

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

RAFAEL SARTIM

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA TRIDIMENSIONAL DA
EVAPORAÇÃO DE GOTAS EM MEIOS POROSOS USANDO
UM MODELO DE ESCALA DE POROS**

VITÓRIA
2007

RAFAEL SARTIM

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA TRIDIMENSIONAL DA
EVAPORAÇÃO DE GOTAS EM MEIOS POROSOS USANDO
UM 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^a Dr^a Jane Méri Santos

VITÓRIA
2007

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)
(Biblioteca Central da Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

C425s Sartim, Rafael, 1980-
Simulação numérica tridimensional da evaporação de gotas em meios porosos usando um modelo de escala de poros / Rafael Sartim. – 2007. 139 f. : il.

Orientador: Neyval Costa Reis Júnior.

Co-Orientadora: Jane Meri Santos.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Materiais porosos. 2. Evaporação. 3. Atmosfera. 4. Poluição. I. Reis Júnior, Neyval Costa. II. Santos, Jane Meri. III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Tecnológico. IV. Título.

CDU: 628

RAFAEL SARTIM

SIMULAÇÃO NUMÉRICA TRIDIMENSIONAL DA EVAPORAÇÃO DE GOTAS EM MEIOS POROSOS USANDO UM 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.

Aprovada em ____/____/____.

COMISSÃO EXAMINADORA

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

Prof^a. Dr^a. Jane Méri Santos
Universidade Federal do Espírito Santo
Co-Orientadora

Prof. Dr. Julio Tomas Aquije Chacaltana
Universidade Federal do Espírito Santo

Dr. Júlio César C B R Moreira
Instituto Nacional da Propriedade
Industrial

*Aos meus pais, Ademir e Madalena,
aos meus irmãos, Marco e Thaisa
e à Teca.*

AGRADECIMENTOS

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

Ao meu orientador, professor Neyval Costa Reis Júnior, pela ajuda, pelo ensinamento e por toda confiança que me passou.

À minha co-orientadora, professora Jane Meri Santos.

Aos colegas do laboratório de Poluição do Ar, em especial à Elisa e à Fernanda.

Aos colegas da CST pela força e motivação.

A todos os amigos e familiares que me ajudaram direta e indiretamente.

RESUMO

A investigação experimental e a modelagem matemática do impacto e evaporação de gotas em superfícies porosas, é um assunto de grande interesse em inúmeras aplicações industriais tais como, petrolífera, têxtil, alimentícia, e em tecnologia de impressão a jato de tinta. Outro ponto de interesse seria em aplicações ambientais, como o lançamento de líquidos nocivos na atmosfera durante acidentes ambientais onde é necessário identificar e quantificar o impacto ambiental causado. Resultados experimentais apresentados por Reis et al. (2003) fornecem fortes indícios de que as abordagens anteriores subestimaram a importância do transporte capilar de líquido durante o processo de secagem. Assim, torna-se importante desenvolver um modelo que seja capaz de incorporar a completa importância do transporte capilar de líquido durante a evaporação. Além do mais, a escala dos problemas de evaporação de gotas é muito pequeno tornando a aplicabilidade de modelos que incorporam uma abordagem macroscópica questionável quanto a sua representatividade das características do processo. Isso sugere aplicações de modelos que representam o transporte de massa em nível microscópico, incorporando efeitos com a aleatoriedade da matriz porosa sobre o transporte de vapor e líquido durante a mudança de fase. Este trabalho visa suprir essas deficiências dos modelos atuais através do desenvolvimento de um modelo tridimensional capaz de prever a evaporação de gotas em meios porosos por meio de um modelo de escala de poros. A avaliação dos resultados é baseada nos dados experimentais de Reis et al. (2003) e Reis et al. (2006). Como resultado, o modelo obteve bons resultados na distribuição de líquido principalmente na evaporação da gota de água, enquanto portou-se de maneira satisfatória na predição da secagem da gota de dietyl malonato. Quanto à taxa de evaporação, seu comportamento apresentou certa discrepância em comparação com os experimentos o que torna questionável algumas considerações das características físicas implementadas no modelo.

Palavras-Chave: Meios porosos. Evaporação de gotas. Modelo de escala de poros.

ABSTRACT

The experimental work and the mathematical modeling of the impact and evaporation of droplets in porous surfaces, are a subject of great interest in innumerable industrial applications as, petroliferous, textile, nourishing, and in inkjet printing technology. Another point of interest would be in environmental applications, as the release of hazardous liquids into the atmosphere during environmental accidents where it is necessary to identify and to quantify the caused environment impact. Experimental results presented by Reis et al. (2003) indicate that the previous approach underestimates the importance of the capillary transport of liquid during the drying process. Thus, one becomes important to develop a model that is capable to incorporate the complete importance of the capillary transport of liquid during the evaporation. In addition, the scale of the problems of evaporation of droplets is very small that questions the applicability of the models that incorporate a macroscopic approach due its representatives of the characteristics of the process. This suggests applications of models that represent the transport of mass in microscopically level, incorporating effect with the random of the porous medium on the vapor transport and liquid during the phase distribution. This work aims at to supply these deficiencies of the current models through the development of a three-dimensional model capable to predict the evaporation of droplets in porous media by means of a model of scale of pores. The assessments of the results is based on the experimental data of Reis et al. (2003) and Reis et al. (2006). As result, the model mainly got good precision in the distribution of liquid phase in the evaporation of the water droplet, while it was behaved in satisfactory way in the prediction of the drying of the droplet of dietyl malonate. About the evaporation rate, its behavior presented certain discrepancy in comparison with the experiments which becomes questionable some considerations about the physical characteristics implementation in the model.

