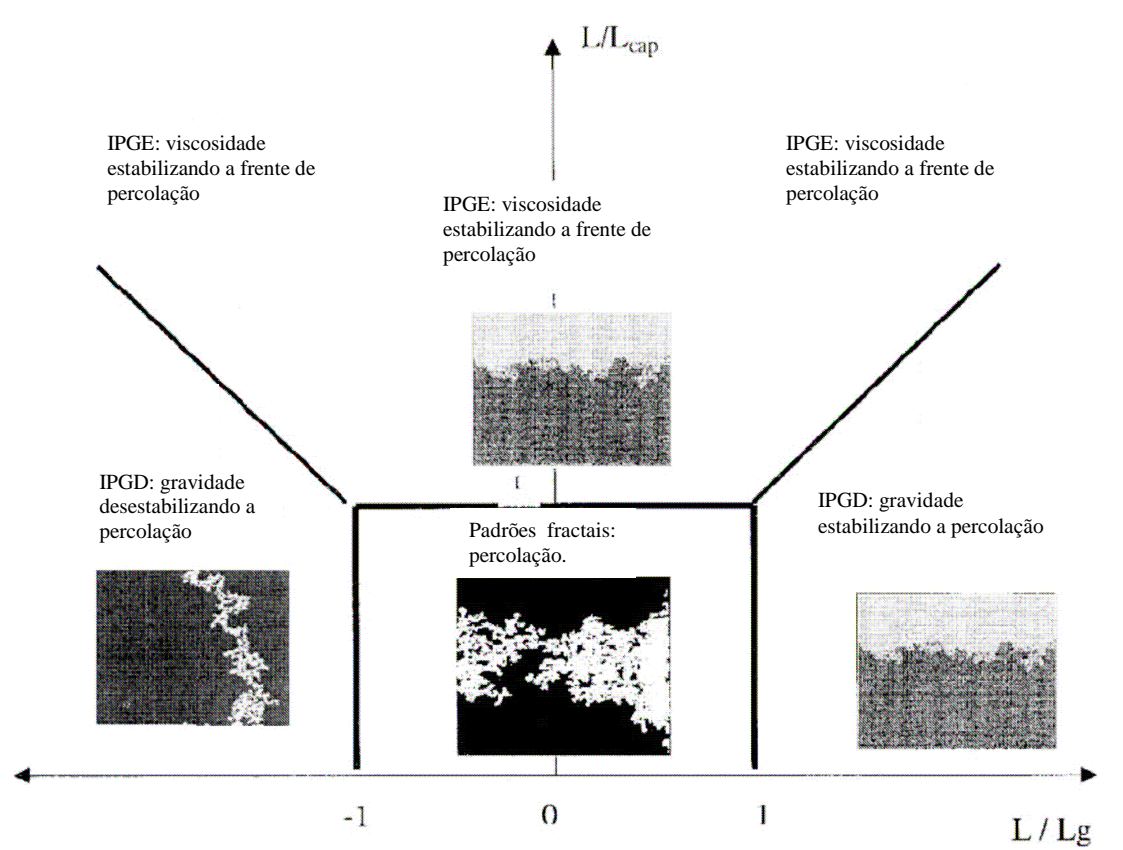


Figura 2.2: Diagrama dos padrões de distribuição de fase. (Plourde, 2003)



Essa figura é uma comparação entre três escalas de comprimento,  $L_A$  é a escala da amostra,  $L_g$  é a escala que caracteriza o comprimento típico da frente de invasão estabilizada pela gravidade e  $L_{cap}$  é a escala que caracteriza o comprimento típico da frente de invasão estabilizada por efeitos viscosos. Quando  $L_A/L_g$  está em no intervalo entre -1 e 1 os padrões de secagem se assemelham as padrões de percolação, isto é padrões fractais. Para valores de  $L_A/L_g$  maiores que 1 os efeitos de gravidade passam a influenciar a distribuição de fase levando ao padrão sendo estabilizado pela gravidade (IPGD). Dessa mesma forma, quando  $L_A/L_g$  é menor de -1 a gravidade influencia os padrões desestabilizando a percolação.

Por outro lado, quando  $L_A/L_{cap}$  é menor que 1 os padrões esperados são os de percolação (padrões fractais). Quando  $L_A/L_{cap}$  é maior que 1 as forças de viscosidade passam a influenciar a distribuição de líquido dentro do meio poroso. Assim, os padrões são estabilizados pela viscosidade. Conseqüentemente, os efeitos de gravidade e de viscosidade afetam dramaticamente os padrões de invasão e, portanto as taxas de evaporação.

## 2.2 Modelos de evaporação em meios porosos

Os primeiros modelos de evaporação de líquido em meios porosos foram desenvolvidos na década de 50 por Phillip e deVries (1957) e Luikov (1958), utilizando a abordagem de matriz continua. A abordagem macroscópica trata o meio poroso como uma matéria continua. Como observado na Figura 2.3 a abordagem de meio continuo despreza as propriedades microscópicas da estrutura porosa.

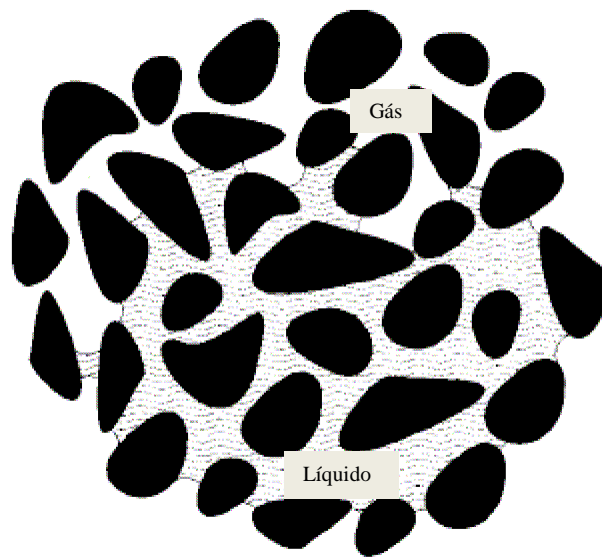


Figura 2.3: Distribuição de líquido e vapor dentro do meio poroso. (Tsimpanogiannis,1999)

Atualmente modelos de evaporação de líquidos em meios porosos podem ser divididos em duas categorias: (i) os que consideram uma frente de evaporação e (ii) aqueles usando a equação de transporte por difusão da fase líquida e gasosa do contaminante no interior do meio poroso. A primeira não considera a movimentação do líquido, apenas o movimento do vapor se dirigindo para fora da matriz, esses modelos foram desenvolvidos por Griffiths(1991), Roberts(1995) e Griffiths e Roberts (1999).; já a segunda considera além da difusão do vapor a movimentação do líquido e foram desenvolvido por Nasrallah e Perre (1998) e Westin (1998).

A primeira classe de modelos é baseada na teoria de avanço de uma frente de evaporação que negligencia o movimento do líquido, considerando que apenas o vapor se move dentro da matriz porosa. É assumido que o líquido permanece em repouso próximo a superfície livre. Com o início da evaporação a superfície saturada de líquido, que inicialmente estava na superfície do meio poroso, começa a recuar para dentro da matriz e o restante do líquido permanece em repouso. Desta forma a frente de evaporação vai gradualmente recuando para o interior do meio poroso, reduzindo a taxa de evaporação. Neste caso a evaporação do líquido é caracterizada apenas pela difusão molecular do vapor dentro da matriz e a difusão molecular do vapor na interface entre a matriz e a atmosfera. A Figura 2.4 mostra a frente de evaporação recuando para dentro

do meio poroso e os diferentes equacionamentos de transporte de vapor para dentro e fora do meio poroso.

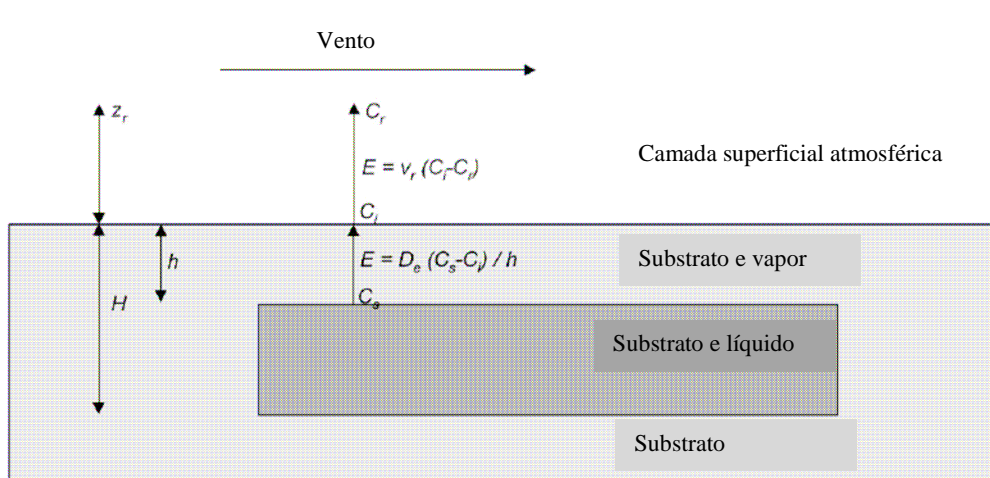


Figura 2.4: Representação esquemática da evaporação de líquido durante o PTD. (Griffiths e Roberts, 1999)

Entretanto muitos autores questionam o fato desta abordagem desconsiderar o movimento de líquido no interior do meio poroso, propondo assim a utilização de modelos que incluam, além da difusão de vapor, o movimento de difusão do líquido dentro do meio poroso. Utilizando esta abordagem Westin et al. (1998) apresenta o primeiro trabalho reportado na literatura utilizando esta abordagem para o estudo do impacto ambiental causado pela evaporação de gotas de líquido.

Dessa forma a segunda categoria de modelos, inclui além do transporte do vapor dentro da matriz porosa o movimento de difusão do líquido devido à capilaridade. Neste caso o líquido é absorvido pela matriz porosa e como na primeira classe inicia a evaporação pela superfície livre, porém o líquido é redistribuído devido à diferença de pressão capilar dentro da matriz. A evaporação é caracterizada pelo transporte capilar do líquido e pela difusão do vapor até a superfície.

Nos últimos anos o modelo de escala de poros têm se difundido e muitos autores estão utilizando para o estudo e modelagem de secagem de líquidos em meios porosos, escoamento de duas fases de fluidos e muitos outros (Li and Yortsos, 1995a; Valavanides and Payatakes, 2001; van Dijke *et al.*, 2001). Os modelos de escala de poros tratam o problema, seja secagem ou escoamento em meios porosos, poro a poro.

Dessa maneira traz um melhor entendimento sobre o processo. O ponto principal para os modelos de escala de poros para secagem é que eles descrevem a transferência de massa em níveis microscópico, esse mecanismo foi descrito por Li e Yortsos (1995) e Jia *et al.* (1999).

Figus *et al.* (1999) reporta que comparando dois modelos de evaporação de líquidos em meios porosos, um com abordagem macroscópica e outro um modelo de escala de poros, a acurácia só é boa para os dois tipo de modelos quando o substrato poroso é composto por poros de diâmetro único. Quando os diâmetros dos poros variam o modelo continuo não consegue prever adequadamente os padrões fractais ou *fingering*.

### 2.2.1 Modelos de escala de poros

Os primeiros modelos de escala de poros foram propostos por Nowicki *et al.* e mais recentemente por uma série de estudos desenvolvidos por Prat e colaboradores e posteriormente por Yiotis e colaboradores.

Os modelos de escala de poros são baseados na idéia de que a matriz porosa pode ser representada aproximadamente por uma matriz discreta composta por poros e canais. A Figura 2.5 mostra a representação esquemática de um meio poroso onde é possível observar pequenas regiões onde ocorre o acúmulo de líquidos e ligações entre essas regiões. Assim a idéia será de representar essas regiões onde ocorre a maior concentração de liquido por poros e as ligações entre essas regiões por canais para conduzir o liquido. A representação final será de uma matriz discreta com poros e canais de diversos diâmetros que variam de acordo com a distribuição estatística que caracteriza a microestrutura do meio poroso (Chandler *et al.*, 1982). Os poros servem apenas como reservatórios de líquidos, eles não oferecem resistência ao movimento do líquido e os canais são as barreiras capilares e a conexão entre os poros. As formas geométricas mais comuns de se representar essas matriz é de poros esféricos com canais cilíndricos Yiotis *et al.* (2001) ou poros cúbicos com gargantas retangulares, Prat (1993).

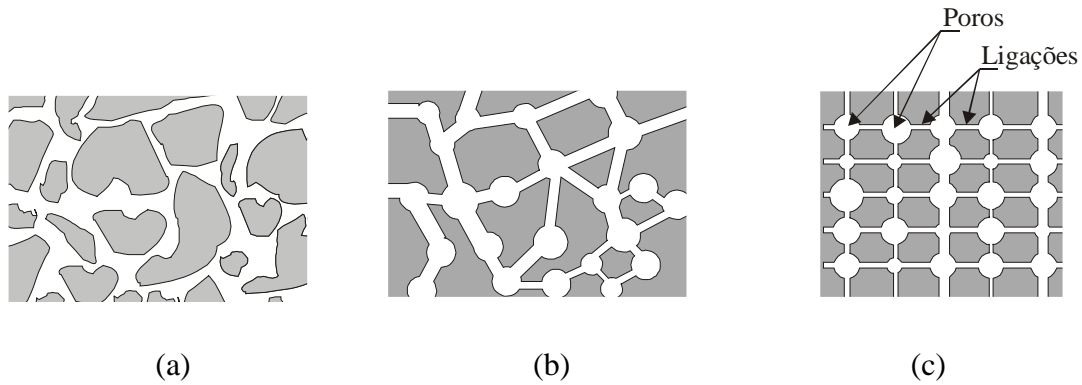


Figura 2.5: Representação esquemática da (a) microestrutura de um meio poroso, (b) representação da microestrutura como uma série de poros e ligações e (c) como uma matriz de poros e ligações usualmente utilizada em modelos de escala de poros.

A Figura abaixo (Figura 2.6) mostra a representação esquemática dos poros e ligações na matriz porosa. Sendo que a cor cinza representa o líquido e o branco representa o gás. Apesar de haver líquido nas ligações é assumido no modelo de escala de poros que esse volume é desprezível.

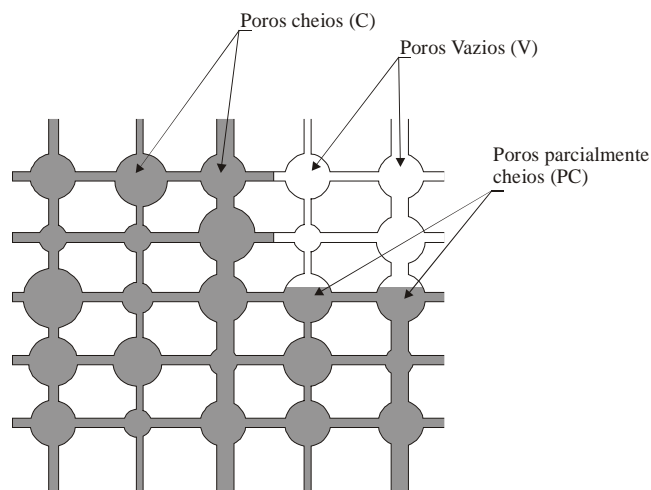


Figura 2.6: Representação esquemática dos poros e ligações na matriz porosa do substrato.

Nowicki et al. (1992) apresentou uma simulação numérica do processo utilizando um modelo de escala de poros simples, sem nenhuma delimitação dos parâmetros que governam a taxa de evaporação.

O primeiro estudo reportado sobre evaporação de líquidos em meios porosos utilizando o modelo de escala de poros foi Prat (1993). Neste estudo foi utilizada a teoria de percolação modificada para evaporação em meios porosos e a matriz porosa foi estruturada como rede de poros conectada por ligações. Foram também levados em

consideração os efeitos de capilaridade e gravidade, assim como o movimento do vapor gerado dentro do substrato.

Prat (1995) apresenta novo estudo demonstrando similaridade entre os processos de drenagem e secagem. As simulações sobre drenagem foram baseadas na teoria de percolação padrão, enquanto que para secagem foram combinados algoritmos de percolação com a difusão de vapor em cada interface líquido-gás. A Figura 2.7 mostra um esquema que demonstra as diferenças entre os processos de secagem e drenagem. Os resultados mostraram grande similaridade entre os dois processos, incluindo a frente de evaporação. A Figura 2.8 as distribuições de fases para os dois processos mostrando as similaridades entre eles.

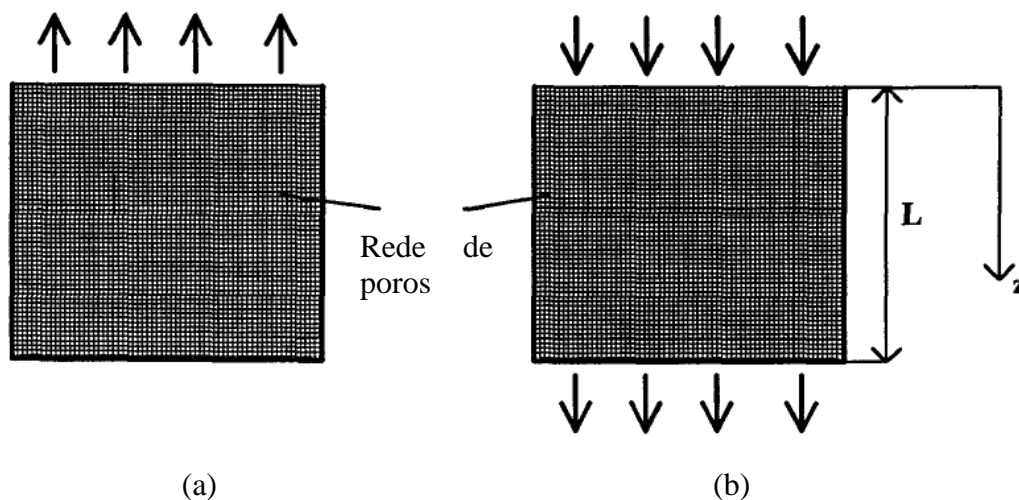


Figura 2.7: Esquema de (a) secagem e (b) drenagem em 2D. As setas indicam a direção do fluxo.(Prat, 1995)

Laurindo e Prat (1996) reportam um estudo sobre a distribuição de fases no processo de evaporação de líquidos em meios porosos. Nestes artigos foi assumida somente a ação da capilaridade no controle da evaporação, negligenciando os efeitos viscosos e considerando a transferência de massa apenas por difusão em condições isotérmicas, ou seja, somente a difusão do vapor, não foi incorporada ao transporte do líquido. A Figura 2.9 mostra um esquema do aparato utilizado para realização dos experimentos. Neste estudo foram simuladas três configurações distintas: a primeira é quando as forças de gravidade são desconsideradas ( $B=0$ ), a segunda é quando os efeitos de gravidade tendem a estabilizar o processo de evaporação ( $B>0$ ) e a terceira quando o efeito da

gravidade é de desestabilizar o processo de evaporação ( $B < 0$ ). A figura 2.10 mostra o posicionamento do aparato para atingir as configurações desejadas. O número de Bond é uma relação entre os efeitos de capilaridade e de gravidade, sendo definido como:

$$B = \frac{\Delta\rho g a^2}{\gamma} \quad (2.1)$$

Sendo  $a$  distância entre dois poros subsequentes,  $g$  é a gravidade,  $\Delta\rho = \rho_{\text{líquido}} - \rho_{\text{gás}}$  e  $\gamma$  é a tensão superficial.

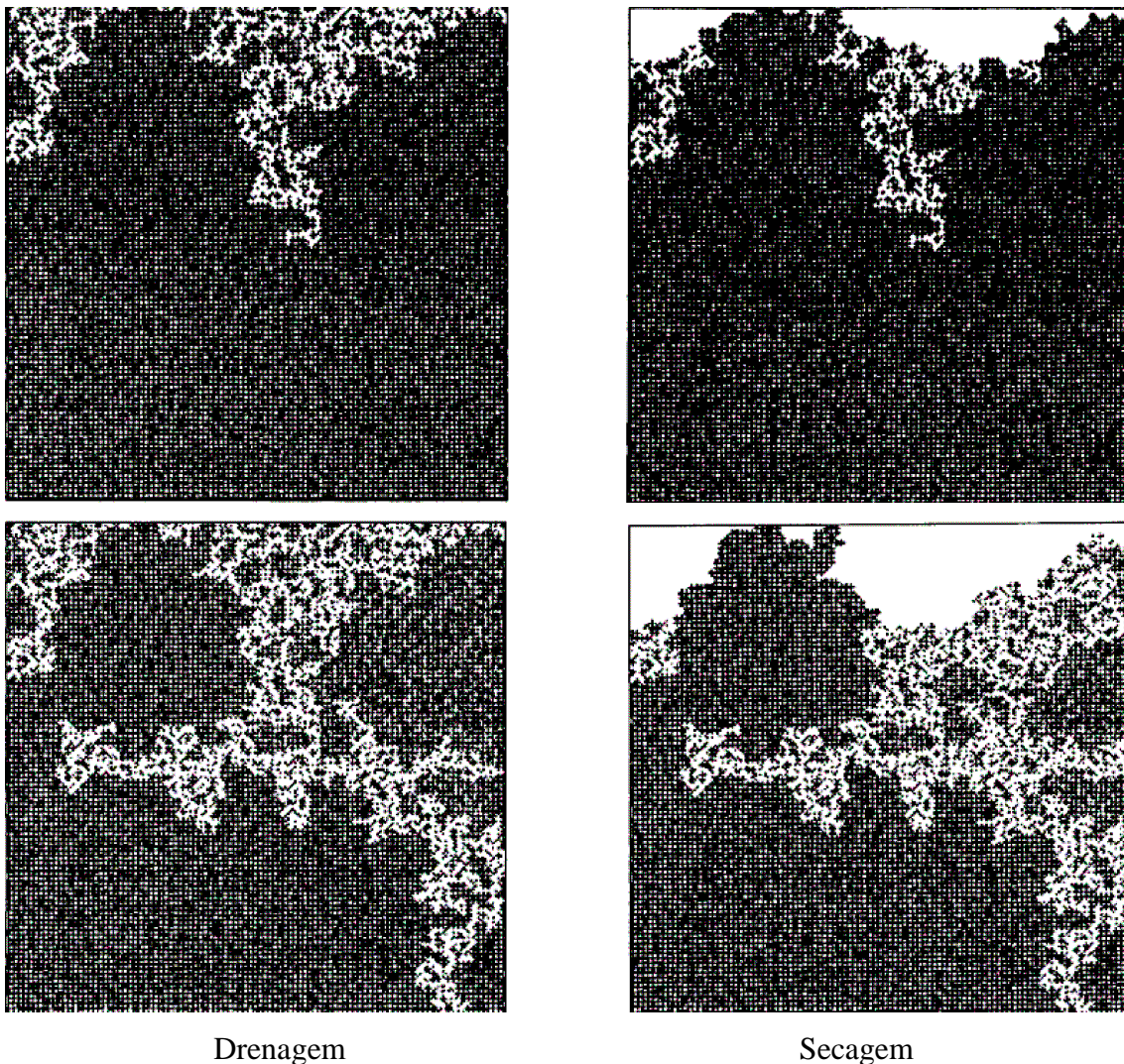


Figura 2.8: Distribuição de fase para drenagem e secagem em mesma matriz porosa e com ausência de gravidade ( $B=0$ ). O líquido está em preto e o vapor em branco. (Prat, 1995)

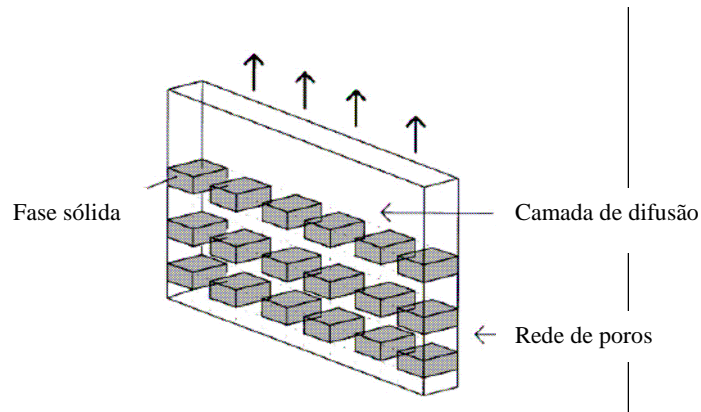


Figura 2.9: Esquema do modelo bidimensional utilizado por Prat para realização dos experimentos. (Laurindo e Prat, 1996)

No ano seguinte, Laurindo e Prat (1997) apresentam um novo trabalho enfatizando as taxas de evaporação de líquidos em meios porosos. Novamente, são apresentados resultados numéricos e experimentais. O modelo de escala de poros é o mesmo utilizado no trabalho anterior. Entretanto o modelo falha em prever adequadamente as taxas de evaporação durante o processo. Os autores atribuem este comportamento a falta de informação sobre o mecanismo de funcionamento e a real influência dos filmes e formas geométricas dos poros. Este trabalho enfatiza somente o efeito macroscópico do filme formado nas paredes dos poros nas interfaces líquido-gás quando o poro é invadido. A presença dos filmes de líquidos pode ser observada na Figura 2.11.

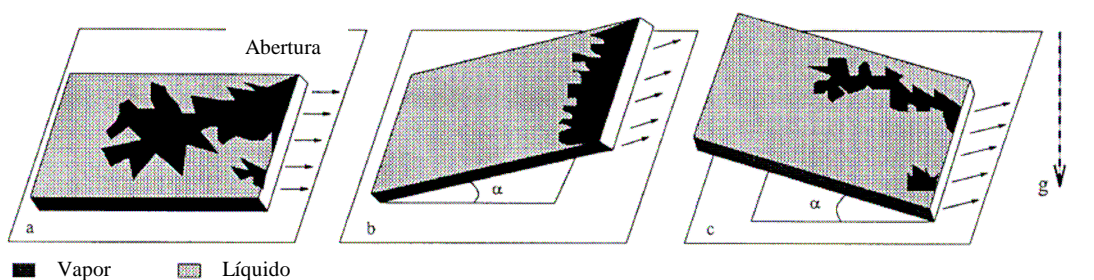


Figura 2.10: Esquema das três configurações de evaporação. (Laurindo e Prat, 1996)



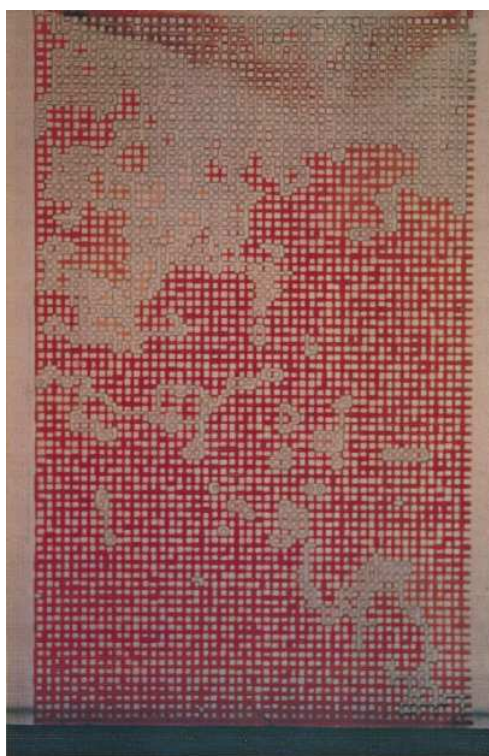


Figura 2.11: Distribuição de fase. Antes da introdução do corante todos os *clusters* eram translúcidos. Após a introdução do corante todos os *clusters* se tornam vermelhos, inclusive os *clusters* desconectados. (Laurindo e Prat, 1997)

A Figura 2.12 mostra os resultados obtidos por Laurindo e Prat (1997), a Figura 2.12 a, mostra os resultados experimentais para situações com número de Bond igual a 0; 0,35 e 0,022. Já a Figura 2.12 (b) as curvas de taxa de evaporação para as simulações numéricas. Nota-se nítida falta de acurácia entre os dados numéricos e experimentais.

Le Bray & Prat (1999) apresentam primeiro modelo de escala de poros tridimensional, sendo o modelo uma extensão dos outros já apresentados. A matriz é cúbica, formada por diversos blocos. A distribuição do comprimento dos blocos segue uma distribuição uniforme com intervalo de dados variando de 0,1mm até 0,7mm. Apenas a face superior do cubo é aberta, as outras cinco fronteiras são impermeáveis (Figura 2.13).

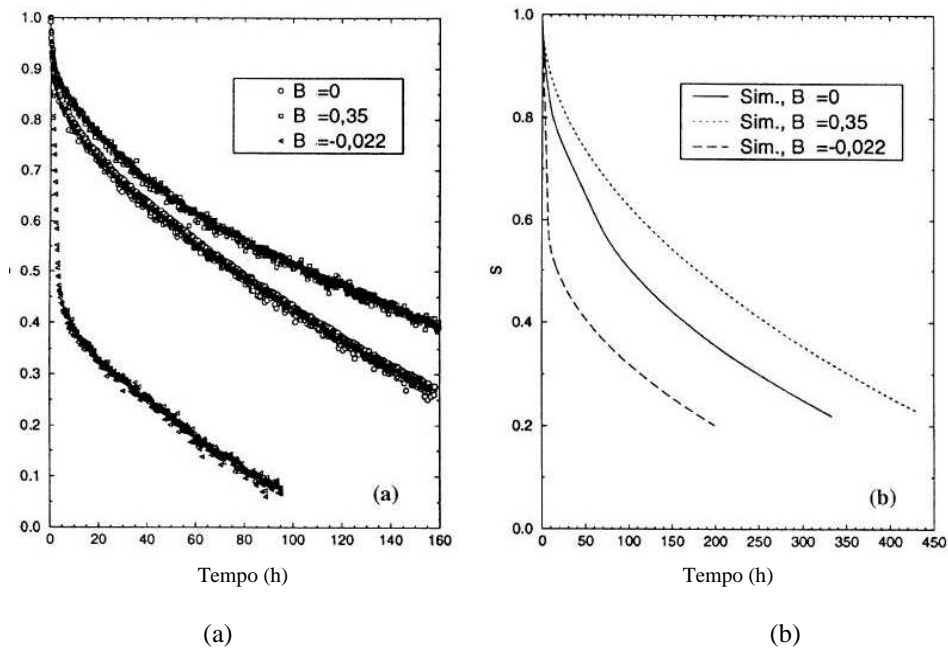


Figura 2.12: Figuras de taxa de evaporação. (a) experimental e (b) simulação. (Laurindo e Prat, 1997).

A condição de contorno na superfície é constante e calculada pela teoria de Brutsaert (1982). As condições são isotérmicas, sem presença dos efeitos de gravidade. O que levam a padrões clássicos de secagem devido à percolação. Neste estudo também foram identificados os mesmos períodos característicos de taxa de evaporação vistos no modelo bidimensional.

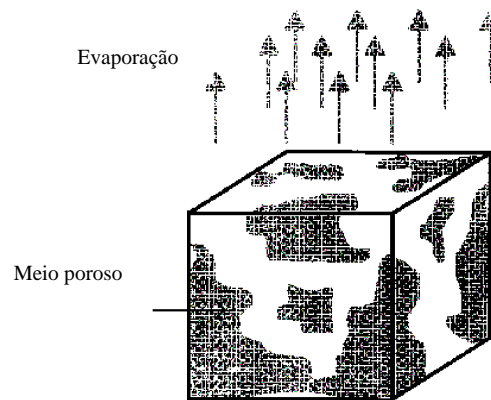


Figura 2.13: Configuração estudada (3D). (Le Bray, 1999)

Yiotis et al. (2001) reporta um estudo de escala de poros bidimensional para escoamento em meios porosos com injeção de gás em fraturas de rocha, introduzindo transferência de massa por advecção e difusão do gás, viscosidade do líquido e do gás e efeitos capilares relativos a interface líquido-gás na garganta da matriz. A Figura 2.14

mostra o contexto físico considerado no trabalho de Yiotis et al.(2001) sendo composto por uma matriz quadrada com três lados impermeáveis. O líquido está preso na matriz porosa e pode ser vaporizado pela injeção de um fluxo de gás na fratura. Neste estudo foi analisada uma grande variedade de configurações, onde a injeção do gás variava deste muito lento, onde somente os efeitos capilares podem ser considerados, até o fluxo de remoção suficientemente alta, quando os efeitos de pressão passam a ser importantes.

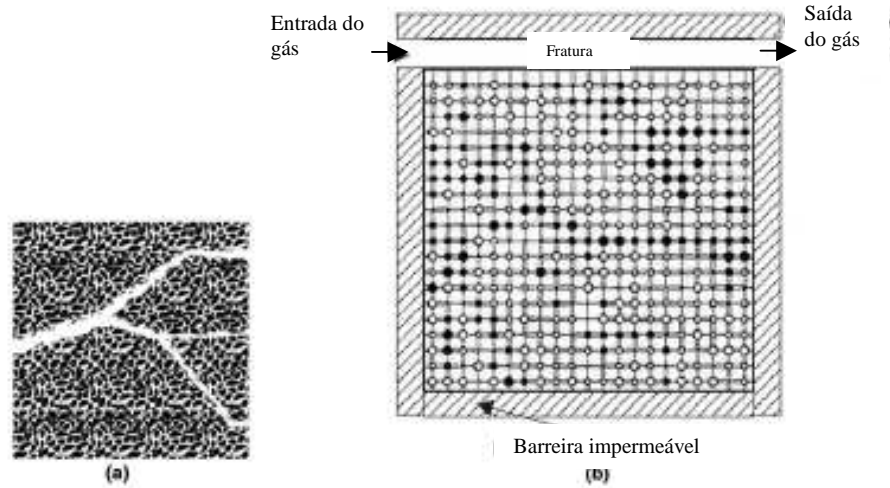


Figura 2.14: (a) Representação esquemática da fratura no meio poroso. (b) Meio poroso representado através de modelo de escala de poros. (Yiotis et al., 2001)

O transporte de vapor foi modelado através de difusão e advecção do gás, devido a injeção de gás na fratura. Então a equação que descreve esse transporte é a seguinte:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla C = D \nabla^2 C \quad (2.1)$$

Onde  $C$  é a concentração de vapor e  $\vec{u}$  é a velocidade da fase gasosa. A adição do transporte do gás através de convecção leva a necessidade de cálculo de um campo de pressão. Então a escolha do poro a ser invadido não depende somente do raio da ligação por onde o vapor será transportado. O cálculo do campo de pressão é feito separadamente através da equação:

$$Q(i, j) = \left( \frac{P_i - P_j}{l} \right) \frac{\pi r_{i,j}^4}{8\mu} \quad (2.2)$$

Sendo  $Q(i, j)$  é o fluxo volumétrico entre os poros  $i$  e  $j$ ,  $\mu$  é a viscosidade,  $P$  é a pressão nos poros e  $r$  os raio das ligações entre os poros.

Prat (2002) apresenta uma revisão dos estudos de secagem em meios porosos empregando modelos de escala de poros, até aquela data. Os resultados relatados nesse trabalho mostram que houve grandes avanços relacionados à modelagem da evaporação de líquidos na última década. Porém, muitos estudos ainda são necessários para preencher algumas lacunas, como a modelagem do filme e de evaporação mais rápidas, onde mais de um poro será invadido.

Os avanços nos estudos de secagem em meios porosos mostram que junto com a teoria de percolação os modelos de escala de poros oferecem uma alternativa para estudos de secagem que não podem ser tratados com a aproximação contínua. Também oferecem a possibilidade de prever os parâmetros efetivos para os modelos contínuos, quando considerados válidos.

Plourde e Prat (2003) reportam um estudo que analisa a influência dos gradientes de temperatura. O modelo estuda a influência dos gradientes de tensão superficial induzidos pelos gradientes térmicos na distribuição de fase. Os resultados numéricos mostram que o gradiente de tensão superficial leva a um padrão de distribuição de fase com gradiente desestabilizador ou estabilizador dependendo do sinal do gradiente térmico. O aumento da desordem na distribuição dos poros e das ligações possui o efeito de aumentar a capilaridade, dessa forma levam a padrões de distribuição de fase com gradiente estabilizador ou desestabilizador, como sumarizado no diagrama da Figura 2.15.

A Figura 2.15 mostra uma comparação entre três escalas, escala característica associada ao gradiente térmico ( $L_T$ ), escala característica associada aos efeitos viscosos ( $L_{cap}$ ) e escala da amostra ( $L_A$ ). Quando o gradiente térmico é positivo os padrões são desestabilizado e quando o gradiente térmico é negativo os padrões de distribuição de fase são estabilizado. Os padrões fractais são assumidos quando  $L_T > L_A$ .

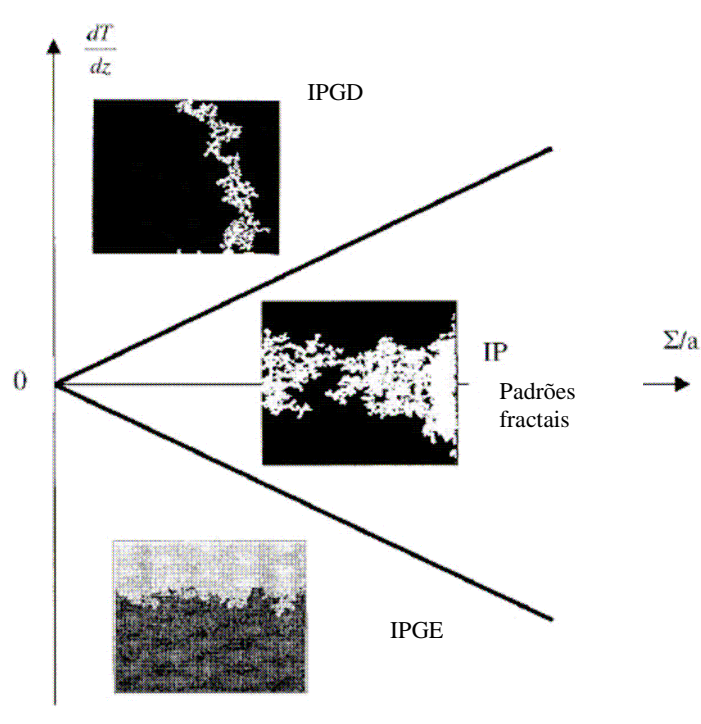


Figura 2.15: Padrões de secagem na presença de gradientes térmicos e com ausência de força viscosa e de gravidade. (Plourde e Prat, 2003)

Posteriormente, Yiotis et al. (2003) apresenta o primeiro estudo que trata da influência dos filmes na taxa de evaporação que relata que só é possível assumir a forma convencional da invasão do menisco quando este é da mesma ordem de grandeza que a seção transversal da garganta do poro. Esse menisco irá invadir o poro adjacente quando a diferença de pressão for maior que o limite da pressão capilar suportada pelo poro. Porém, para algumas geometrias de poros esse movimento é acompanhado da formação de filmes ao longo da superfície dos poros livres. Esse filme prove uma condutividade hidráulica que influencia significativamente a taxa de evaporação. A Figura 2.16 mostra a nova distribuição de fase com presença do filme. Nota-se uma região cinza que é a região onde os poros estão vazios, porém com as ligações recobertas por uma fina camada de líquido.

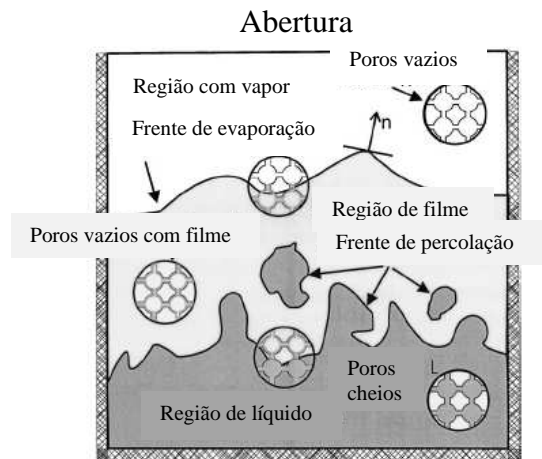


Figura 2.16: Distribuição de fase líquida e gasosa, indicando os vários tipos de poros presentes. (Yiotis, 2003)

Yiotis et al. (2005) apresentam um novo trabalho divulgando a solução de um modelo de escala de poros que contempla a difusão e advecção do gás, efeitos viscosos na região de filme e efeitos capilares nas interfaces gás-líquido. Neste trabalho ficou demonstrado que o filme é um mecanismo de transporte em evaporação em meios porosos, e que o efeito do filme inicia no começo da evaporação quando as forças capilares controlam o processo.

Negligenciando a variação de pressão no gás, a pressão capilar no poro é inversamente proporcional a largura da ligação, assim qualquer gradiente na espessura do filme ao longo do capilar resulta em um gradiente de pressão ao longo do filme de líquido. A capilaridade induz um escoamento ao longo do filme a partir da seção onde o filme é mais fino (Figura 2.17).

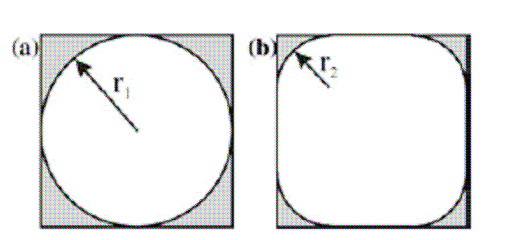


Figura 2.17: Evolução do raio do filme desenvolvido nos cantos de capilares com seção quadrada. (a) Seção mais próxima do poro e (b) seção mais afastada com filme mais fino. (Yiotis, 2005)

Neste processo a taxa de remoção de líquidos do meio poroso é a somatória de dois mecanismos: (i) a mudança de fase e (ii) o escoamento através dos filmes. Desta forma, o autor utiliza uma equação de conservação combinando estes dois efeitos ao invés de

utilizar a equação de difusão de vapor tradicionalmente utilizada em outros trabalhos. A limitação deste trabalho é a consideração de uma remoção completa dos vapores na superfície aberta do meio poroso, não incorporando a especificação de um fluxo de massa em seu equacionamento.

Yiotis et al.(2006) apresentam resultados de modelo de escala de poros em três dimensões, que contemplam efeitos capilares e térmicos na interface líquido-gás e difusão através do material poroso e pela camada limite acima da superfície do material. Os resultados deste trabalho mostram que quando uma camada de difusão é considerada acima da superfície da matriz o período de taxa de evaporação constante é maior.

A Figura 2.18 mostra a curva de evaporação característica para situações sem camada de difusão (a) e com a camada de difusão (b). Na Figura 2.18 (a), a taxa de evaporação decresce rapidamente devido à evaporação dos poros na superfície. A posição média da frente de evaporação aumenta rapidamente e quase linearmente com a saturação do líquido. Esse período pode ser associado ao excesso de líquido na superfície. Também, nos processos de evaporação típicos esse período deverá permanecer por um intervalo de tempo desprezível, devido à presença da camada de difusão sobre a superfície. Quando o *breakthrough* é atingido, o líquido não poderá retroceder mais, então o *clusters* de gás crescem dentro da matriz. Após esse instante a posição da frente de evaporação permanece praticamente constante. A Figura 2.18 (b) mostra a curva de evaporação para situação com presença da camada de difusão. A transição entre o período de taxa constante e o de taxa decrescente é nítido. A presença da camada de difusão minimiza os efeitos de evaporação dos poros localizados na superfície. A evaporação é controlada por difusão perto da superfície no início do processo. Entretanto, a Figura 2.18 mostra que o número de *clusters* e a posição média de frente de evaporação são os mesmos para situações sem camada de difusão

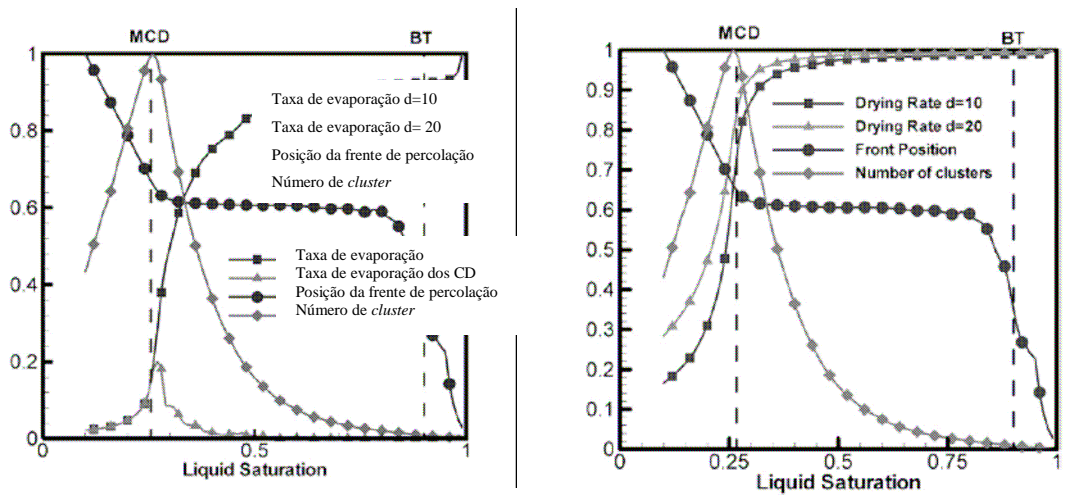


Figura 2.18: Evolução geral da evaporação. (a) sem camada de difusão e (b) com camada de difusão. (Yiotis, 2006)

Moreira e Rajagopal (2006) apresentam estudo de evaporação de líquidos em meios poroso tridimensional, sendo que as forças capilares são dominantes durante todo o processo. O estudo enfatiza análises sobre a influência dos parâmetros correlacionados, assim como a influência do tamanho da matriz porosa no processo de evaporação. O modelo de escala de poros foi utilizado para simular um tipo de solo, arenito Clashac. O meio poroso foi representado por poros cúbicos e somente a superfície estava aberta, permitindo transporte de massa, as outras cinco fronteiras eram isoladas. A distribuição de poros e ligações foi feita seguindo dois princípios: (i) a probabilidade acumulada dos diâmetros das ligações é sempre maior que a dos poros e (ii) a probabilidade de existir uma ligação com diâmetro maior que o do poro em que está ligada é nula. Varias configurações de diâmetro de poros e ligações foram analisadas, sendo que a distribuição que representou o solo foi a exponencial decrescente com fator de 0.5 para representar os diâmetros das ligações e uma distribuição uniforme para representar os poros. Juntamente com dados experimentais de “Mercury intrusion” que permitiram determinar a curva de porosidade do solo para diferentes correlações. O modelo foi bem sucedido na representação do meio poroso em questão, porém permaneceu inalterado ao diferentes níveis de correlação que poderiam ocorrer entre os poros e as ligações. Também, os padrões de evaporação foram os mesmos para todas as correlações analisadas.

Recentemente, Prat (2007) apresentou um estudo onde se verifica a importância de parâmetros governantes na evaporação de líquidos através de modelo de escala de



poros, como a forma do poro, ângulo de contato formado nos poros e filmes de líquidos na evaporação. Esse artigo reporta uma investigação dos efeitos do formato do poro e do ângulo de contato durante a evaporação, em situações isotérmicas, em meios porosos em relação aos efeitos macroscópicos do filme de líquido, quando os efeitos viscosos são importantes somente na região de filme e não nos poros saturados. A Figura 2.19 mostra o efeito do filme da taxa de evaporação. O equacionamento utilizado é bastante semelhante à Yiotis et al. (2005), porém Prat (2007) descreve mais adequadamente a condição de contorno para a superfície aberta, permitindo a adequada especificação de um fluxo de massa ou taxa de evaporação nesta superfície.

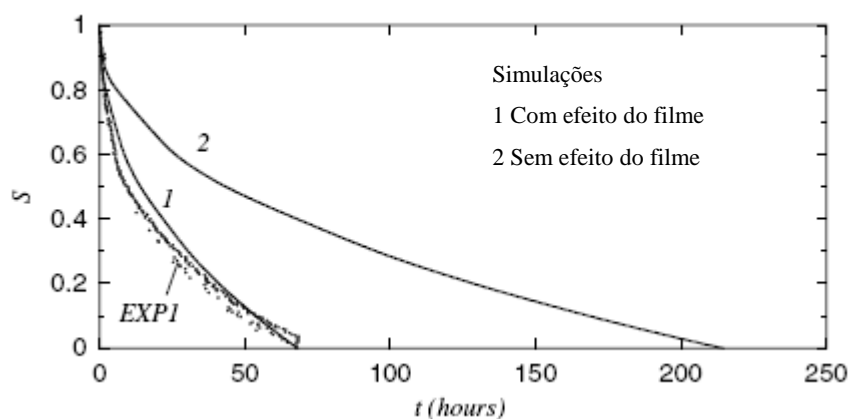


Figura 2.19: Curvas de evaporação para simulação e experimentos. Prat, 2007

Por último, Yiotis et al. (2007) apresentam trabalho relacionando a evaporação dentro da matriz porosa com o transporte acima da superfície. Usando um modelo 3D com utilização de filmes e geometria de poros cúbicos. A Figura 2.20 (a) mostra o início do processo quando o filme está em contato com a superfície. E a Figura 2.20 (b) apresenta alguns estágios seguintes, quando o filme perde o contato com a superfície e se inicia o PTD.

O estudo mostra que o PTC permanece até que o filme perca contato com a superfície. Assim, não existe mais fluxo constante de líquido para a superfície e após esse rompimento de contato o transporte fica dependente do meio poroso. Por isso a taxa de evaporação decresce rapidamente.

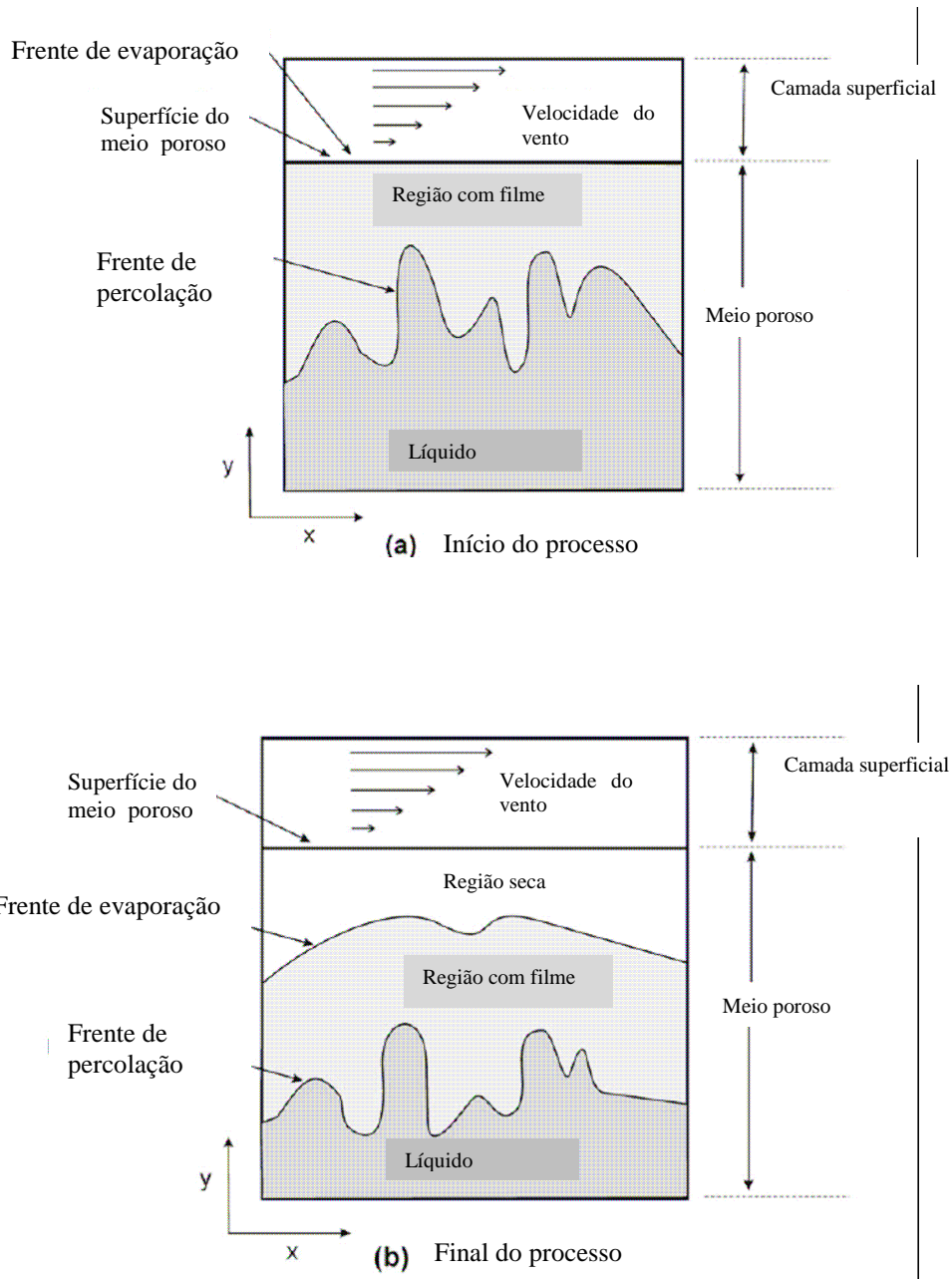


Figura 2.20: Esquema da geometria considerada para o estudo. (a) início do processo de evaporação, região de filme atinge a superfície. (b) Após alguns estágios o filme não alcança a superfície. O período de taxa constante (PTC) termina.

Este trabalho também analisa o efeito do transporte no meio externo, avaliando diferentes espessuras para a camada de difusão, conforme pode ser observado na Figura 2.21. Como pode ser observado, a espessura da camada de difusão influi consideravelmente nas curvas de taxa de evaporação. A linha tracejada mostra o momento em que ocorre a desconexão do *cluster* da superfície aberta e o início do período de taxa decrescente. O trabalho mostrou que o PTC permanece até a desconexão do *cluster* com a superfície (CPD).

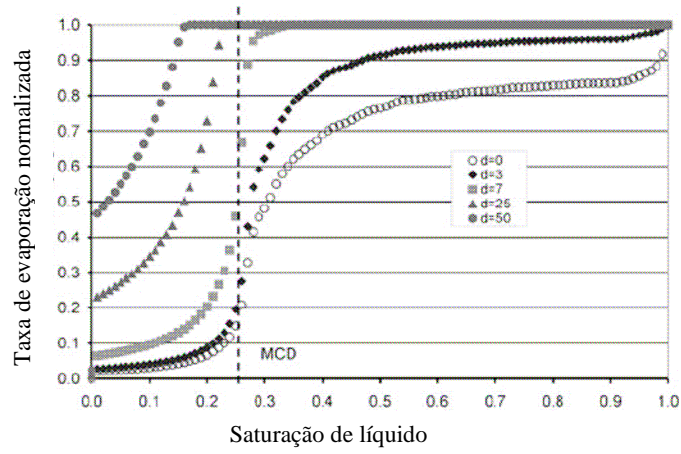


Figura 2.21: Curva taxa de evaporação para diferentes espessuras da camada de difusão. Transferência de massa externa apenas por difusão (velocidade nula). A linha tracejada mostra o CPD. (Yiotis, 2007)

### 3 METODOLOGIA

Neste capítulo será apresentado o modelo de escala de poros implementado neste trabalho, incluindo uma descrição das equações governantes, método numérico e condições de contorno empregadas. Inicialmente será descrito o modelo de escala de poros utilizado neste trabalho. E por final será apresentado o método de solução das equações de transporte de vapor na interface superfície/atmosfera e dentro da matriz porosa.

#### 3.1 Modelos de escala de poros

O modelo desenvolvido por Yiotis et al. (2001) é proposto para remoção de líquidos de solos através da injeção de gás. A Figura 3.1 mostra a um esquema da geometria do problema. Nela observa-se uma fratura onde é injetado um gás fazendo com que o líquido evapore.

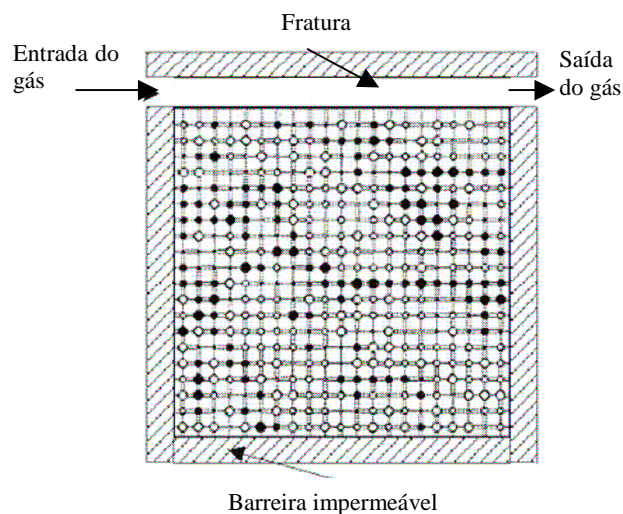


Figura 3.1: Representação do meio poroso e das condições de contorno. (Yiotis, 2001)

O modelo implementado neste trabalho é similar ao proposto por Yiotis et al, (2001). Para esta implementação a temperatura é considerada constante e longe da temperatura de ebulição do líquido, desta forma o processo é dito isotérmico. Conforme Yiotis et. al, (2001) as simulações foram realizadas utilizando uma matriz de 50x50 poros.

Os poros são considerados esféricos e as ligações cilíndricas com diâmetro dos poros e das ligações variando em um intervalo de 0,37-0,74 e 0,16-0,32 mm, respectivamente. A distribuição dos diâmetros segue uma distribuição uniforme. O comprimento entre centros dos poros é constante e igual a 2 mm. A Tabela 3.1 mostra os parâmetros físicos das propriedades do líquido de trabalho usado, o hexano.

Tabela 3.1: Propriedades do hexano

<i>Parâmetros</i>	<i>Valores</i>
Coefficiente de difusão	$6,38 \times 10^{-6}$ [m <sup>2</sup> /s]
Concentração de equilíbrio	0,266 [kg/m <sup>3</sup> ]
Densidade do líquido	650 [kg/m <sup>3</sup> ]

As condições de contorno das configurações estudadas diferenciam no que diz respeito ao fluxo de remoção imposto na fratura acima da matriz porosa. A única fronteira que permite troca de massa é a superior, as outras três são impermeáveis (Figura 3.1). Para este estudo três configurações foram selecionadas. Essas configurações foram selecionadas pelo fato do escoamento acima da superfície ser nulo ou muito próximo de zero. Apesar de existir um escoamento acima da superfície as forças capilares são governantes durante todo o processo.

A Tabela 3.2 mostra as configurações simuladas, sendo que  $t_{Adm}$  representa o tempo em que a matriz iria evaporar se mantivesse a taxa de evaporação máxima durante todo o processo, que ocorre no início do processo de evaporação. O número de Pecle expressa uma relação entre a advecção e a difusão no escoamento na fratura, é definido como:

$$Pe = V_f \frac{l}{D} \quad (3.1)$$

Onde  $V_f$  é a velocidade do gás na fratura,  $D$  o coeficiente de difusão e  $l$  o comprimento entre centro de poros.

Tabela 3.2: Parâmetros físicos utilizados nas simulações.

Configuração	$Q(m^3/s)10^{-6}$	Pe	$t_{Adm}$ (s)
1	0,005	6,7	57.819
2	0,0005	0,66	88.752
3	0,0	0,0	166.132

A implementação da taxa de remoção na superfície é efetuada a partir da solução da equação de conservação de massa de vapor (convecção e difusão) na forma unidimensional ao longo da fratura. Tal implementação é descrita no Apêndice A.

Para estas configurações as forças capilares são dominantes e a transferência de massa ocorre apenas por difusão. Cada simulação foi repetida dez vezes com intuito de estabilizar os dados médios obtidos pelo modelo devido à natureza randômica de distribuição de distribuição de diâmetro de poros e ligações.

A evaporação ocorre em toda a superfície da interface gás/líquido, fazendo com que a massa de líquido seja gradualmente reduzida. Durante este processo, o líquido movimenta-se dentro da região saturada, redistribuindo-se das regiões de maior pressão capilar (maior raio de curvatura no interior das ligações) para as regiões de menor pressão capilar (menor raio de curvatura no interior das ligações). Desta forma os poros com ligações de maior raio serão esvaziados antes dos poros com ligações de menor raio.

O modelo de escala de poros se baseia na idéia de que apenas um poro é invadido por vez, isto é um poro será invadido pelo gás (poro evaporado). A escolha do poro que será invadido está relacionada com a pressão capilar nos meniscos formado nas ligações entre os poros. Quando um poro está em contato com outro que não possui líquido (inicialmente esta condição está na superfície) é criada uma diferença de pressão interfacial que é devida a pressão capilar no interior do canal e pode ser calculado por:

$$P_c = \frac{2\gamma}{r} \quad (3.2)$$

onde  $\gamma$  é o coeficiente de tensão superficial e  $r$  é o raio da ligação entre os poros. Assim o poro que será invadido será o que tiver maior raio da ligação.

Devido à redistribuição de líquidos dentro da matriz porosa é considerada a evaporação de apenas um poro. O deslocamento do líquido dentro da matriz é feito através da pressão exercida pelo líquido (fluidos se deslocam de locais de maior pressão para de menor pressão). Enquanto parte do líquido é transformado em vapor, o restante é rearranjado de forma que se desloquem do poro de maior pressão para o restante da matriz, isto é dos poros com o menor diâmetro de ligação. Com isso têm se a impressão de um único poro ser totalmente evaporado, mas na verdade o fluxo é transportado de todos os poros da superfície e ao final desce de apenas um. Apesar de apenas um poro ser invadido toda a superfície exposta do líquido evapora. Portanto, a taxa de evaporação deve ser determinada em toda a interface líquido/gás.

Para implementar a seqüência das operações que simula a secagem são distintos três tipos básicos de poros: (i) totalmente ocupados por gás ou poros vazios, (ii) poros totalmente ocupado por líquido ou poros cheios e (iii) e aqueles ocupados com líquido e vapor ou poros parcialmente cheios.

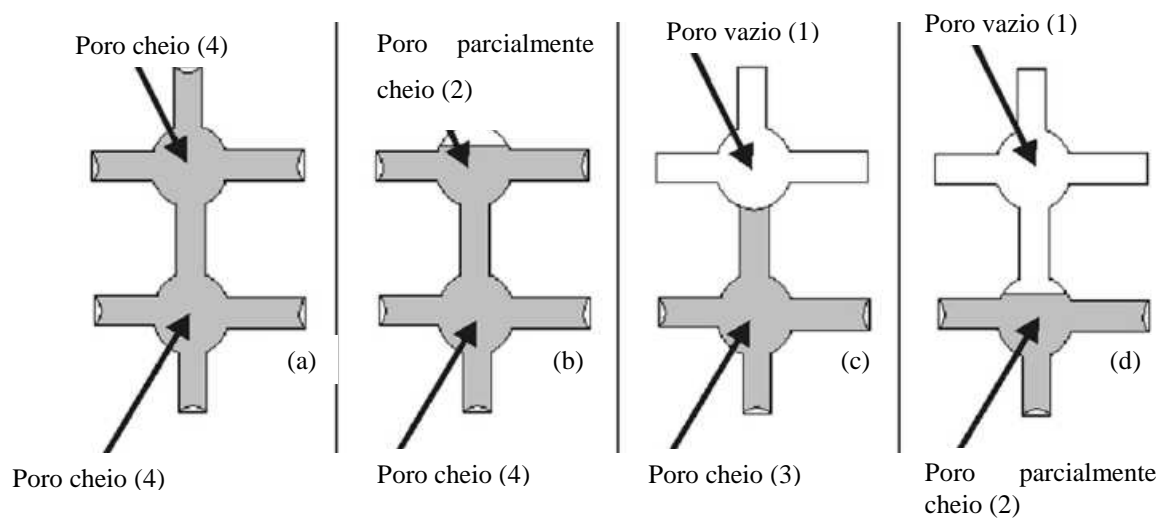


Figura 3.2: representação esquemática da evolução da secagem, onde estão indicados os tipos de poros (1, 2, 3 e 4), onde (a) é o instante inicial com dois poros cheios, (b) um dos poros é invadido, (c) e (d) a invasão do segundo poro.

A Figura 3.2 mostra os três tipos de poros e a evolução da secagem em um *cluster* isolado. Inicialmente os dois poros estão cheios e cercados por poros vazios (Tipo 1). Quando a diferença de pressão é maior que a pressão capilar suportada pelo poro, o

menisco retrocede deixando que o gás invada o poro. Essa transição ocorre nos estágios (c) e (d).

Conforme proposto por Yiotis et al. (2001), foram utilizadas cinco categorias de poros, para um melhor acompanhamento da evolução do líquido e do vapor dentro da matriz, que são os descritos abaixo.

Poros Tipo 0 (zero). Poro vazio com todas as ligações vazias: poro totalmente vazio com todas as quatro ligações em contato com poros vazios. Esse tipo de poros indica quando a matriz está totalmente seca; quando a quantidade de poros de tipo zero atingir a quantidade de poros cheios inicialmente a matriz estará completamente vazia.

Poros Tipo 1 (um). Poro vazio com pelo menos uma ligação que ainda não foi invadida: este poro está totalmente vazio, mas com pelo menos uma ligação ainda cheia, isto significa que um dos quatro poros vizinhos ainda está cheio.

Poros Tipo 2 (dois). Poro parcialmente cheio: este poro não teve tempo para ser totalmente evaporado em uma interação de tempo, nesta interação em questão existe um poro de outro *cluster* que possui barreira capilar menor, então este será totalmente evaporado enquanto que o poro tipo dois evaporara apenas uma parte. Os poros tipos dois existem enquanto existirem mais de um *cluster* na matriz.

Poros Tipo 3 (três). Poro cheio com todas as ligações cheias: esses poros são os centrais de toda a matriz, eles somente fazem contatos com poros cheios. Apesar de eles estarem cheios não podem evaporar, visto que a transferência de fase ocorre somente em poros que fazem contato com uma superfície livre.

Poros Tipo 4 (quatro). Poro cheio com pelo menos um vizinho vazio: são os poros propícios a serem evaporados, estão em contato com poros vazios como na superfície ou na interface gás/líquido.

A mudança de fase ocorrerá somente dentro dos poros, pois como foi dito anteriormente os canais não possuem volume. A taxa de evaporação deverá ser calculada em todos os



poros cheios ou parcialmente cheios que tiverem contato com poros vazios. A taxa de evaporação em uma ligação conectando o poro  $i$  ao poro  $j$  é escrita como:

$$T_{ij} = \pi r^2 D \left[ \frac{C_i - C_j}{l} \right] \quad (3.3)$$

onde  $D$  é o coeficiente de difusão de vapor no ar,  $l$  é o comprimento entre centros dos poros adjacentes,  $C_i$  e  $C_j$  são as concentrações de vapor nos poros  $i$  e  $j$ , respectivamente. Se o poro está cheio de líquido ou parcialmente cheio a concentração neste caso será a concentração de equilíbrio de vapor no ar (concentração de saturação). Quando o poro está vazio a concentração de vapor será calculada através a equação de transporte de vapor dentro da matriz. A equação que representa este transporte é:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2} \quad (3.4)$$

onde  $C$  é a concentração de vapor no poro,  $t$  é o tempo e  $D$  é o coeficiente de difusão do vapor. Para cada poro essa concentração é calculada como um balanço de massa entre os poros adjacentes e é expresso por:

$$V_i \frac{\Delta C_i}{\Delta t} = \sum \left[ D \pi r_{ij}^2 \frac{C_i - C_j}{l} \right] \quad (3.5)$$

onde  $V$  é o volume do poro,  $C$  a concentração de vapor,  $D$  é o coeficiente de difusão de vapore  $r$  o raio da ligação entre os poros adjacentes. Assim, a concentração de gás em todo o substrato é calculada com base no balanço de massa descrito pela equação 3.5.

Com a evolução do processo de evaporação, o esvaziamento dos poros pode produzir regiões isoladas de líquido, também chamada de *cluster* ou conjunto de poros (Figura 3.3). Assim, o líquido poderá permanecer em dois tipos diferentes de *clusters*. O primeiro é o *cluster* contínuo que é parte do *cluster* inicial e pode ser definido como sendo o principal reservatório de líquido, e vários *clusters* descontínuos, que são regiões de líquido totalmente cercado por vapores que foram desligados do *cluster* inicial (Figura 3.3). As suas configurações, geometrias e tamanhos são importantes nos padrões e nas taxas de evaporação.

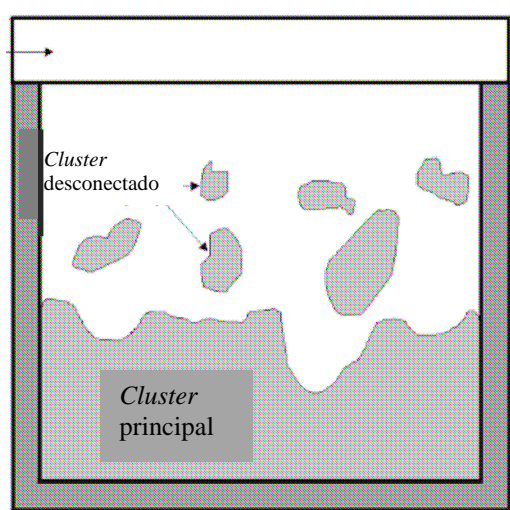


Figura 3.3: *Clusteres* contínuos e descontínuos. (Yiotis et al., 2001)

O cálculo da taxa de evaporação de cada *cluster* é efetuado através da somatória dos fluxos através de todas as ligações na superfície do *cluster*. A taxa de evaporação de toda a matriz será função da quantidade de *cluster*, quanto maior o número de poros que fazem fronteira com poros vazios maior será a taxa de evaporação da matriz. Assim com o aparecimento de *clusteres* o cálculo da taxa de evaporação passa a ser diferente.

Durante a seqüência de operação do algoritmo é necessário que, a cada instante de tempo, se conheça a localização dos poros que compõem cada *cluster*, uma vez que cada *cluster* evapora de maneira independente. Assim, em cada passo de tempo deve-se saber qual o poro será invadido em cada *cluster*, isto é, qual o poro de maior ligação em cada *cluster*. Todos os poros pertencentes à superfície dos *clusteres* contribuirão para a taxa de evaporação de cada *cluster*.

Após a determinação da taxa de evaporação de cada *cluster*, deve-se selecionar o tamanho do passo de tempo ( $\Delta t$ ) para o avanço no tempo. O valor de  $\Delta t$  deve ser suficientemente pequeno para garantir que apenas um poro em toda a matriz seja esvaziado ou invadido em cada intervalo de tempo. Entretanto, o intervalo de tempo escolhido não é suficiente para evaporar completamente os poros selecionados de todos os clusters existentes, nesse caso alguns poros serão evaporados parcialmente formando um poro do tipo dois.

### 3.1.1 Transporte na interface meio poroso/atmosfera.

Conforme citado anteriormente, neste trabalho a rede 2D possui três lados impermeáveis ao escoamento e a transferência de massa. O único lado que permite troca de massa é a superior, ao longo do qual o escoamento remove o vapor do meio poroso. Inicialmente a matriz é saturada com líquido. Na superfície, entretanto, contém apenas ar (concentração de saturação igual a zero) no início do processo.

A dispersão do vapor na atmosfera depende das condições atmosféricas locais. Dois parâmetros são utilizados para modelar o transporte de massa na interface da matriz com a atmosfera, o Comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ) e a velocidade de fricção ( $u_*$ ).

A velocidade de fricção é o tensor cisalhamento próximo a superfície. Durante situações onde a turbulência é gerada ou modelada por cisalhamento do vento próximo a superfície, a magnitude do tensor de Reynolds é uma importante variável.

O fluxo total vertical de momento horizontal na superfície é medido por:

$$\tau_{xy} = -\bar{\rho} \overline{u'w'} \quad \text{e} \quad \tau_{yz} = -\bar{\rho} \overline{v'w'} \quad (3.6)$$

Então,

$$|\tau_{Reynolds}| = (\tau_{xy}^2 + \tau_{yz}^2)^{1/2} \quad (3.7)$$

Baseado nesta relação, a escala de velocidade chamada de velocidade de fricção é definida por:

$$u_*^2 = \frac{|\tau_{Reynolds}|}{\bar{\rho}} \quad (3.8)$$

Já o Comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ) representa uma relação entre as forças de empuxo térmico e de momento. Essas são forças responsáveis pela turbulência atmosférica que irá dispersar os gases na atmosfera. O comprimento de Monin-Obukhov apresenta um significado físico bem definido com relação à estabilidade atmosférica e com relação à importância relativa das fontes e sorvedouro de energia

cinética turbulenta. Quando  $L$  é positivo o fluxo turbulento de calor sensível é negativo e neste caso a camada limite planetária é dita estável. Quando  $L$  é negativo o fluxo vertical turbulento de calor sensível é positivo e assim a atmosfera é considerada instável. Quando o fluxo é nulo,  $|L|$  tende para infinito, portanto a estabilidade atmosférica é neutra (Tabela 3.3).

Tabela 3.3: Interpretação do comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ) com respeito a estabilidade atmosférica.

L		Estabilidade
Pequeno negativo	$-100\text{m} < L < 0$	Muito instável
Grande negativo	$-10^5\text{m} \leq L \leq -100\text{m}$	Instável
Muito grande	$ L  > 10^5\text{m}$	Neutra
Grande positivo	$10\text{m} \leq L \leq 10^5\text{m}$	Estável
Pequeno positivo	$0 < L < 10\text{m}$	Muito estável

A evaporação de líquido em superfícies porosas é descrito através do transporte de vapor dentro do meio poroso e fora dele. Na atmosfera é assumido que o transporte de vapor de líquido é vertical, difusão nas outras direções são negligenciadas. Essa hipótese permite o tratamento unidimensional do transporte de vapor na matriz porosa e na atmosfera. A teoria utilizada para descrever o transporte de vapor na atmosfera é baseada no critério fundamental de que o gás se comporta como um contaminante inerte. Para pequenas taxas de evaporação esse critério é válido. (Roberts e Griffiths, 1994)

Brutsaert (1982) define como superfície aerodinamicamente lisa aquelas que atendam ao critério de  $z_{o+} < 0,13$ , e superfícies aerodinamicamente rugosa quando  $z_{o+} > 2$ . Onde  $z_{o+}$  é o número de Reynolds rugoso, definido como  $u_* z_0 / \nu$ , sendo a  $u_*$  velocidade de fricção,  $\nu$  a viscosidade cinemática e  $D$  a difusividade molecular do vapor. Segundo Roberts e Griffiths (1994), o limite de escoamento laminar é assumido igual a  $z_{o+} = 1$  e para  $z_{o+} > 1$  o escoamento será tratado como turbulento. Os campos de vento na atmosfera, e a maioria dos cenários de interesse apresentam superfície aerodinamicamente rugosa.

O transporte do gás da superfície para a atmosfera incorpora a teoria de Brutsaert (1982) e pode ser tratado em duas partes. Na subcamada interfacial adjacente a superfície o transporte é realizado por difusão molecular dentro da escala de Kolmogorov. Acima da subcamada interfacial, o perfil vertical de gás é descrito através da Teoria de Similaridade que leva em conta as condições de estabilidade atmosféricas. As duas partes são acopladas formando assim uma equação para o transporte externo que governa o fluxo do gás da superfície para a atmosfera. O fluxo externo,  $E_e$ , é dado por:

$$E_e = v_r (C_i - C_r) \quad (3.9)$$

Onde  $v_r$  é a velocidade externa do gás,  $C_i$  é a concentração do gás na interface superfície/ar e  $C_r$  é a concentração do gás na altura de referência acima da superfície  $Z_r$ .

A velocidade externa do gás depende das condições atmosféricas, rugosidade da superfície e da altura de referência, e é parametrizada:

$$v_r = \frac{k u_*}{\left[ \ln\left(\frac{Z_r}{Z_{0v}}\right) - \psi_v\left(\frac{Z_r}{L}\right) + \psi_v\left(\frac{Z_{0v}}{L}\right) \right]} \quad (3.10)$$

Onde  $k$  é a constante de von Karman,  $u_*$  é a velocidade de fricção,  $Z_{0v}$  é o comprimento de rugosidade,  $L$  é o comprimento de Monin-Obukhov e  $\psi_v$  é a função do perfil do gás na atmosfera que é, por sua vez, uma função da estabilidade atmosférica ( $\xi = \frac{Z}{L}$ ).

Tabela 3.4: Perfil do gás na atmosfera.

<i>Condições atmosféricas instáveis ou neutras</i> ( $\xi \leq 0$ )	<i>Condições atmosféricas estáveis</i> ( $\xi > 0$ )
$\psi_v(\xi) = 2 \ln \left[ \frac{(1+x^2)}{2} \right]$	$\psi_v(\xi) = -5\xi$

$$\text{Sendo } x = (1 - 16\xi)^{\frac{1}{4}}$$

Através do comprimento de mistura,  $Z_{O_v}$ , tem-se uma maneira conveniente de representar as complexas transferências de massa nas camadas próximas à superfície, e depende da rugosidade aerodinâmica da superfície e do número de Reynolds rugoso  $Z_{O_+}$ :

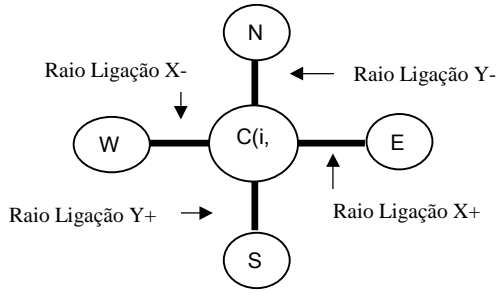
Tabela 3.5: Número de Reynolds rugoso para superfícies lisas e rugosas.

<i>Superfície lisa (<math>Z_{O_+} &lt; 1</math>)</i>	<i>Superfície rugosa (<math>Z_{O_+} &gt; 1</math>)</i>
$Z_{O_v} = (30\nu / u_*) \exp\left(-13,6k.Sc^{\frac{2}{3}}\right)$	$Z_{O_v} = 7,4.Z_o.\exp\left(-7,3kZ_o^{\frac{1}{4}} + Sc^{\frac{1}{2}}\right)$

Onde  $Sc$  é o número de Schimidt definido por  $\nu / D$ , o número de Reynolds rugoso  $Z_{O_+}$  é definido como  $\frac{u_* Z_o}{\nu}$ , sendo  $\nu$  a viscosidade cinemática e  $D$  a difusividade molecular do gás.

### 3.2 Método numérico para solução da equação de transporte de vapor.

A equação 3.5 é escrita para cada poro da matriz, com base na convenção apresentada na Figura 3.4. O poro central do *grid* é denominado P e seus vizinhos por E (leste, x positivo), W(oeste, x negativo), N (norte, y positivo) e S (sul, y negativo).



(b)

Figura 3.4: Volume de controle típico utilizado neste trabalho.

Com um tratamento totalmente implícito no tempo as equações para cada poro podem ser escritas como:

$$a_P C_P = a_W C_W + a_E C_E + a_S C_S + a_N C_N + a_P^0 C_P^0 \quad (3.11)$$

Onde,

$$a_P = a_P^0 + a_W + a_E + a_S + a_N \quad (3.12)$$

E

$$a_P^0 = \frac{V_{Poros}}{\Delta t} \quad (3.13)$$

Com

$$a_E = D \frac{\pi r_{Xe}^2}{l} \quad (3.14)$$

$$a_W = D \frac{\pi r_{Xw}^2}{l} \quad (3.15)$$

$$a_N = D \frac{\pi r_{Yn}^2}{l} \quad (3.16)$$

$$a_S = D \frac{\pi r_{Ys}^2}{l} \quad (3.17)$$

Sendo  $D$  o coeficiente de difusão e  $r$  o raio da ligação por onde o vapor será transportado.

A equação acima é a forma final discretizada para ponto nodal P, onde  $C_P^0$  refere aos valores conhecidos em  $t$ , enquanto os outros valores ( $C_P$ ,  $C_E$ ,  $C_W$ ,  $C_N$ ,  $C_S$ ) são os

valores desconhecidos em um tempo qualquer ( $t + \Delta t$ ),  $\Delta V$  é o volume do volume de controle, neste caso o volume do poro,  $a_P$ ,  $a_E$ ,  $a_W$ ,  $a_N$ ,  $a_S$  e  $b$  são os coeficientes discretizados relacionando o ponto P aos seus vizinhos e  $C_P$ ,  $C_E$ ,  $C_W$ ,  $c_N$  e  $C_S$  são os valores de concentração nos poros  $P$ ,  $E$ ,  $W$ ,  $N$  e  $S$ . O sistema de equações lineares gerado é resolvido através de método SOR (*Successive Over-relaxation*) com base em um algoritmo Gauss-Seidel (Ruggiero,1997)

### 3.3 Código computacional

O código computacional foi implementado em Fortran 90. A Figura 3.5 apresenta uma visão geral do algoritmo, incluindo a distribuição dos diâmetros dos poros e das ligações, determinação dos *clusters*, a escolha do poro que será evaporado, a distribuição de vapor gerado na matriz e a remoção do vapor para a atmosfera.



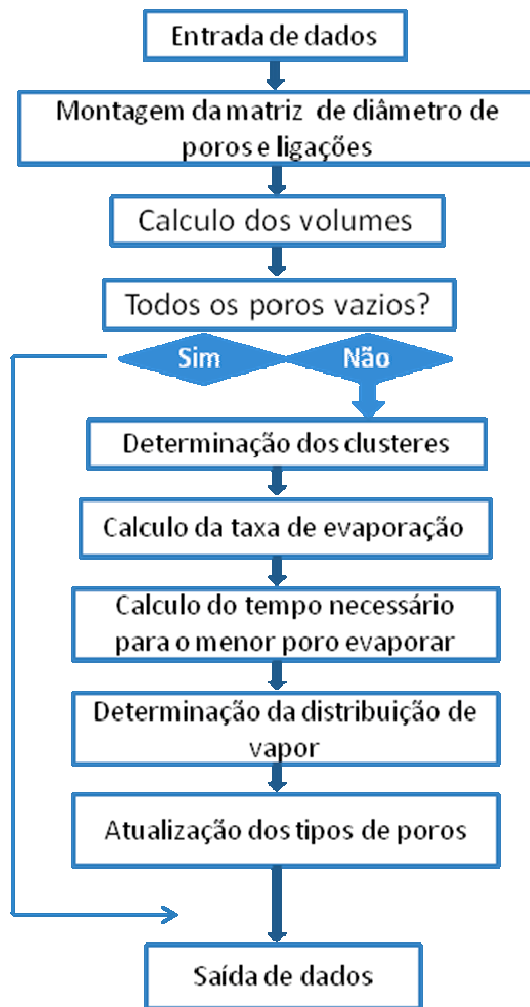


Figura 3.5: Visão geral do algoritmo implementado.

O algoritmo inicia com a entrada de dados física do meio poroso, como diâmetro máximo e mínimo dos poros e das ligações; quantidade de poros em cada direção. E com as propriedades do líquido, concentração de saturação, coeficiente de difusão e densidade. Após a entrada de dados a matriz de poros e ligações é gerada levando em consideração uma distribuição uniforme de valores. Com o diâmetro dos poros é possível calcular o volume de líquido que irá evaporar, esse é o volume de todos os poros. Em seguida todos os poros são classificados, inicialmente, somente os poros da superfície são do tipo 3 ( poros cheios com vizinhos vazios).

Após a montagem da matriz e definição dos tipos dos poros, o algoritmo inicia um loop até o final da evaporação, esse loop só termina quando todos os poros estiverem vazios com todos os vizinhos vazios.

A primeira rotina dentro do loop é a escolha de todos os *clusters* formados, durante a primeira evaporação existe apenas uma massa de líquido, o *cluster* principal, e todos os poros pertencem a esse *cluster*. Em seguida a determinação dos *clusters* é calculada a taxa de evaporação de todos os poros pertencentes a cada *cluster*. A taxa de evaporação do passo de tempo é a somatória das taxas de evaporação de todos os *clusters* existente nesse instante.

Depois o poro com menor pressão capilar é escolhido, esse poro será o que estiver na superfície do *cluster* e dentre esses o que possuir o maior diâmetro das ligações. O poro escolhido determina o intervalo de tempo da interação. Esse intervalo é determinado como sendo o tempo necessário para o poro escolhido ser evaporado com a taxa de evaporação do *cluster* há que ele pertence. Agora o poro pode ser evaporado, o conteúdo do poro com menor pressão capilar será totalmente evaporado e os poros com menores tensões capilar dos outros *clusters* serão parcialmente evaporado. Em seguida os poros são classificados novamente, o poro que foi invadido passa a ser vazio (tipo 1 ou tipo 0) e os parcialmente invadidos serão tipo 2. O último passo dentro do loop é o cálculo da distribuição de vapor nos poros vazios. Quando todos os poros estiverem vazios é finalizado o loop.

Por final todos os dados de saída são gravados. Os dados gerados são os seguintes, taxa de evaporação, saturação do gás, concentração de vapor em todos os poros para todas as interações e quais os poros estão cheios para cada interação.

## 4 RESULTADOS

Este capítulo apresenta os resultados de simulação obtidos, assim como a avaliação de precisão do modelo desenvolvido neste trabalho. Com o objetivo de avaliar a precisão da implementação do modelo de escala de poros deste trabalho, a Seção 4.1 apresenta uma comparação dos resultados obtidos com o modelo numérico implementado e os resultados de Yiotis et al. (2001). Já a Seção 4.2 será destinada a avaliação dos parâmetros governantes na evaporação de líquidos em meios porosos expostos à atmosfera.

### 4.1 Análise da precisão do algoritmo.

A avaliação de precisão do modelo proposto esta baseada em três diferentes parâmetros, o primeiro é a avaliação das curvas de evaporação de cada simulação. As curvas de evaporação consistem em curvas onde se observa a evolução da saturação de líquido com o tempo. Inicialmente a quantidade de líquido presente na matriz é máxima e com o passar do tempo essa concentração de líquido vai diminuindo a medida que a evaporação acontece. O segundo parâmetro é a comparação da distribuição de líquido durante a evaporação em instantes pré-estabelecidos, sendo eles quando a quantidade de massa atinge 80%, 60%, 40% e 20% do total de líquido inicial. Por final o terceiro parâmetro verificado foi a distribuição de concentração de vapor dentro da matriz porosa para os mesmos instantes mencionados.

#### 4.1.1 Curvas de evaporação.

A Figura 4.1 representa as curvas de evaporação para as três configurações simuladas. Três curvas são apresentadas para cada configuração, sendo a linha cheia a média aritmética de todas as dez simulações para cada configuração e as linhas tracejadas os maiores e os menores valores dentre as dez simulações. Os valores encontrados por Yiotis et al.(2001) estão representado por triângulos, que representam os resultados de uma única simulação. A escala de tempo apresentada nos gráficos a seguir são adimensionalizados em relação ao tempo ( $t_{Adm}$ ) em que a matriz iria evaporar se mantivesse a taxa de evaporação máxima, conforme proposto por Yiotis et al. (2001).

As curvas apresentadas na Figura 4.1 apresentam uma concordância relativamente boa com os dados de Yiotis et al. (2001). A pior concordância foi obtida para a configuração 1 (Figura 4.1 (a)). Pode se observar que nos primeiros estágios do processo de evaporação a média das interações representou bem os dados da literatura, porém com o passar do tempo a curva de evaporação média obtida neste estudo se afasta gradualmente do resultado obtido por Yiotis et al.(2001). Após cessar o contato com a superfície a taxa de evaporação passa a ser limitada pelo meio poroso, em casos com o fluxo intenso sobre a superfície as forças relacionadas com a pressão do escoamento passam a influenciar a evaporação do líquido no meio poroso, o que não é incorporado no modelo implementado neste trabalho. Na configuração 1 os valores do fluxo de remoção são tais que os efeitos relacionados com a pressão não podem ser totalmente desconsiderados, tornando o modelo menos acurado se comparado com simulações onde existe somente força capilar.

A Figura 4.1 (b) apresenta a curva de evaporação da configuração 2. Os resultados obtidos pelo modelo proposto se ajustam melhores as resultados apresentados por Yiotis et al. (2001).

Desta maneira a Figura 4.1 (c) apresenta a curva de evaporação para a configuração 3, que não possui escoamento sobre a superfície da matriz porosa. Neste caso a remoção de vapores ocorre por difusão na fratura. Com a ausência do escoamento acima da superfície apenas os efeitos capilares estão atuando e a precisão do modelo é melhor.

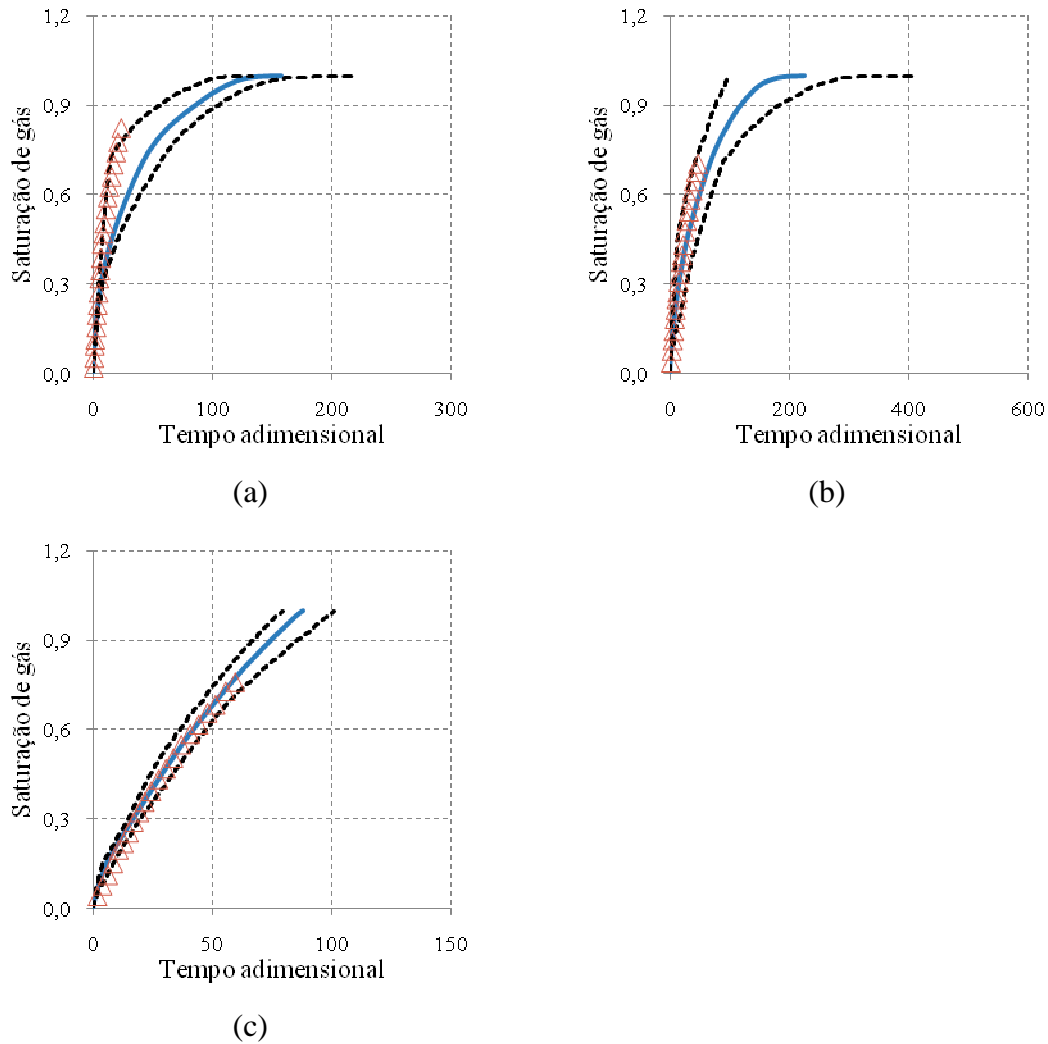


Figura 4.1: Curva de evaporação para as configurações (a) 1, (b) 2 e (c) 3. A linha cheia representa a média das dez interações simuladas e as linhas tracejadas representam os maiores e menores valores encontrados nas dez simulações. Os triângulos são os dados obtidos por Yiotis et al. (2001).

#### 4.1.2 Comparação da distribuição de líquido

As Figura 4.2 e 4.3 apresentam as distribuições de fase líquida de duas simulações para diferentes intervalos de tempo, os intervalos escolhidos foram os mesmos propostos por Yiotis et al. (2001) e representam a distribuição de líquido quando são atingidos 80%, 60%, 40% e 20% de massa restante no meio poroso. As colunas da esquerda mostram os resultados obtidos pelo modelo proposto e as colunas da direita os resultados obtidos pelos autores. As figuras lado a lado mostram o mesmo intervalo de tempo. O líquido está representado em preto e o vapor em branco (cinza para os dados da literatura).

A Figura 4.2 demonstra os resultados obtidos para uma simulação da configuração 2. Durante todo o processo de evaporação é observado uma similaridade entre as duas colunas. Analisando rapidamente os resultados pode parecer que a evaporação dos poros ocorre preferencialmente da esquerda para a direita devida à direção do escoamento. Entretanto, essa afirmação não é verdadeira, como o algoritmo segue a teoria da percolação a possibilidade de um poro ser invadido por gás é a mesma para todos os poros do *cluster* principal. Na Figura 4.2 (a), em ambos os casos, o contato com a superfície é pequeno, também se pode observar a formação dos *clusters* descontínuos. Neste estágio ainda existe uma forte influência do escoamento sobre a evaporação do *cluster* principal, devido ao contato do mesmo com a superfície. Em outras palavras, ainda existe líquido a ser evaporado próximo a superfície.

A partir da Figura 4.2 (b) o contato com a superfície já não existe mais, nas duas colunas, e então o meio poroso passa a ser fator limitante na taxa de evaporação. Assim um maior número de *clusters* desconectados foi formado. A evaporação dos *clusters* desconectados ocorre mais rapidamente devida a baixa concentração de vapor que os cercam próximos à região de entrada do escoamento. Essa baixa concentração é devida a maior eficiência de remoção do vapor pelo fluxo acima da superfície.

A Figura 4.3 apresenta os resultados de uma simulação da configuração 3, onde o escoamento acima da superfície é nulo. A Figura 4.3 (a) mostra um *cluster* principal e a formação de *clusters* desconectados. Na Figura 4.3 (b) ocorre a perda do contato com a superfície e o aumento do número de *clusters*. Os *clusters* mais próximos a superfícies tendem a evaporar mais rapidamente do que os mais afastados. O resultado é a formação de um gradiente de dimensões de *clusters*, sendo que os mais próximos a superfície são menores. Esse gradiente reflete a transferência de massa (transporte de vapor), as concentrações de vapor próximas a superfície são menores favorecendo o transporte de massa nesses poros. Conseqüentemente, na Figura 4.3 (c) os *clusters* desconectados já foram evaporados e a linha da frente de evaporação é mais uniforme. A Figura 4.3 (d) apresenta o final da evaporação do líquido, onde se pode notar que em ambos os estudos (presentes trabalho e Yiotis et al(2001)) a frente de evaporação se move gradualmente para as regiões mais afastadas da superfície, levando a uma redução gradual das taxas de evaporação do líquido.

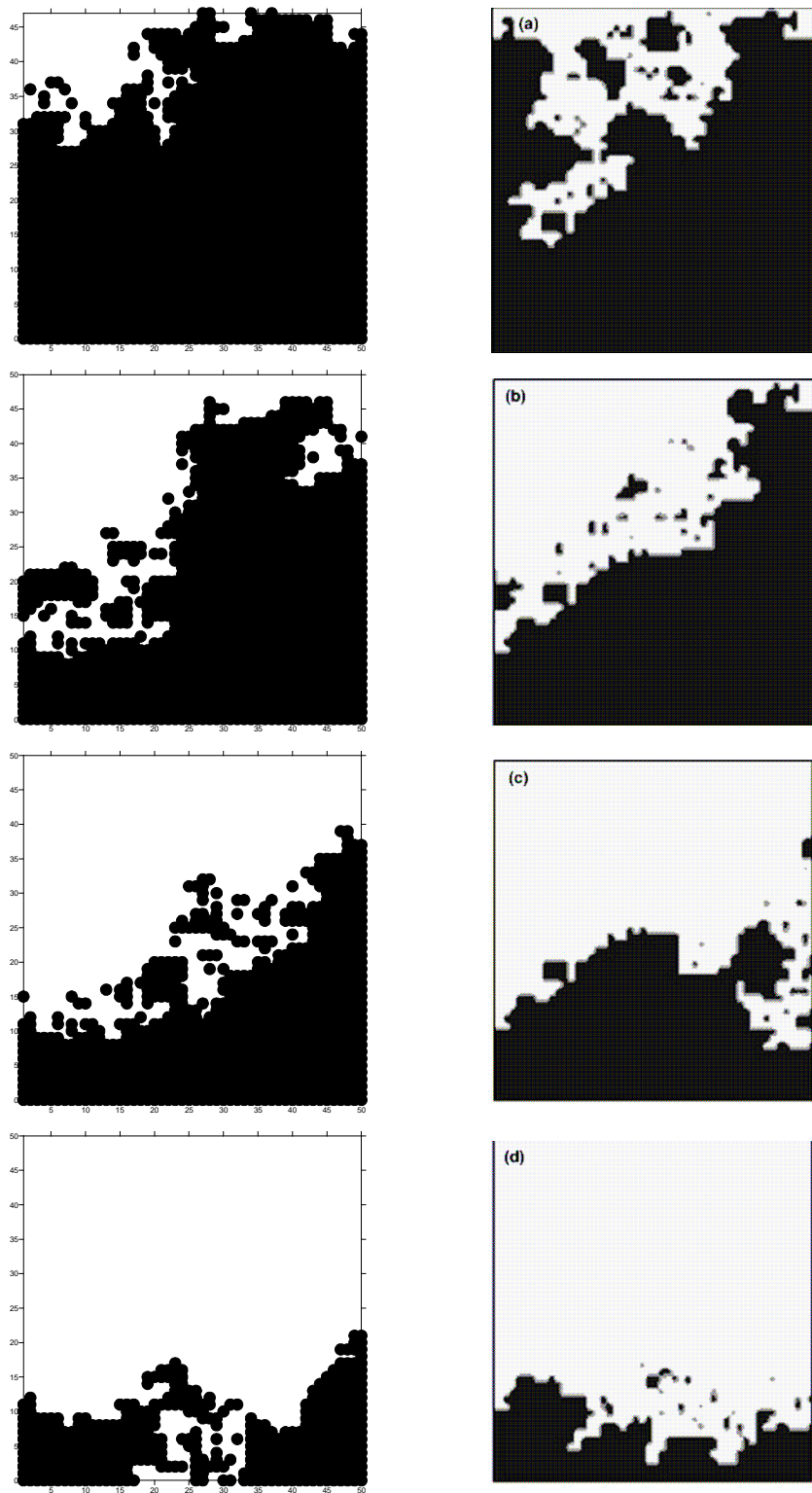


Figura 4.2: Distribuição de líquido para configuração número 2 com (a) 80%, (b) 60%, (c) 40% e (d) 20% de massa. O líquido está representado por preto e o gás por branco. A coluna da esquerda apresenta a distribuição simulação pelo modelo proposto e a coluna da direita as distribuições apresentadas por Yiotis et al.(2001)

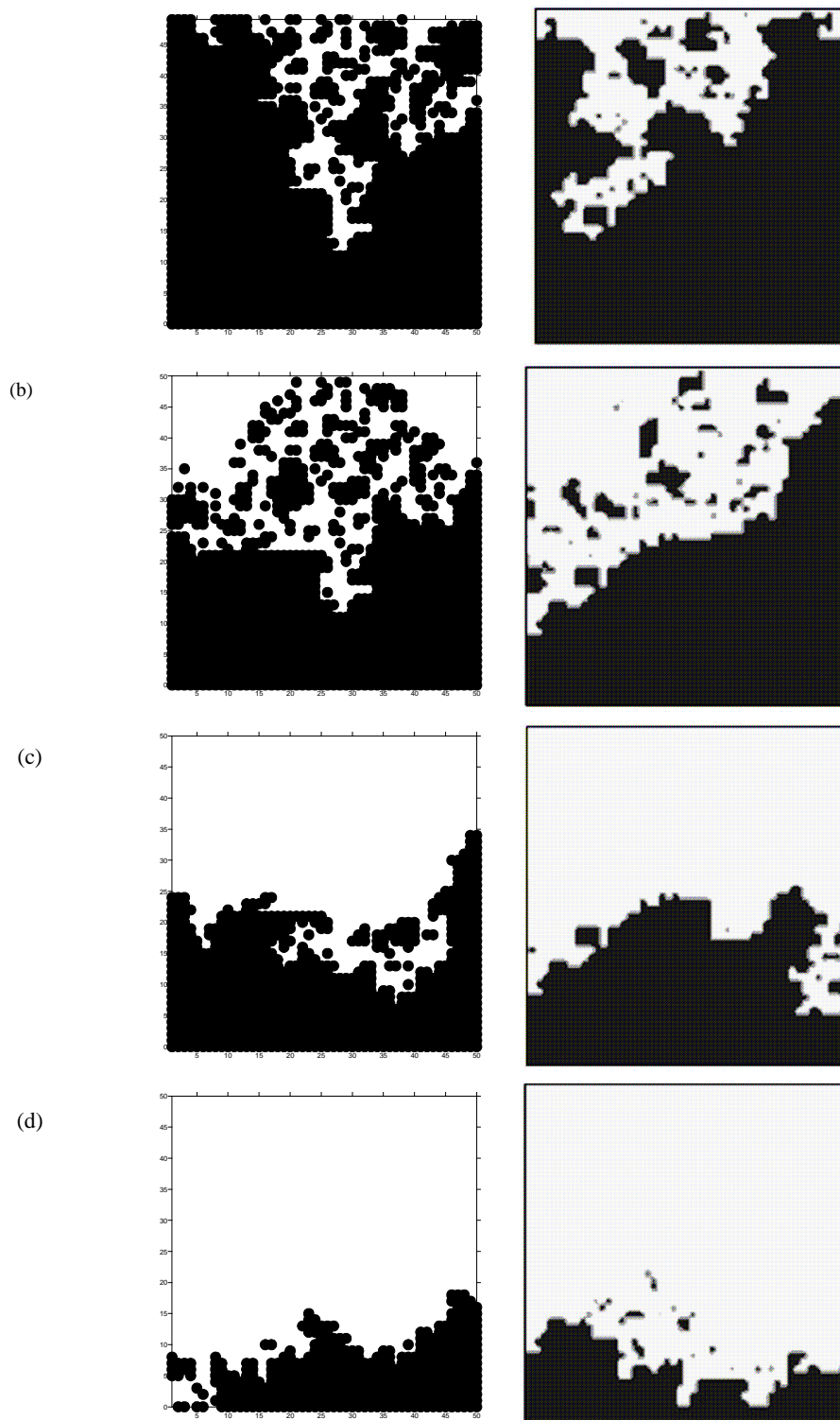


Figura 4.3: Distribuição de líquido para configuração número 3 com (a) 80%, (b) 60%, (c) 40% e (d) 20% de massa. O líquido está representado por preto e o gás por branco. A coluna da esquerda apresenta a distribuição simulação pelo modelo proposto e a coluna da direita as distribuições apresentadas por Yiotis et al.(2001)



### 4.1.3 Comparação da distribuição de vapor

A Figura 4.4 apresenta as distribuições de fase gasosa da mesma simulação da configuração número 2 apresentada anteriormente. A coluna da esquerda mostra os resultados obtidos pelo modelo proposto e a coluna da direita os resultados obtidos pelo autor. As figuras lado a lado mostram o mesmo intervalo de tempo. O líquido está representado em branco e o vapor em cinza, as cores mais escuras representam as menores concentrações de vapor.

As similaridades entre as duas colunas são evidentes durante todo o período de evaporação. A Figura 4.4 (a) apresenta o início da evaporação. Os dados apresentados por Yiotis (2001) não possuem legendas das cores plotadas tornando mais difícil a verificação da acurácia no início do processo. É importante notar que as comparações entre os dados apresentados são qualitativas, não se pode afirmar que os níveis de concentrações foram atingidos pelo modelo proposto e o modelo reportado pelo autor. As comparações são restritas ao comportamento da distribuição de vapor dentro no meio poroso.

É possível notar que ambos os modelos apresentam uma maior remoção de vapores próximo às regiões de entrada e saída do escoamento superior. Os níveis de concentração de vapor na superfície próxima a estas regiões são menores, fazendo com que os gradientes de concentração sejam mais acentuados. Este padrão deve produzir uma taxa de evaporação significativamente maior para *clusters* desconectados nesta região em comparação a regiões mais centrais.

Já na Figura 4.4 (b) a semelhança dos dados são maiores. O resultado obtido pelo modelo proposto já apresenta a evaporação iniciada pelo lado direito da matriz. Apesar da concentração de vapor obtida pelo modelo proposto abranger regiões mais afastadas da superfície, é possível afirmar que o comportamento do transporte de vapor dentro da matriz é semelhante ao apresentado pelos autores.

Na Figura 4.4 (c) o vapor gerado dentro da matriz já ocupa grande parte da matriz. Mesmo assim é possível observar a tendência dos poros localizados à esquerda da matriz ser evaporados primeiro. A Figura 4.4 (d) mostra o final do processo de evaporação e a maior linearização da frente de evaporação.

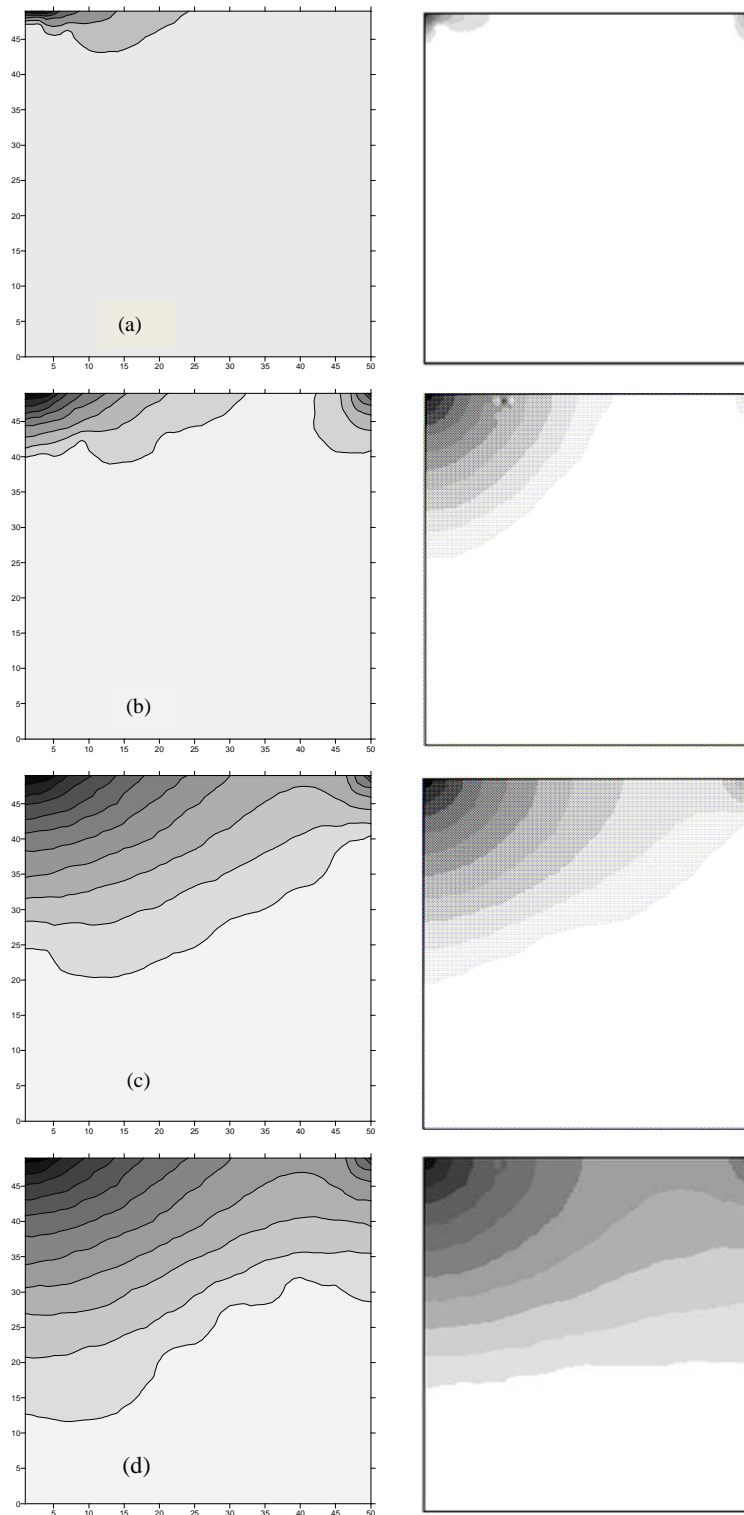


Figura 4.4: Distribuição de vapor para simulação número 2 com (a) 80%, (b) 60%, (c) 40% e (d) 20% de massa. As cores mais escuras representam concentrações menores. A coluna da esquerda apresenta a distribuição simulação pelo modelo proposto e a coluna da direita as distribuições apresentadas por Yiotis et al.(2001).

Dessa forma a preferência pelo lado esquerdo observado nos resultados obtidos pelo modelo proposto é dada pela remoção mais eficiente das concentrações de vapor acima da superfície e não pela pressão exercida pelo escoamento dentro da matriz.

Nas Figuras 4.4 (a) e (b) o gradiente da concentração de vapor é maior que nas Figuras 4.4 (c) e (d), o que reflete a variação da taxa de evaporação. Inicialmente, a taxa de evaporação é alta, as variações das concentrações de vapores nos poros próximos a superfícies são grandes favorecendo o transporte de massa. Com o passar do tempo esse gradiente decai e as concentrações se tornam mais homogêneas. Então, o transporte de vapor dentro da matriz fica mais difícil. Outro fator que leva a queda da taxa de evaporação é o maior caminho que o vapor deve percorrer para sair do meio poroso.

#### 4.1.4 Sumário das comparações

De uma maneira geral, a concentração entre os resultados obtidos pelo modelo de escala de poros apresentado neste trabalho e os resultados de Yiotis et al. (2001) foi boa. Maiores afastamentos foram encontrados nas condições de fluxo de remoção maior (Configuração 1 e 2), onde o escoamento sobre a fratura gera alguma infiltração na matriz porosa.

As curvas de evaporação e evolução temporal das distribuições de líquido e vapor indicam uma boa concordância entre os modelos.

#### 4.2 Análises dos parâmetros governantes

A análise dos parâmetros governantes está dividida em cinco partes, a primeira descreve a configuração base, onde são apresentadas as características da configuração básica que será utilizada nas análises. A partir da configuração base serão efetuadas variações nos parâmetros governantes de maneira a explorar a influência destes parâmetros sobre o processo de evaporação. Os parâmetros analisados nas seções subsequentes serão: concentração de saturação (Seção 4.2.3), coeficiente de difusão (Seção 4.2.4), eficiência da remoção de vapores na fronteira superior (Seção 4.2.5) e porosidade da matriz (Seção 4.2.6)

Para analisar o processo de evaporação em meios porosos expostos a atmosfera, uma matriz similar àquela utilizada por Yiotis et al(2001) foi utilizada, porém considerando o escoamento atmosférico sobre a superfície superior. Neste caso os fluxos de massa são calculados com base nas formulações propostas na Seção 3.1.1.

Todas as simulações foram realizadas com a mesma matriz porosa, o que permite o estudo mais detalhado dos padrões de secagem e das taxas de evaporação, visto que as diferenças relacionadas com a distribuição de diâmetro dos poros e das ligações não são consideradas.

A parametrização do tempo adimensional é diferente da proposta por Yiotis et al. (2001). A abordagem agora é feita de forma a tornar possível a análise da influência do meio poroso no processo de evaporação.

#### 4.2.1 Parametrização

Com o objetivo de permitir uma melhor comparação entre as diferentes configurações analisadas, os resultados obtidos são apresentados em uma escala de tempo adimensional ( $t^*$ ), onde:

$$t^* = \frac{t}{t_0} \quad (4.2)$$

Onde  $t$  é o tempo em segundos e  $t_0$  denota uma escala de tempo de referencia. Neste trabalho  $t_0$  representa o tempo em que uma massa semelhante de líquido, ocupando uma área similar a da matriz porosa deste estudo, leva para evaporar quando exposta ao fluxo de ar semelhante. Ou seja,  $t_0$  representa o tempo necessário para vaporar uma piscina de líquido de mesma massa e sob as mesmas condições atmosféricas. Neste caso a utilização de  $t^*$  para apresentação dos resultados permite avaliar o efeito limitante pelo meio poroso.

$$T_0 = \frac{M_0}{E_0} \quad (4.3)$$

Onde  $M_0$  é a massa de líquido inicial na matriz.

$$F_0 = v_r C_{sat} A_0 \quad (4.2)$$

Sendo  $F_0$  o fluxo inicial,  $v_r$  a velocidade de transporte de vapor,  $C_{sat}$  a concentração de saturação do líquido e  $A_0$  a área inicial exposta à atmosfera.

$$A_0 = L_{matriz} \left( \frac{R_{PMax} + R_{PMin}}{2} \right) \quad (4.3)$$

Onde  $L_{matriz}$  é o comprimento total da matriz,  $R_{PMax}$  é o maior valor possível para o raio dos poros e  $R_{PMin}$  o menor valor possível para o raio dos poros.

As fronteiras físicas dessa região são as faces da matriz, com comprimento igual ao comprimento da ligação entre os poros multiplicados pelo número de poros na direção específica. E a espessura da matriz é dita igual a média aritmética dos extremos do intervalo de distribuição de diâmetros dos poros.

#### 4.2.2 Caso base

A configuração base para análise dos parâmetros governantes foi simulada com matriz 50x50, com apenas a superfície aberta para a atmosfera e as outras três faces fechadas e impermeáveis. A estabilidade atmosférica é considerada neutra com comprimento de Monin-Obukhov igual a um ( $L=10^8$ ). A velocidade de fricção ( $u_*$ ) utilizada é igual a 0,811m/s e a velocidade de transporte de vapor é igual a 0,030018m/s . A Figura 4.5 apresenta a evolução temporal da distribuição de vapor e de líquido que foram sobrepostos. As isolinhas representam as concentrações de vapor, sendo as cores mais escuras estão relacionadas com as menores concentrações. A escala está limitada a concentração de vapor e concentração nula, sendo que a variação de cores ocorre em intervalos fixos de 0,02 kg/m<sup>3</sup>. Os círculos representam os poros que ainda possuem líquidos e, então a concentração de vapor dentro do poro ainda é a concentração de saturação do líquido.

A Figura 4.5 representa as distribuições de vapor e líquido para intervalo de tempo atingido quando a massa é igual a 80%, 60%, 40% e 20% da massa inicial.

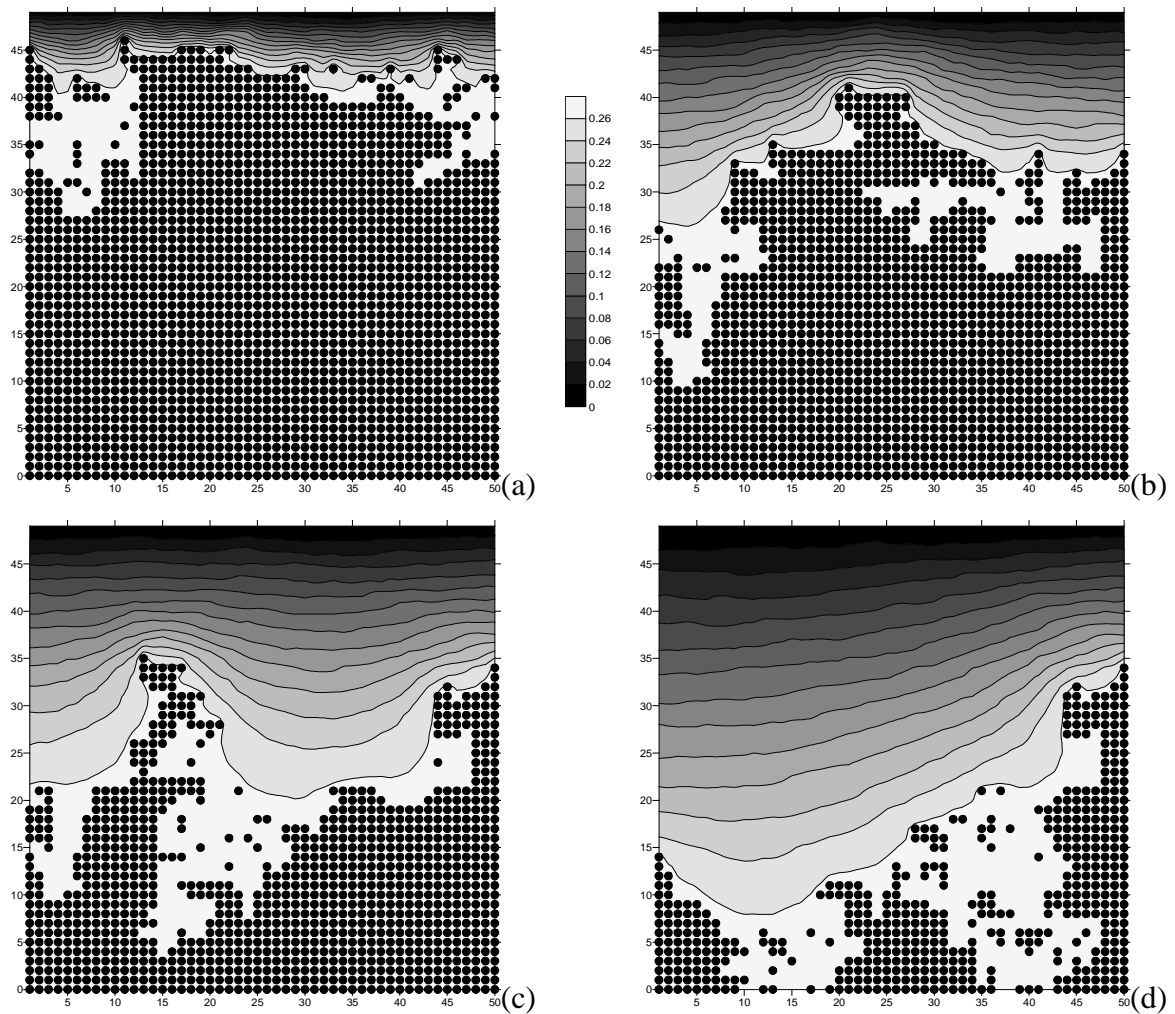


Figura 4.5: Distribuição de fase do caso base. Os contornos representam as isolinhas de concentração de vapor e os círculos representam os poros que ainda possui líquido para intervalos de tempo com (a) 80%, (b) 60%, (c) 40% e (d) 20% de massa.

Pode se observar que nos instantes iniciais da evaporação os gradientes de concentração de vapor no interior do meio poroso são consideravelmente elevados. As regiões saturadas de líquido ainda estão muito perto da superfície nos primeiros instantes, gerando os grandes gradientes.

Quando a evaporação avança e as regiões saturadas de líquido distanciam-se da superfície, os gradientes vão se tornando cada vez menores. Uma vez que o transporte difusivo de vapor depende da magnitude do gradiente, a taxa de evaporação vai sendo gradualmente reduzida.

A Figura 4.6 apresenta a curva de evaporação do caso base. A Figura 4.6 (a) apresenta os resultados em função de  $t^*$  e para a Figura 4.6 (b) a escala de tempo está em segundos. Nos primeiros estágios do processo de evaporação observa-se o período de taxa constante, região da curva praticamente vertical. Após esse período a saturação do gás aumenta mais lentamente, já que a taxa de evaporação está diminuindo. Na Figura 4.6 (a) pode se observar a influência limitante do meio poroso, em relação a evaporação de uma piscina de líquido a evaporação em meio poroso é 2.700 vezes mais lenta.

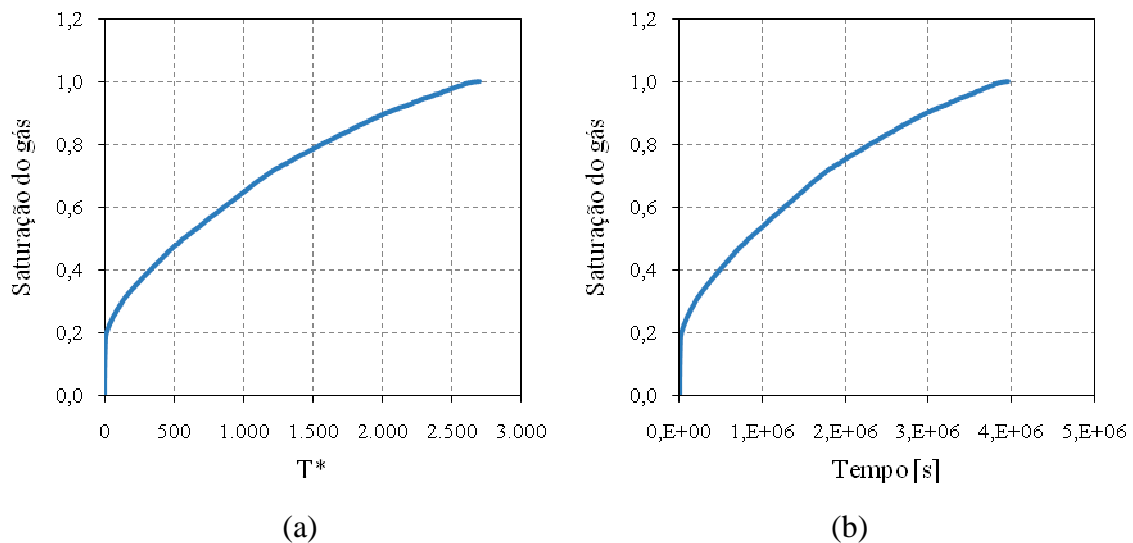


Figura 4.6: Curva de saturação para o caso base. (a) escala de tempo adimensional e (b) o tempo real de evaporação.

Para ilustrar a influência da distribuição de poros três novas configurações são apresentadas utilizando distribuição randômica dos diâmetros dos poros e das ligações. Essas novas configurações apenas diferenciam do caso base devido à distribuição randômica dos diâmetros dos poros e das ligações. A Figura 4.7 apresenta as curvas de saturação para cada nova configuração. A Figura 4.7 (a) a escala de tempo é a característica e a Figura 4.7 (b) a escala de tempo está em segundos. O comportamento das curvas da Figura 4.7 é similar ao do Caso base e as oscilações são devidas as diferentes distribuições de diâmetros dos poros e das ligações.

As três curvas apresentam o período de taxa constante e em seguida a taxa de evaporação decai. Como dito anteriormente e de acordo com Yiotis et al. (2005), o período de taxa constante termina quando o líquido perde contato com a superfície, dessa forma analisando conjuntamente com as gráficos de distribuição de fase (Figura

4.8). Nota-se que para as curvas da simulação 2 (vermelha) e da simulação 3 (verde) o período de taxa constante é maior que para a simulação 1. Observe que o contato com a superfície é rompido antes para da simulação 1 (Figura 4.8 (a), coluna da esquerda) do que para as simulações 2 e 3 (Figura 4.8 (b) e (c), colunas central e de direita, respectivamente).

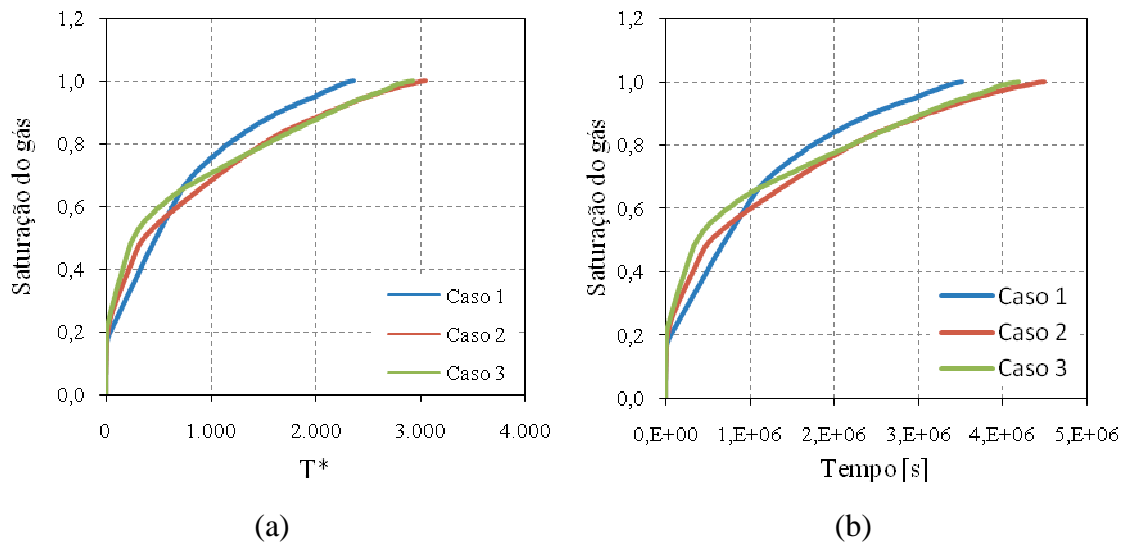


Figura 4.7: Curva de saturação para três diferentes distribuições de diâmetros dos poros e das ligações. (a) escala de tempo adimensional e (b) o tempo real de evaporação.

A Figura 4.8 apresenta as distribuições de líquido e de vapor para as três novas simulações. Cada coluna representa uma simulação, a coluna da esquerda é o Caso 1, a coluna central é o Caso 2 e a coluna da direita representa o Caso 3. Os intervalos de tempo de cada distribuição correspondem ao tempo onde o volume de massa é igual a 80%, 60%, 40% e 20% da quantidade de massa inicial. A escala está limitada a concentração de vapor e concentração nula, sendo que a variação de cores ocorre em intervalos fixos de  $0,02 \text{ kg/m}^3$ . Os círculos representam os poros que ainda possuem líquidos e, então a concentração de vapor dentro do poro ainda é a concentração de saturação do líquido.



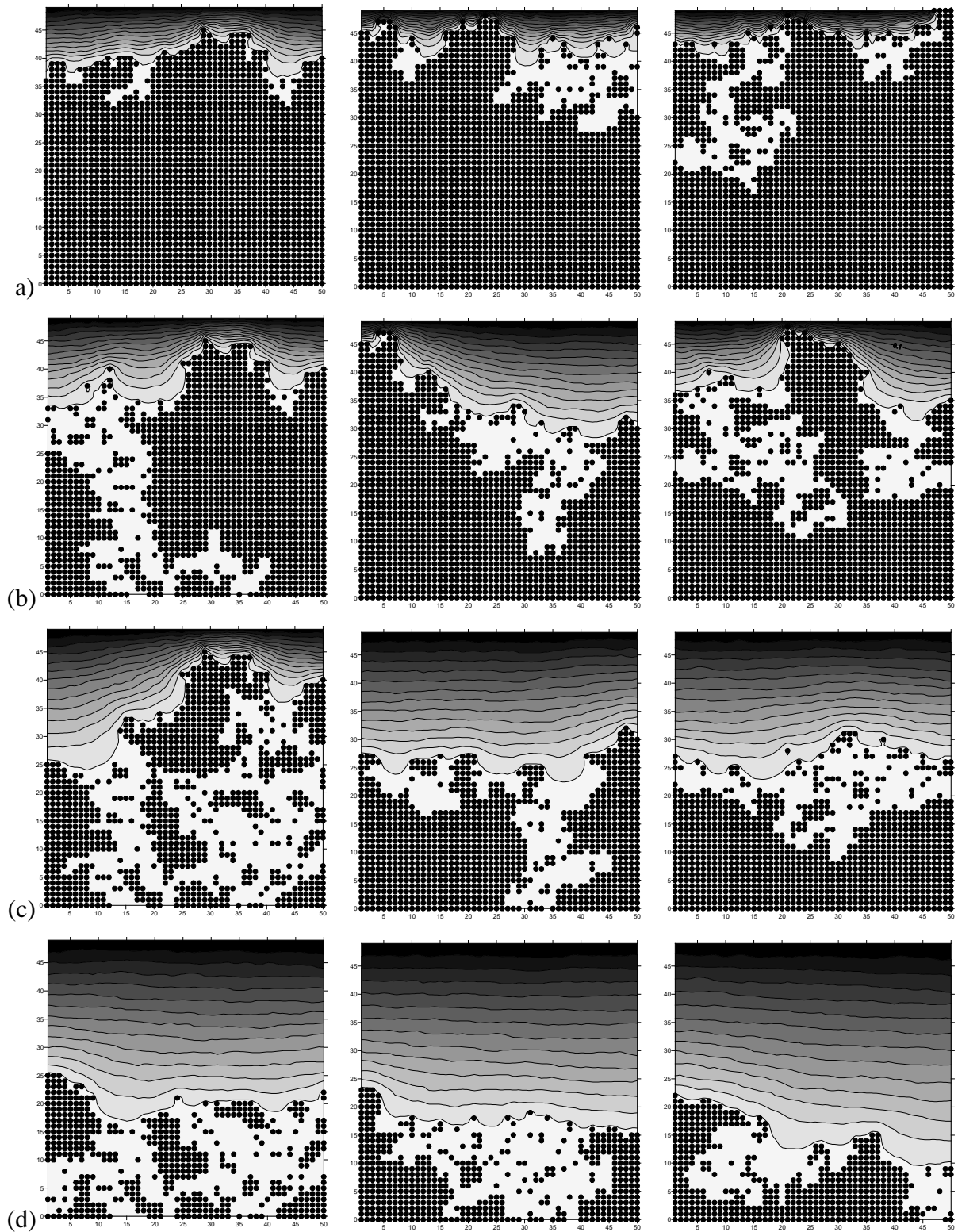


Figura 4.8: Distribuição de fase para diversas distribuições de diâmetros das ligações e dos poros. Os contornos representam as isolinhas de concentração de vapor e os círculos representam os poros que ainda possui líquido para intervalos de tempo com (a) 80%, (b) 60%, (c) 40% e (d) 20% de massa. A coluna da esquerda representa a evolução da Configuração 1, a central a Configuração 2 e a coluna da direita a Configuração 3.

Apesar da diferença na distribuição dos diâmetros dos poros e das ligações significar que os poros invadidos pelo gás serão diferentes em cada configuração, o

comportamento macroscópico é similar. Inicialmente observa-se a evaporação da superfície da matriz com a formação de *clusters* desconectados (Figura 4.8 (a) e (b)). Logo em seguida os *clusters* desconectados são evaporados e a frente de evaporação é mais linear. Como já discutido, os *clusters* desconectados evaporam mais rapidamente devido às concentrações de vapor mais próximas a superfície serem menores, o que contribui para uma maior evaporação de líquido.

#### 4.2.3 Influência da concentração de saturação.

Para analisar a influência da concentração de saturação na evaporação de líquidos em meios porosos três simulações são apresentadas. A primeira a concentração de saturação é igual à metade da concentração de saturação do caso base. A segunda a concentração de saturação é igual ao dobro da concentração de saturação do caso base. E o terceiro é o caso base. A Figura 4.9 apresenta as curvas de saturação para as três simulações. A Figura 4.9 (a) mostra a escala característica e o Figura 4.9 (b) a escala de tempo está em segundos.

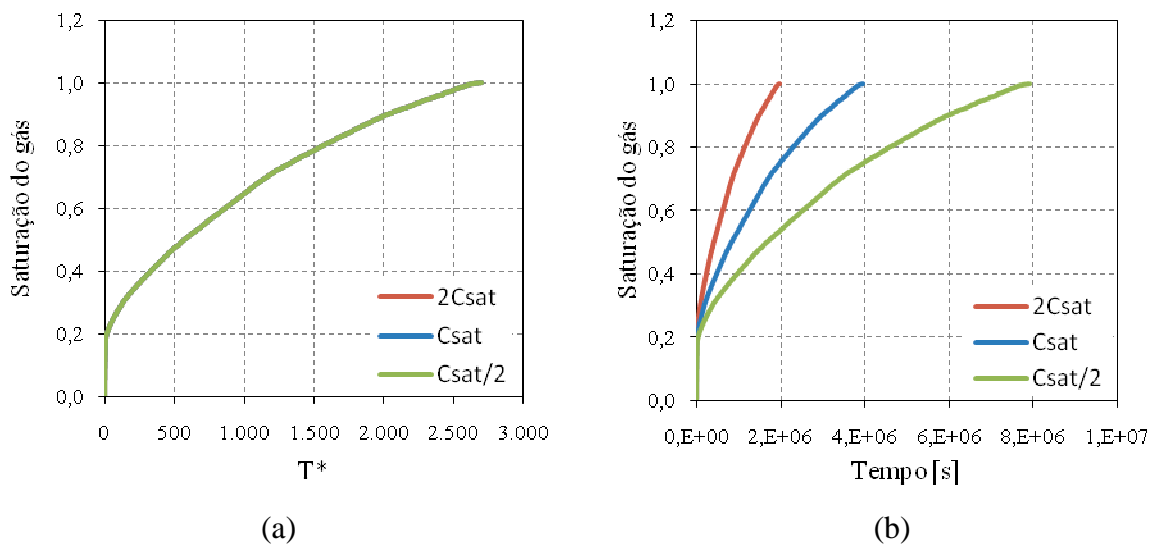


Figura 4.9: Curva de saturação para diferentes valores de concentração de saturação do líquido. (a) escala de tempo adimensional e (b) o tempo real de evaporação.

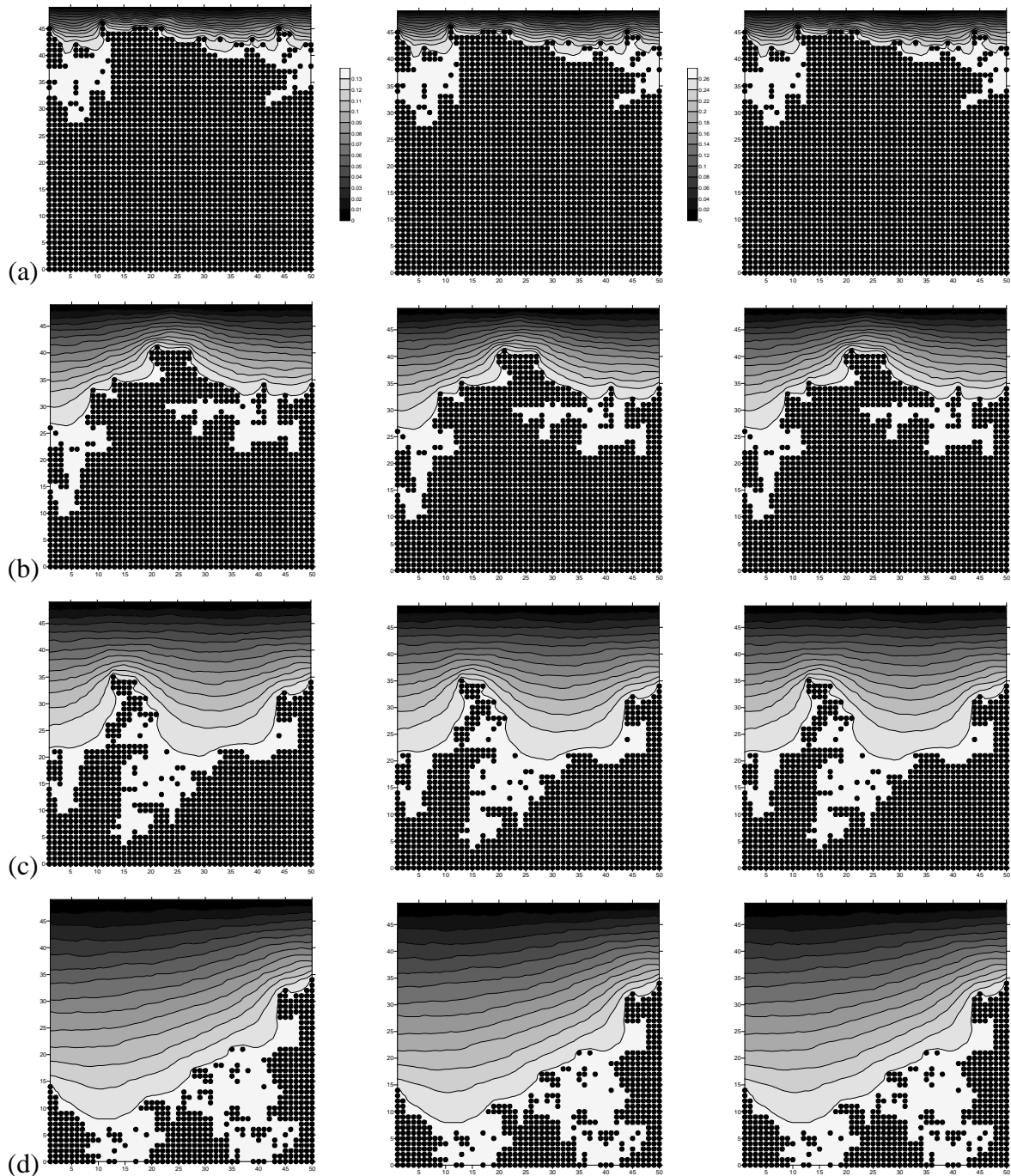


Figura 4.10: Distribuição de fase para diferentes valores de concentração de saturação do líquido. Os contornos representam as isolinhas de concentração de vapor e os círculos representam os poros que ainda possui líquido para intervalos de tempo com (a) 80%, (b) 60%, (c) 40% e (d) 20% de massa. A coluna da esquerda representa a evolução para concentração de saturação igual a  $C_{sat}=C_{sat}/2$ , a central o Caso Base e a coluna da direita o para concentração de saturação igual a  $C_{sat}=2C_{sat}$ .

A Figura 4.9 (a) mostra que não existe influência na taxa de evaporação para processos de secagem em meios porosos. Porém para o tempo dimensional a influência é óbvia, já que a taxa de evaporação está diretamente relacionada com a concentração de saturação. Quanto maior for a concentração de saturação do líquido menor será o tempo total de evaporação. Entretanto, analisando o tempo adimensional de evaporação é possível

notar que estas variações não geram nenhum efeito sobre a influência limitante do meio poroso sobre a evaporação do líquido. A massa de líquido evapora cerca de 2700 vezes mais lenta que o tempo de referência nas três simulações.

Este efeito também pode ser observado na Figura 4.10 que apresenta as distribuições de fase líquida e gasosa para as três simulações. A coluna da direita está apresentando os resultados para simulação com concentração de saturação igual à metade da concentração de saturação do caso base. A coluna central é o caso base e a coluna da esquerda está demonstrando os resultados para simulação com concentração de saturação igual a duas vezes a concentração de saturação do caso base. Os intervalos de tempo de cada distribuição correspondem ao tempo onde o volume de massa é igual a 80%, 60%, 40% e 20% da quantidade de massa inicial. A escala está limitada a concentração de vapor e concentração nula, sendo que a variação de cores ocorre em intervalos fixos de  $0,02 \text{ kg/m}^3$ . Os círculos representam os poros que ainda possuem líquidos e, então a concentração de vapor dentro do poro ainda é a concentração de saturação do líquido.

Como a distribuição de diâmetro dos poros e das ligações são os mesmos para todas as simulações o comportamento macroscópico das três colunas é o mesmo. Porém as escalas de concentração são diferentes. As legendas estão apresentadas somente nas primeiras linhas e são as correspondentes para toda coluna.

#### 4.2.4 Influência do coeficiente de difusão.

O estudo da influência do coeficiente de difusão foi efetuado de modo análogo ao estudo da influência da concentração de saturação. Três simulações são estudadas. A primeira com coeficiente de difusão igual à metade do valor de referência. A segunda é o caso base. A terceira com coeficiente de difusão igual ao dobro do valor de referência.

A Figura 4.11 apresenta as curvas de saturação para as três situações. A Figura 4.11 (a) apresenta a escala característica de tempo, enquanto a Figura 4.11 (b) a escala de tempo é dimensional.

A Figura 4.11 (a) mostra a influência exercida pelo meio poroso. Quanto maior o coeficiente de difusão menor o tempo total para a evaporação do líquido. De maneira análoga ao que ocorreu para as simulações com diferentes concentrações de saturação, o tempo de evaporação (Figura 4.11 b) é linearmente afetado pelo coeficiente de difusão, isto é, com um valor de  $D$  duas vezes maior o líquido evapora 2 vezes mais rápido. O oposto acontece para uma redução de  $D$ , ou seja uma redução proporcional no tempo de evaporação.

Entretanto, diferentemente dos resultados apresentados na seção anterior, as diferenças causadas pela variação de  $D$  podem também ser observadas na escala de tempo adimensional. O valor de  $t_o$  é muito pouco afetado pelas variações de  $D$ , alterando menos de 2% quando o valor é dobrado. Isto se deve ao fato de que os efeitos turbulentos dominam os processos de transferência de massa na atmosfera, fazendo com que a difusão molecular tenha um efeito bastante reduzido sobre a magnitude do coeficiente de transferência de massa ( $v_r$ ) na superfície superior.

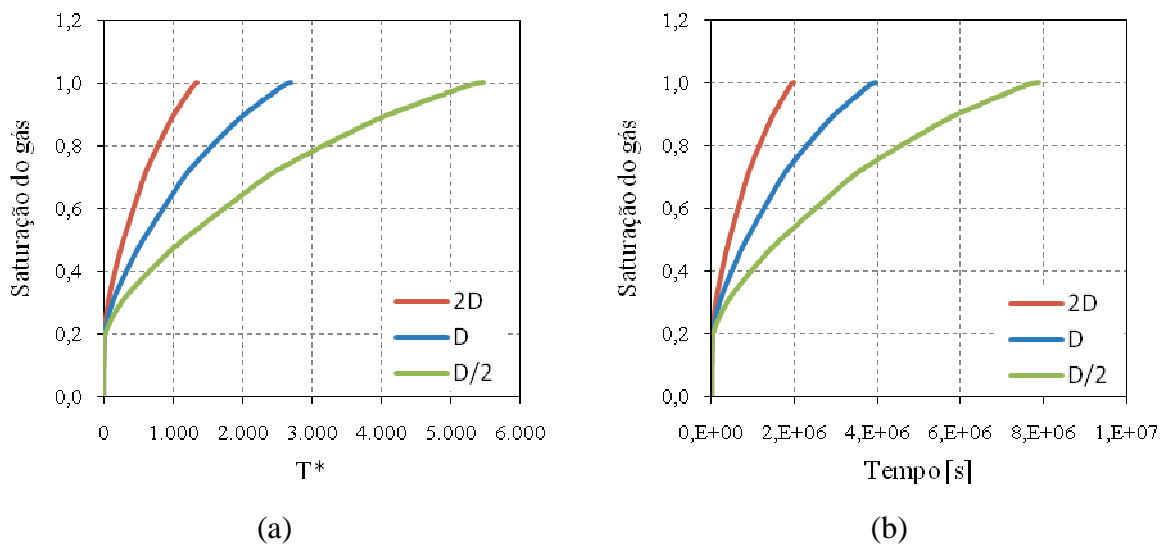


Figura 4.11: Curva de saturação para diferentes valores de coeficientes de difusão do líquido. (a) escala de tempo adimensional e (b) o tempo real de evaporação.

A Figura 4.12 apresenta as distribuições de fase líquida e gasosa para as três simulações. A coluna da direita apresenta os resultados para simulação com coeficiente de difusão igual à metade do coeficiente de difusão do caso base. A coluna central é o caso base e a coluna da esquerda está demonstrada os resultados para simulação com coeficiente de difusão igual a duas vezes o coeficiente de difusão do caso base. Os

intervalos de tempo de cada distribuição correspondem ao tempo onde o volume de massa é igual a 80%, 60%, 40% e 20% da quantidade de massa inicial. A escala está limitada a concentração de vapor e concentração nula, sendo que a variação de cores ocorre em intervalos fixos de  $0,02 \text{ kg/m}^3$ . Os círculos representam os poros que ainda possuem líquidos e, então a concentração de vapor dentro do poro ainda é a concentração de saturação do líquido.

O comportamento macroscópico das distribuições de líquido e de vapor são idênticas devido à mesma distribuição de diâmetros dos poros e das ligações. Assim como a escala de concentração de vapor. Os padrões de transporte de vapor não são influenciados pelo coeficiente de difusão. O coeficiente de difusão apenas acelera a evaporação. Líquidos com coeficiente de difusão maior evaporam mais rapidamente, inclusive quando absorvidos por meios porosos.

#### 4.2.5 Influência do fluxo de remoção.

Com intuito de verificar a influência do mecanismo de transporte através da interface matriz porosa/atmosfera, foram realizadas várias simulações com diferentes valores de velocidade de fricção e comprimento de Monin-Obukhov. A velocidade de fricção foi variada de maneira a simular diferentes valores de velocidade do vento, enquanto o comprimento de Monin-Obukhov foi variado de maneira a avaliar a influência de condições atmosférica instáveis, estáveis e neutras.

É possível relacionar os valores de velocidade de transporte de vapor com valores típicos de velocidade de fricção na atmosfera e do comprimento de Monin-Obukhov. A Figura 4.13 mostra a variação de  $v_r$  com a velocidade de fricção na atmosfera, os dados foram gerados para estabilidade atmosférica neutra. E a Figura 4.14 mostra a variação de  $v_r$  com o comprimento de Monin-Obukhov para classe de estabilidade neutra ( $L=10^8$ ), estável ( $L=1$ ) e instável ( $L=-1$ ).

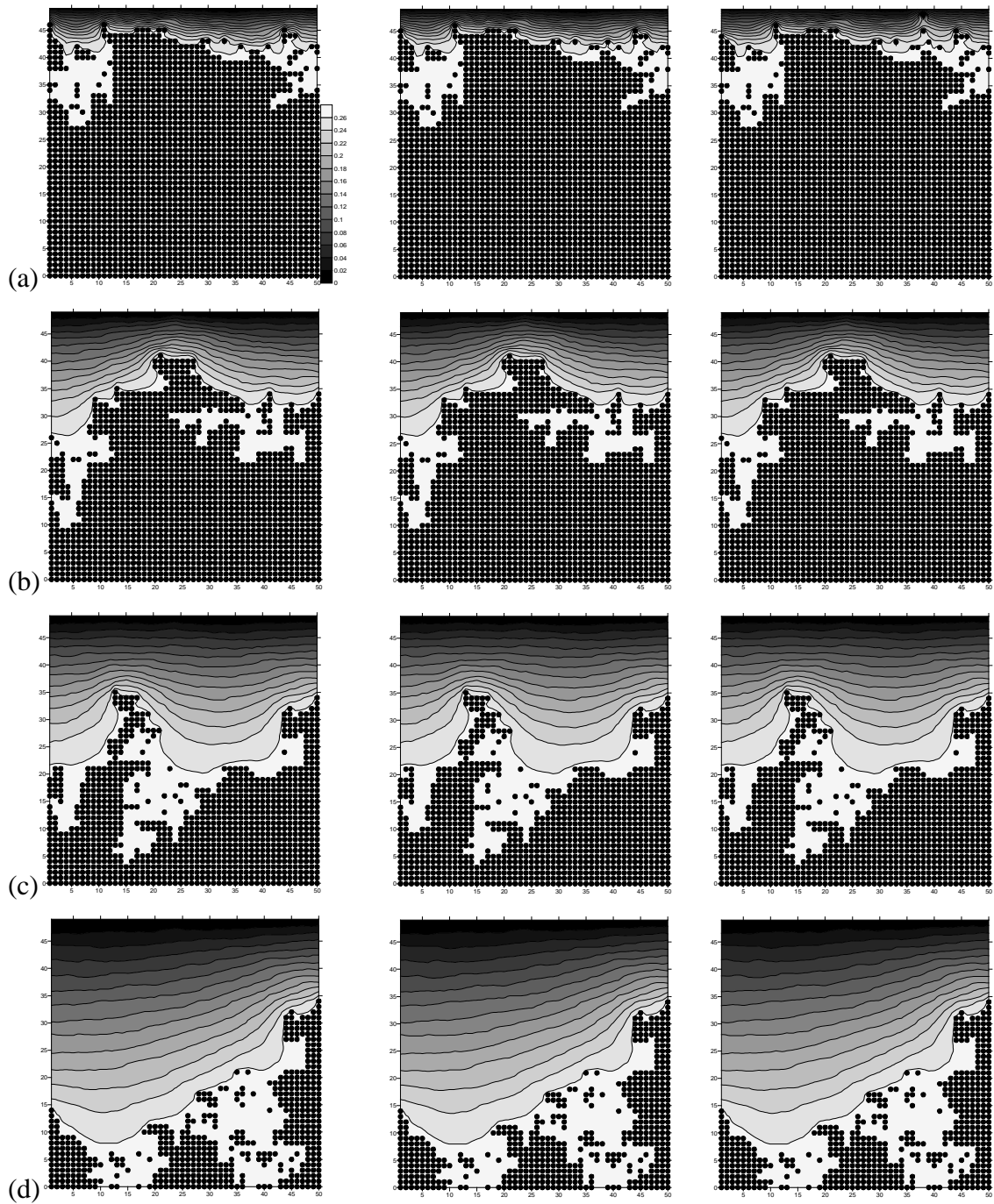


Figura 4.12: Distribuição de fase para diferentes valores de coeficiente de difusão do líquido. Os contornos representam as isolinhas de concentração de vapor e os círculos representam os poros que ainda possui líquido para intervalos de tempo com (a) 80%, (b) 60%, (c) 40% e (d) 20% de massa. A coluna da esquerda representa a evolução para concentração de saturação igual a  $D=D/2$ , a central o Caso Base e a coluna da direita para concentração de saturação igual a  $D=2D$ .

As configurações para a análise do fluxo de remoção foram escolhidas de modo que apenas um parâmetro fosse alterado. Como exemplo, para a análise da influência da estabilidade atmosférica no processo de evaporação somente foi alterado o valor do

comprimento de Monin-Obukhov, com isso o valor de  $v_r$  foi alterado. Todos os outros parâmetros foram mantidos constantes como no caso base.

Os diagramas de fase líquida e gasosa não serão mostrados nesta seção. Como a distribuição dos poros é idêntica ao do caso base as distribuições de fase também serão. Ainda, os fluxos de remoção não interferem nestes perfis apenas na velocidade da evaporação. Como a remoção do gás próximo da superfície é mais eficiente os gradientes de concentração de vapor serão mais intensos, o transporte de vapor será mais rápido levando a um aumento na velocidade da taxa de evaporação.

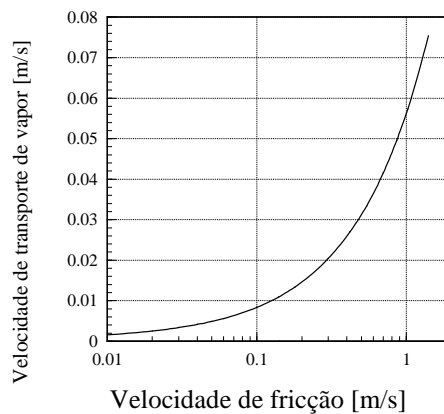


Figura 4.13: Variação de  $v_r$  com a velocidade de fricção. (Reis, 2000)

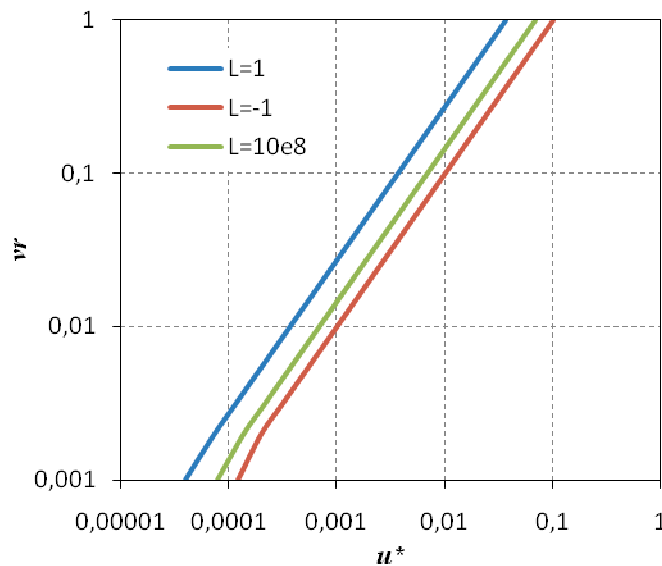


Figura 4.14: Variação de  $v_r$  com o comprimento de Monin-Obukhov



#### 4.2.5.1 Influência da velocidade de fricção.

Para a análise da influência da velocidade de fricção foram feitas quatro simulações. A primeira com velocidade de fricção igual a 0,02 m/s. A segunda com velocidade de fricção igual a 0,4 m/s. A terceira (o caso base), com velocidade de fricção igual a 0,811m/s. E a quarta com velocidade de fricção igual a 1m/s. A Tabela 4.1 mostra os valores de  $v_r$  utilizados para cada interação.

Tabela 4.1 : Valores de  $v_r$  simulações de influência de velocidade de fricção.

<i>Velocidade de fricção [m/s]</i>	$v_r$
0,02	0,002
0,4	0,015
0,811	0,030
1	0,037

A Figura 4.15 mostra as curvas de saturação para as quatro situações. A Figura 4.15 (a) apresenta a escala de tempo adimensional. E a Figura 4.15 (b) apresenta a escala de tempo dimensional em segundos.

Para as simulações com  $u_*$  igual a 0,4, 0,811 e 1,0 a variação da velocidade de fricção não interfere no tempo total da evaporação (Figura 4.15 (b)). Apesar da eficiente remoção de vapores da superfície livre, a evaporação do líquido está limitada pelo transporte de massa dentro do poro.

Diferentemente dos resultados obtidos para as simulações com  $u_*$  igual a 0,4, 0,811 e 1,0, os resultados indicam que quando a velocidade de fricção é reduzida para 0,002 m/s percebe-se que o tempo de evaporação aumenta. Neste caso a redução do coeficiente de transferência ( $v_r=0,002$ ) reduz a taxa de evaporação, tornando a evaporação total do líquido mais demorada.

Desta forma, é possível concluir que valores de  $u_*$  mais elevados a limitação imposta pelo meio poroso ao transporte de vapor foi mais importante que as variações de  $v_r$ . Ou seja, praticamente todo vapor que chega a superfície é removido, não havendo

praticamente nenhuma limitação devido ao valor de  $v_r$ . Por outro lado, com  $u_*$  igual a 0,02 o valor de  $v_r$  também é um fator limitante do processo de evaporação.

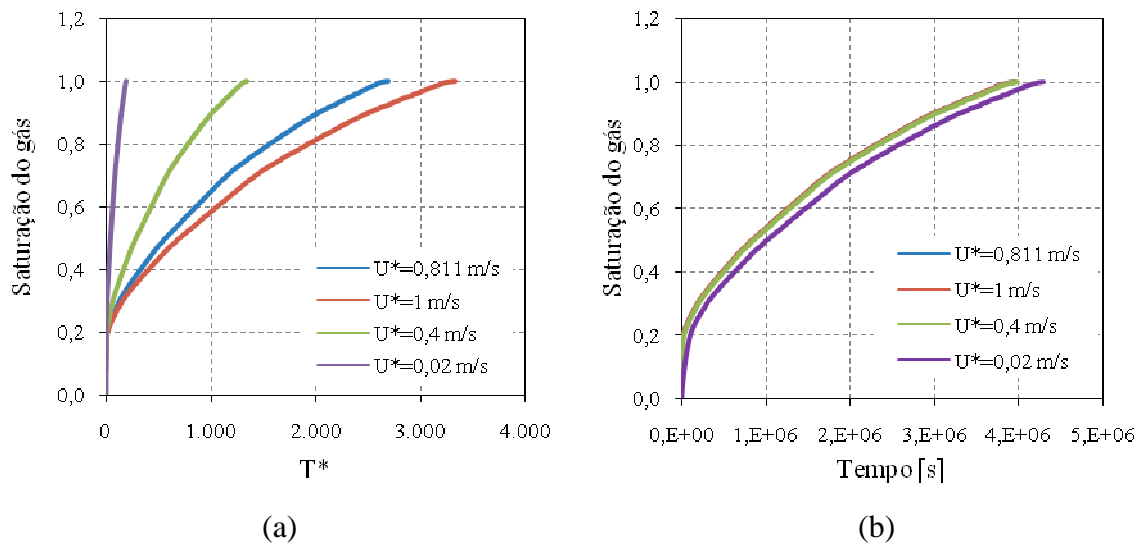


Figura 4.15: Curva de saturação para diferentes valores de velocidade de fricção. (a) escala de tempo adimensional e (b) o tempo real de evaporação.

A Figura 4.15 mostra a clara limitação imposta pelo meio poroso. Para maiores velocidade de fricção está limitação torne-se ainda mais evidente. Uma análise dos valores de  $t^*$  até a total evaporação mostra que os casos com maiores velocidade de fricção evaporam significativamente mais rápidos sem a presença do meio poroso.

Este comportamento pode ser melhor observado na Figura 4.16, que mostra as distribuições de líquido e vapor para as configurações com velocidade de fricção igual a 0,002, 0,4 e 1,0 m/s. Pode-se observar que concentração de vapor é mais fracamente removida no caso com velocidade de fricção igual a 0,02 m/s. Enquanto que nos casos com velocidade de fricção igual a 0,4, 0,811 e 1,0 m/s os valores de concentração nos poros próximos à superfície são da ordem de  $10^{-3}$ , para intervalo de tempo com 80% de massa de líquido restante, os valores de concentração nos poros próximos à superfície são da ordem de  $10^{-2}$  ( $u_*=0,002$ ), ilustrando claramente a limitação imposta pela redução de  $v_r$ .

#### 4.2.5.2 Influência da estabilidade atmosférica.

Para a análise da influência da estabilidade atmosférica foram feitas três simulações, as estabilidades atmosféricas são classificadas através do comprimento de Monin-Obukhov. Dessa forma as três simulações representam as três classes de estabilidade atmosférica principais. A primeira é a classe neutra que representa o caso base. A segunda a classe estável com comprimento de Monin-Obukhov igual a 1 e por último a classe instável com  $L=-1$ . A Tabela 4.2 mostra os valores de  $v_r$  utilizados para cada interação.

Tabela 4.2: Valores de  $v_r$  utilizados para as simulações de influência de estabilidade atmosférica.

<i>Comprimento de Monin-Obukhov</i>	$v_r$
-1	0,082007
$10^8$	0,055780
1	0,030018

A Figura 4.17 mostra as curvas de saturação para as três situações. A Figura 4.17 (a) apresenta a escala de tempo adimensional. E a Figura 4.17 (b) apresenta a escala de tempo dimensional em segundos.

A variação do comprimento de Monin-Obukhov altera os valores de  $v_r$ , entretanto esta variação ainda mantém os valores de  $v_r$  relativamente elevados para as configurações estudadas. Desta forma, de maneira análoga aos resultados apresentados na última seção, não existe variação significativa no tempo total de evaporação com estes níveis de  $v_r$ . Este comportamento indica novamente que o efeito limitante do meio poroso, nas configurações estudadas, é superior aos efeitos relacionados às variações de  $v_r$ .

Pela similaridade do efeito causado pelos parâmetros estudados é esperado que os resultados sejam similares aos apresentados na seção anterior. As diferentes classes de estabilidades atmosféricas possuem diferentes intensidades de turbulência, que são responsáveis pela remoção do vapor da superfície da matriz. Embora os tempos dimensionais para as diferentes simulações sejam muito próximos (Figura 4.17 (b)), o Gráfico 4.17 (a) mostra o fator limitante imposto pelo meio poroso. Apesar de maior intensidade de turbulência na classe instável ( $L=-1$ ) a dependência da evaporação é mais

evidente. A remoção mais eficiente na superfície não determina uma evaporação mais eficiente.

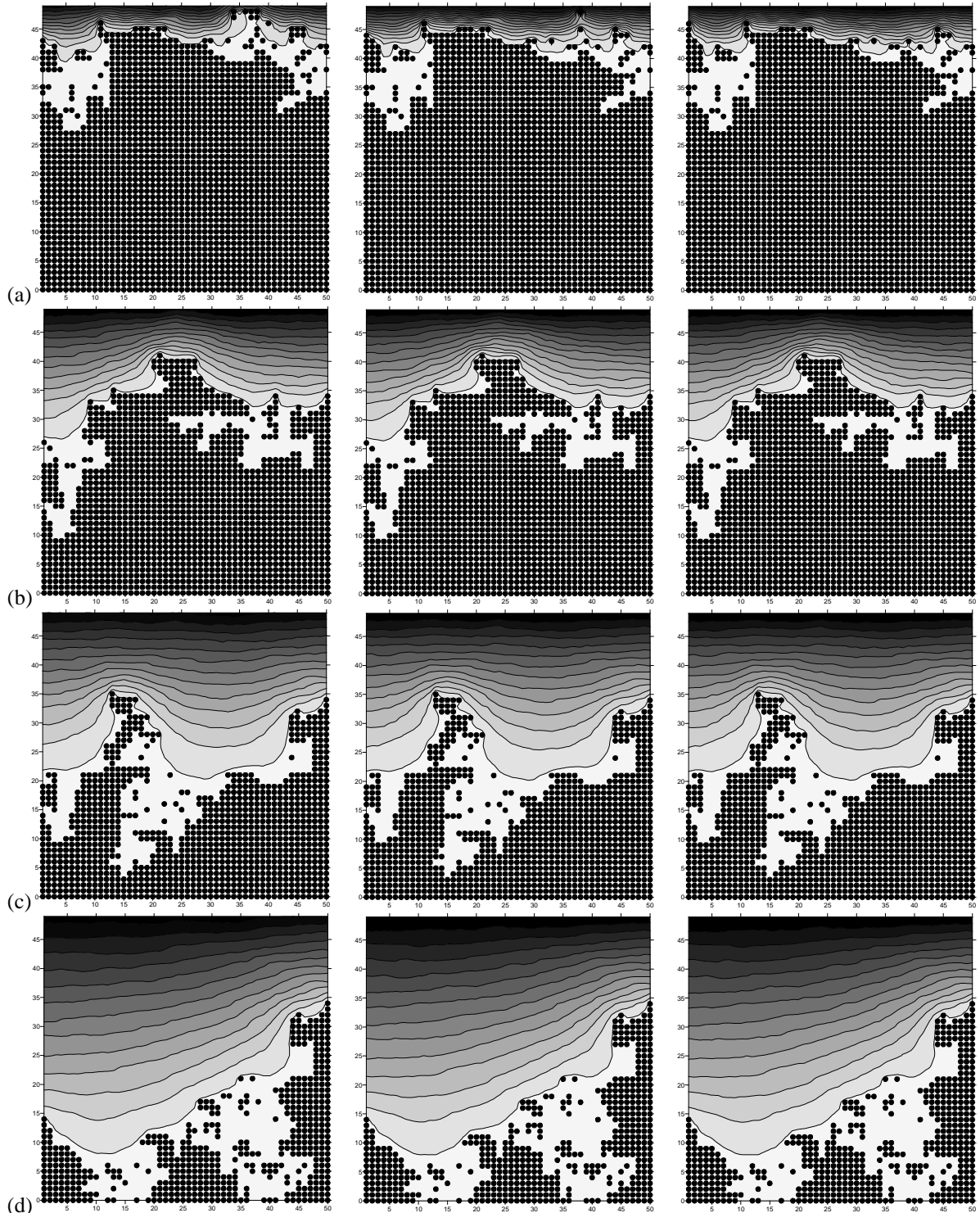


Figura 4.16: Distribuição de fase para diferentes valores de velocidade de fricção. Os contornos representam as isolinhas de concentração de vapor e os círculos representam os poros que ainda possui líquido para intervalos de tempo com (a) 80%, (b) 60%, (c) 40% e (d) 20% de massa. A coluna da esquerda representa a evolução para valores de  $\nu r$  igual a 0,002 m/s . A coluna central para valores de  $\nu r$  igual a 0,4 m/s . E a coluna da direita valores de  $\nu r$  igual a 1m/s.

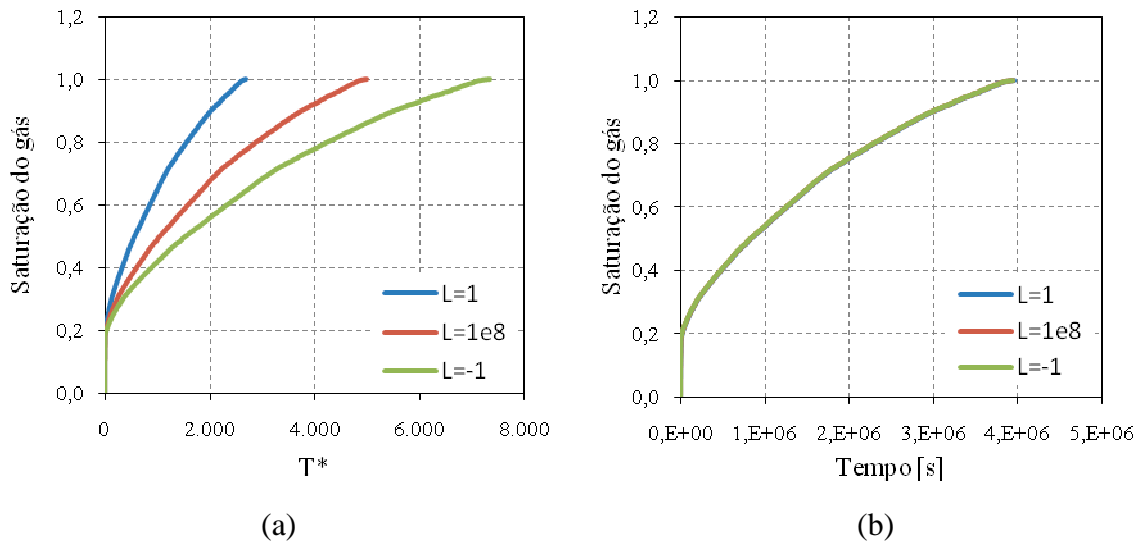


Figura 4.17: Curva de saturação para diferentes valores do comprimento de Monin-Obukhov. (a) escala de tempo adimensional e (b) o tempo real de evaporação.

#### 4.2.6 Influência da porosidade da matriz

De maneira análoga às últimas seções, a análise da influência da porosidade será feita através de três simulações. Uma sendo o caso base e as outras duas com porosidade maior e menor que o encontrado no caso base. A Tabela 4.3 mostra os valores de porosidade estudados nesta seção.

Com a finalidade de alcançar diferentes valores de porosidade e manter a mesma área por onde o fluxo inicial é removido o número de poros da matriz foi aumentado ou reduzido para obter a porosidade requerida. Portanto, as distribuições de diâmetros dos poros e das ligações são diferentes aos do caso base. Conseqüentemente as distribuições de fase de líquido e gás são diferentes. Desse modo dez interações foram feitas para estabilidade da média dos dados.

Tabela 4.3: Valores das porosidades das simulações.

<i>Configuração</i>	<i>Porosidade</i>	<i>Matriz</i>
Caso base	0,4	50x50
Configuração porosidade 1	0,9	80x80
Configuração porosidade 2	0,2	40x40

A Figura 4.18 mostra as curvas de saturação dos três casos simulados. As curvas cheias representam as médias das dez simulações para cada configuração, enquanto que as linhas tracejadas representam os maiores e menores valores encontrados nas dez simulações. As linhas tracejadas e cheias de mesma cor correspondem à mesma configuração. A Figura 4.18 (a) mostra a escala característica de tempo e a Figura 4.18 (b) a escala dimensional de tempo em segundos.

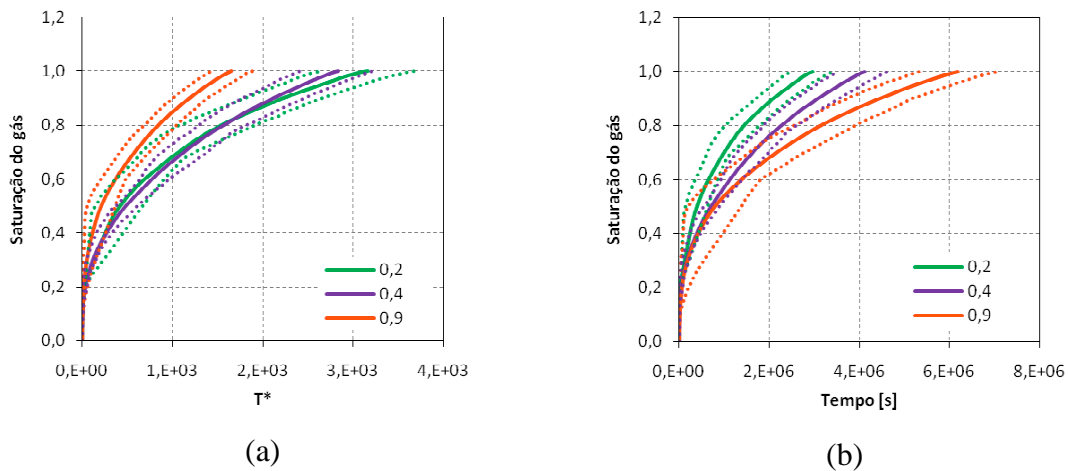


Figura 4.18: Curva de saturação para diversas porosidades do substrato. (a) escala de tempo adimensional e (b) o tempo real de evaporação.

A análise da Figura 4.18 (b) mostra que a configuração com maior porosidade demora mais tempo para evaporar, em média foram aproximadamente  $6 \times 10^6$ ,  $4 \times 10^6$  e  $3 \times 10^6$  segundos para completa evaporação para as configurações com porosidade 0,9, 0,4 e 0,2, respectivamente. Porosidades mais altas representam maiores espaços vazios e, portanto, maior massa de líquido no interior da matriz poros. Desta forma, é necessário um intervalo de tempo maior para evaporar a maior quantidade de massa.

Entretanto, a análise da Figura 4.18 (a) indica que quando o tempo adimensional é observado este comportamento tende a se inverter. O tempo  $t^*$  para a evaporação da configuração com porosidade 0,9 é significativamente menor que as outras simulações. O tempo  $t^*$  médio para a simulação com porosidade igual a 0,2 é ligeiramente superior ao tempo obtido para a configuração com porosidade 0,4. Esta tendência demonstra claramente o efeito limitante do meio poroso na taxa de evaporação, que é ampliado

com a redução da porosidade do meio. Menores porosidades representam maiores restrições ao fluxo gasoso.

A Figura 4.19 mostra as distribuições de fase líquida e gasosa para a simulação com porosidade igual a 0,2. A matriz possui dimensão 40x40. O volume médio de líquido de dez simulações é igual a  $1,2 \times 10^{-6}$ . E a Figura 4.20 mostra as distribuições de fase líquida e gasosa para a simulação com porosidade igual a 0,9. A matriz possui dimensão 80x80. O volume médio de líquido de dez simulações é igual a  $5,0 \times 10^{-6}$ . Para ambas as simulações os intervalos de tempo de cada distribuição correspondem ao tempo onde o volume de massa é igual a 80%, 60%, 40% e 20% da quantidade de massa inicial. As duas figuras apresentam comportamento macroscópico similar. Inicialmente, o gradiente de concentração de vapor é grande e a maior taxa de evaporação ocorre neste período. Note que as isolinhas de concentração estão concentradas na superfície da matriz nas duas figuras. Em seguida o número de *clusters* desconectados aumenta, também observa-se que os *clusters* localizados mais próximos da superfície evaporam mais rapidamente, esse efeito é devido a esses *clusters* estarem cercados por poros com concentração de vapor mais baixas do que os *clusters* localizados próximos a frente de evaporação. Isso pode ser observado nas Figuras 4.19 (b) e 4.20 (c).

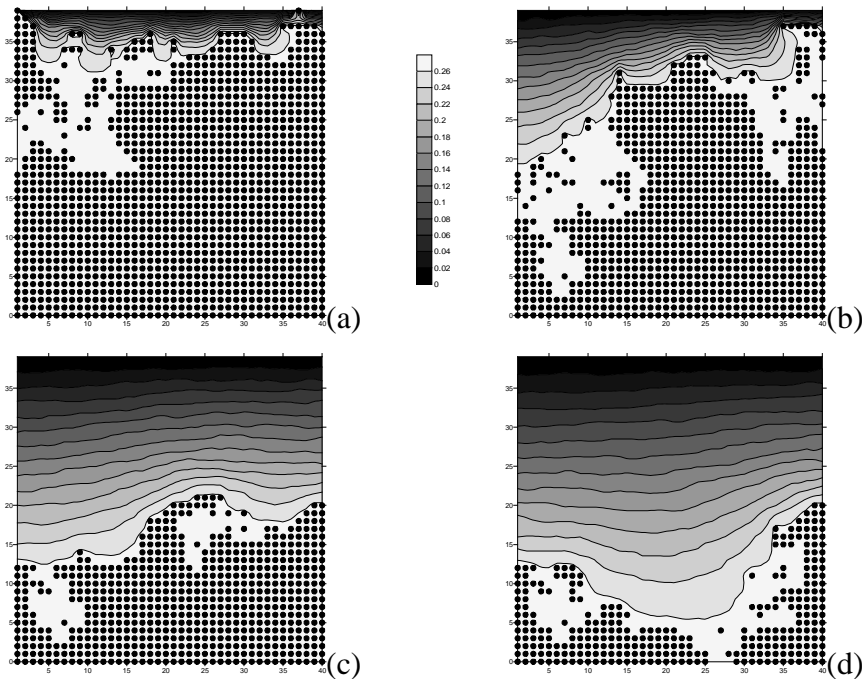


Figura 4.19: Distribuição de fase para porosidade igual a 0,2. Os contornos representam as isolinhas de concentração de vapor e os círculos representam os poros que ainda possui líquido para intervalos de

tempo com (a) 80%, (b) 60%, (c) 40% e (d) 20% de massa. Matriz 40x40 e volume médio de líquido igual a  $1,2 \times 10^{-6} \text{ m}^3$ .

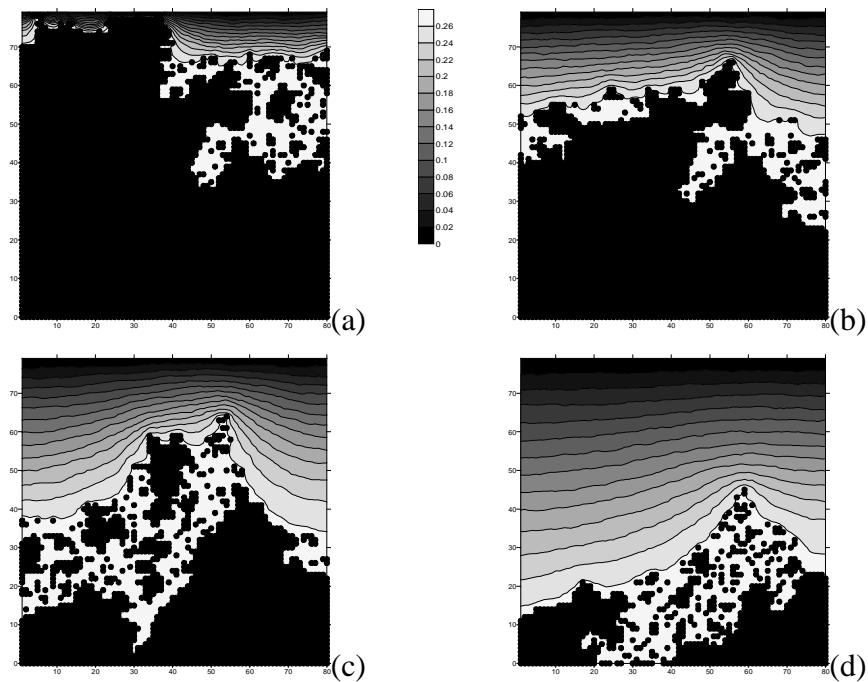


Figura 4.20: Distribuição de fase para porosidade igual a 0,9. Os contornos representam as isolinhas de concentração de vapor e os círculos representam os poros que ainda possui líquido para intervalos de tempo com (a) 80%, (b) 60%, (c) 40% e (d) 20% de massa. Matriz 80x80 e volume médio de líquido igual a  $5,0 \times 10^{-6} \text{ m}^3$ .

Após a secagem dos *clusters* desconectados, a frente de evaporação se torna mais uniforme. Como o gradiente de concentração de vapor é mais baixo, pode-se afirmar que as taxas de evaporação está decaindo (Figura 4.19 (c) e Figura 4.20 (c) ).



## 5 CONCLUSÃO E RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Este trabalho apresentou a implementação de um modelo de escala de poros para simular a evaporação de líquidos em meios porosos expostos à atmosfera. A verificação de acurácia do modelo foi feita através da comparação com resultados os apresentados por Yiotis et al. (2001). Após da verificação de acurácia do modelo foram realizadas análises referentes aos parâmetros governantes ao processo de evaporação expostos a atmosfera.

Para a análise da precisão do algoritmo foi implementado um modelo de escala de poros similar ao proposto por Yiotis et al. (2001). Os resultados apresentados mostraram boa acurácia entre o modelo proposto neste e os resultados de Yiotis et al.(2001). Como o modelo proposto contempla somente a ação das forças capilares os resultados foram melhores para as configurações onde as forças capilares eram dominantes, isto é, quando a velocidade de fluxo de ar na fratura era baixa e a ação das forças relacionadas com a pressão do escoamento fosse negligenciada.

Durante a análise dos parâmetros governantes que influenciam o processo de evaporação foram analisados os parâmetros: (i) coeficiente de difusão, (ii) concentração de saturação, (iii) fluxo de remoção e (iv) porosidade.

A análise da influência da concentração de saturação no processo de saturação mostrou que a variação do parâmetro não altera os resultados de taxa de evaporação para

secagem em meios porosos. Porém essas variações não geram nenhuma influência no efeito limitante do meio poroso.

A análise da influência do coeficiente de difusão mostrou os efeitos são análogos aos efeitos causados pela concentração de saturação. Entretanto, as diferenças causadas pela variação do coeficiente de difusão também pode ser observado na escala de tempo adimensional. Esse resultado mostra que, apesar de pequena, existe alteração no efeito limitante do meio poroso.

Quanto aos efeitos dos parâmetros relacionados com a eficiência do fluxo de remoção, o modelo indica que quando a velocidade é reduzida o tempo de evaporação aumenta, porém os efeitos limitantes do meio poroso são mais evidentes. Já os efeitos relacionados com a variação do comprimento de Monin-Obukhov são menos evidentes, já que esse parâmetro mantém os valores da velocidade de transporte de vapor aproximadamente inalterados.

O efeito da porosidade do meio interfere no processo de evaporação aumentando ou diminuindo o tempo de evaporação. Para porosidade mais elevadas o tempo para concluir o processo de evaporação é maior, visto que existe maior quantidade de massa. Entretanto, observando o tempo adimensional o efeito é inverso. Nesta situação quanto maior a porosidade menor será o efeito limitante do meio poroso.

Como o equacionamento formal da metodologia de implementação do filme nas ligações só surgiu em Prat (2007) e Yiotis et al. (2007) não foi possível a implementação do filme para este trabalho. Assim as recomendações para futuros trabalhos são a implementação do filme, o que levará a resultados mais realistas na taxa de evaporação. Dessa forma esses dados poderão ser comparados com dados experimentais.

A geometria dos poros e das ligações são fatores primordiais na acurácia da taxa de evaporação. Poros com geometria circular não são capazes de terem uma película líquida nas suas paredes. A distribuição de diâmetros dos poros e das ligações também influencia a acurácia do modelo.

## 6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Brutsaert W. (1982) *Evaporation into the Atmosphere: Theory, History and Applications*. D Reidel, Holland

Chandler, R., Koplik, J., Lerman, K., Willensen, J.F., “Capillary displacement and percolation in porous media.”, *J Fluid Mech*, 119, pp. 249-267, 1982.

Figus, C., Le Bray, Y., Bories, S., Prat, M., “Heat and mass transfer with phase change in a porous structure partially heated. Continuum model and pore network simulations”, *Int. J. Heat Mass Transf.*, v.42, pp. 2257–2569, 1999.

Griffiths, R. F., “A model for evaporation following droplet impingement on porous surfaces”, Consultancy report to CBDE, Porton Down, UMIST, 1991

Griffiths, R. F. and Roberts, I. D., “Droplet evaporation from porous surfaces, model validation from field and wind tunnel experiments for sand and concrete”, *Atmospheric Environment*, vol. 33, pp. 3531-3549, 1999.

Ho CK, Udell KS. Mass transfer limited drying of porous media containing an immobile binary liquid mixture. *Int J Heat Mass Transfer* ,vol.38,pp.339±50, 1995.

Jia, C., Shing, K. and Yortsos, Y. C.: 1999, Visualization and simulation of non-aqueous phase liquids solubilization in pore networks, *J. Contam. Hydrol.* 35, 363–387.

Laurindo, J.B., Prat, M., “ Numerical and experimental network study of evaporation in capillary porous media. Phase Distributions”, *Chem. Eng. Sci* 51 (23), p. 5171-5185, 1996.

Laurindo, J.B., Prat, M., “ Numerical and experimental network study of evaporation in capillary porous media. Drying rates”, Chem. Eng. Sci 53 (12), p. 2257-2269, 1997.

Le Bray, Y., Prat, M., “ Three dimensional pore network simulation of drying in capillary porous media, Int. J. Heat Mass Transf. V.42, p.4207-4224, 1999.

Le Gallo Y, Le Romancer JF, Bourbiaux B, Fernades G. SPE paper 1997;38924

Li, X. and Yortsos, Y. C., Theory of multiple bubble growth in porous media by solute diffusion, Chem. Eng. Sci. 50, 1247–1271, 1995.

Luikov, A. V., “Heat and mass transfer in capillary-porous bodies”, Pergamon Press, 1958.

Moreira, J.C.C.B.R., Rajagopal, K., “Evaporation of fluid in capillary porous media using a 3D correlated network model”, International Journal of Modern Physics, vol. 17, No.12, pp. 1763-1776, 2006.

Nasrallah, S. B. and Perre, P., “Detailed study of a model of heat and mass transfer during convective drying of porous media”, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 31, pp. 957-967, 1988

Nowicki, S. C., Davis, H. T. and Scriven, L. E., “Microscopic determination of transport parameter in drying porous media, Drying Tech., vol. 10, pp.925-946

Masmoudi, W., Prat, M. and Bories, S., 1992, Drying of capillary porous media: continuum approach or percolation Theory: some experimental evidence, In Heat and Mass Transfer in Porous Media (Edited by M. Quintard and M. Todorovic) pp. 817-828.

Patankar, V. S., 1980, “Numerical Heat Transfer and Fluid Flow”, Hemisphere Publishing Corporation, USA

Plumb, O. A., Pra, M., “Microscopic modelo for the study of drying of capillary porous media. In Drying’92 (Edited by Mujumda, A.S.), pp. 397-406. Elviesier, New York.

Prat, M., “Percolation model of drying under isothermal conditions in porous media”, Int. J. Mult. Flow, 19, pp. 691–704, 1993.

Prat, M., “Isothermal drying of non-hygroscopic capillary-porous material as an invasion percolation process”, Int. J. Multiphase Flow, vol. 21, No 5, pp.875-892, 1995.

Prat, M., Bouleoux, F., “Drying of capillary porous media with stabilized front in two dimension, Phys. Rev. E 60, pp. 5647-5656.

Prat, M., “Recent advances in pore-scale models for drying of porous media”, Chem. Eng. J, v.86, p. 153-164, 2002.

Prat, M. “On the influence of shape pore, contact angle and film flows on drying of capillary porous media”, International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 50, pp: 1455-1468, 2007.

Philip, J. R., de Vries, D.A., “Moisture movement in porous materials under temperature gradients”, *Trans. Am. Geophys. Un* 38, p.222-232, 1957.

Plourde, F., Prat, M., “Pore network simulations of drying of capillary porous media. Influence of thermal gradients.” *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 46, pp. 1293-1307, 2003.

Reis, N. C. Jr., “Droplet Impingement and Evaporation from Porous Surfaces” tese submetida no Environment Technology Centre do Departament of Chemical Engineering da The University of Manchester Institute of Science and Technology para o grau de PhD em junho de 2000.

Reis, N. C. Jr., Mantle, M., Griffiths, R. F., Gladden, L. F., J.M. Santos “MRI investigation of the evaporation of embedded liquid droplets from porous surface under different drying regimes”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 46, p.1279 - 1292, 2003.

Roberts, I. D., Griffiths, R. F., “A Model for the evaporation of droplets from sand”, *Atmospheric Environment*, vol. 29, pp. 1307-1317, 1995.

Ruggiero, M.A.G., Lopes, V.L.R., “Cálculo Numérico, Aspectos teóricos e computacionais”, 2 edição, Makron Books do Brasil, 1997

Segura, L. A., Toledo, P.G., “Pore-level modeling of isothermal drying of pore networks: Effects of gravity and pore shape and size distributions on saturation and transport parameters”, *Chem. Eng. J.*, v.111, p.237-252, 2005.

Shaw, T. M., “Drying as an immiscible displacement process with fluid counterflow”, *Phys. Rev. Lett.* , vol. 59, pp. 1671-1674.

Tsimpanogiannis, I. N., Yortsos, Y. C., Poulou, S., Kanellopoulos, N., Stubos, A. K. “Scaling theory of drying in porous media”, *Physical Review*, vol.59, n 4, pp. 4353-4365, 1999.

Valavanides, M. S. and Payatakes, A. C.: 2001, True-to-mechanism model of steady-state two-phase flow in porous media, using decomposition into prototype flows, *Adv. Water Resour.* 24, 385–407

van Dijke, M. I. J., Sorbie, K. S. and McDougall, S. R.: 2001, Saturation-dependencies of three-phase relative permeabilities in mixed-wet and fractionally wet systems, *Adv. Water Resour.* 24, 365–384

Westin, S. N., Winter, S., Karlsson, E., Hin, A. e Oeseburg, F., “On modelling of the evaporation of warfare agents on the ground”, *J. Hazardous Materials A*, vol. 63, pp. 5-24, 1998.

Yiotis, A. G., Stubos, A. K., Boudouvis, A. G., Yortsos, Y.C., “A 2-D pore-network model of the drying of single-component liquids in porous media”, *Advances in Water Resources* 24, pp. 439-460, 2001.

Yiotis, A. G., Tsimpanogiannis, I. N., Stubos, A. K., Yortsos, Y. C., “Pore-network modeling of isothermal drying in porous media”, *Transport Porous Media*, v.58, p. 63-86, 2005.

Yiotis, A. G., Tsimpanogiannis, I. N., Stubos, A. K., Yortsos, Y. C., “Pore-network study of the characteristics periods in the drying of porous materials”, *Journal of Colloid and Interface Science*, v.297, p. 738-748, 2006.

Yiotis, A. G., I. N. Tsimpanogiannis, A. K. Stubos, and Y. C. Yortsos , “Coupling between external and internal mass transfer during drying of a porous medium”, *Water Resour. Res.*, 43, W06403, doi:10.1029/2006WR005558

Wilkinson, D. and Willemsen, J. F.: 1983, Invasion percolation: a new form of percolation theory, *J. Phys. A* 16, 3365–3370.

## 7 APÊNDICE A

### 7.1 Cálculo da concentração de vapor na fratura.

O cálculo da concentração de vapor na fratura foi realizado através de técnicas de volumes finitos, entretanto para essa solução foi utilizada uma matriz de mesmo número de volumes da direção  $x$  e apenas uma linha, como mostrado na Figura 7.1. Sendo os pontos pretos a representação dos poros dentro da matriz porosa e a linha superior representa os volumes de controle na fratura por onde o ar é injetado. As únicas regiões que permitem a troca de massa são as extremidades da fratura, únicas regiões abertas para a superfície.

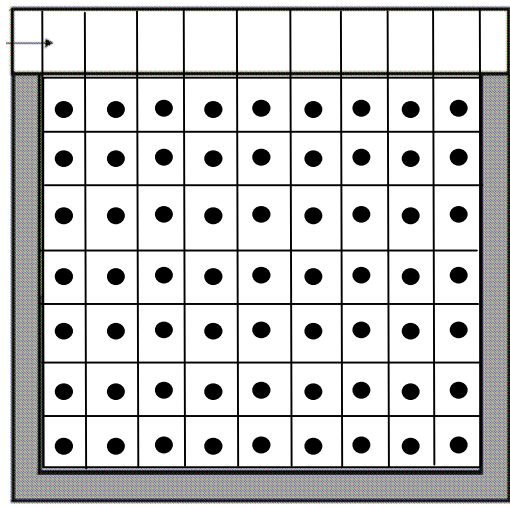


Figura 7.1: Volume de controle para solução da concentração de vapor na fratura. Os pontos pretos representam os poros, que são os volumes de controle dentro da matriz, e a linha adicionada à superfície do meio poroso. (Adaptado de Yiotis et al., 2001).

Inicialmente, a concentração do vapor na fratura é dita nula. Após o início do processo de evaporação, devido ao transporte de massa da matriz para a fratura, a concentração do vapor na fratura irá aumentar. O vapor gerado ficará retido na fratura e depois será transportado por advecção e difusão para fora da fratura. Esse acúmulo de vapor da fratura irá frear a evaporação do líquido na matriz porosa.

Para a solução do transporte de massa dentro de fratura foi adicionada uma camada de poros vazios, acima da superfície do meio poroso, por onde o vapor era transportado para fora da fratura. As concentrações imediatamente fora da fratura são consideradas nulas durante todo o processo.

Em algumas situações propostas no modelo de Yiotis et al. (2001) existe um fluxo de ar constante na fratura. Para essas situações o transporte de vapor dentro da fratura é feito através de advecção e difusão. Para as situações onde não existe fluxo de ar na superfície o vapor é transportado unicamente por difusão.

A concentração de vapor na fratura pode ser calculada pela equação:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial C}{\partial x_i} \quad (7.1)$$

Onde  $C$  é a concentração de vapor na fratura e  $D$  o coeficiente de difusão do hexano no ar.