Keywords: Porous media. Droplets evaporation. Pore network models.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Valor de L_{cap} e L_g para os quatro casos simulados. água num meio poroso de esferas de vidro de 400 μ m de diâmetro com v_r igual a 0.0079 m/s (caso 1), água num meio poroso de esferas de vidro de 120 μ m de diâmetro com v_r igual a 0.0079 m/s (caso 2), dem com v_r igual a 0.0079 m/s e meio poroso de esferas de vidro de 120 μ m de diâmetro(caso3).....	47
Tabela 2 - Valores das propriedades físicas da água e DEM e constantes utilizadas para os cálculos de L_{cap} e L_g	48
Tabela 3 - Valores obtidos através de Reis (2000) para os casos estudados no presente trabalho.....	50
Tabela 4 - Determinação do raio do poro para cada tipo de arranjo.....	53
Tabela 5 - Sumário das configurações adotadas para os quatro casos simulados Propriedades físicas dos líquidos simulados.....	61
Tabela 6 - Propriedades físicas dos líquidos simulados.....	61

LISTA DE SIGLAS

CRP	Período da taxa constante
FRP	Período de taxa decrescente
CC	<i>Cluster</i> contínuo
CLP	Camada limite planetária
CD	<i>Cluster</i> desconectado
IPGD	Invasão por gradiente desestabilizador
IPGE	Invasão por gradiente estabilizador
NMR	Ressonância magnética nuclear

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras romanas

2D	Bidimensional
3D	Tridimensional
A_0	Área característica da gota antes de cair no solo
B	Número de Bond
c	Concentração de vapor expressa em [kg/m]
c_0	Concentração de vapor característica [kg/m]
c_{sat}	Concentração de saturação de vapor no meio poroso
C^*	Concentração de vapor adimensional
C_∞	Umidade específica do fluxo característico externo
C_a	Número capilar
C_i	Concentração de vapor no poro [kg/m ³]
C_r	Concentração de vapor na altura de referência acima da superfície
C_w	Umidade específica na superfície do meio poroso
d_p	Diâmetro da partícula do meio poroso [m]
D	Coefficiente de difusão [m ² /s]
e	Densidade média do fluxo de massa evaporada
E_e	Fluxo externo [kg/s]
F_{ij}	Fluxo de vapor entre poros [kg/s]
g	Aceleração da gravidade
h	Comprimento do lado do arranjo forma pela compactação das partículas do meio poroso
h_{gota}	Profundidade final da gota [m]
H^*	Fator de penetração
K	Constante de Von Karman
l	Distância de centro a centro entre dois poros
L	Comprimento característico do sistema [m]
L_{cap}	Comprimento característico da viscosidade [m]

L_g	Comprimento característico da gravidade [m]
L_m	Comprimento de Monin-Obukhov
M_0	Massa inicial [kg]
P_c	Pressão capilar
r_0	Raio da gota antes do impacto no solo [m]
r_{gota}	Raio da gota após absorção no meio poroso
r_{ij}	Raio da ligação entre dois poros [m]
\bar{r}	Raio médio dos poros [m]
R^*	Fator de espalhamento
Sc	Número de Schmidt
t	Tempo [s]
T^*	Tempo adimensional
To	Escala de tempo característica do processo
u_*	Velocidade de fricção [m/s]
U_∞	Velocidade característica do fluxo externo [m/s]
$V_{arranjo}$	Volume do arranjo do empacotamento das partículas do meio poroso [m ³]
V_{cubo}	Volume do arranjo do empacotamento do tipo cúbico [m ³]
V_i	Volume do poro [m ³]
$V_{romboedro}$	Volume do arranjo do empacotamento do tipo romboedro [m ³]
$V_{tetraedro}$	Volume do arranjo do empacotamento do tipo tetraedro [m ³]
Z_r	Altura de referência [m]
Z_{0r}	Comprimento de rugosidade [m]

Letras gregas

π	Pi
γ	Tensão superficial [N/m]
ρ_l	Densidade do líquido [kg/m ³]
ρ_g	Densidade do gás [kg/m ³]
ε	Porosidade do meio
μ	Viscosidade do líquido [kg/ms]
θ	Ângulo de molhabilidade [°]
v	Velocidade de Darcy [m/s]
v_r	Velocidade de transporte externo de vapor [m/s]
ΔC_i	Varição de concentração de vapor em um instante de tempo [kg/m ³]
ψ_v	Função do perfil do vapor na atmosfera
ϑ	Ângulo entre as partículas do meio poroso [°]

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Imagens de uma gota de líquido absorvida num meio poroso (gota de água de 1,6 mm de diâmetro em um meio poroso composto de esferas de vidro com 400 μm de diâmetro). regiões claras indicam a presença de líquido e a superfície plana na parte superior da gota representa a interface meio poroso/atmosfera, onde o intervalo de tempo entre as figuras é de aproximadamente 12 minutos.....	19
Figura 2 - Diagrama de fase de secagem na ausência dos efeitos dos gradientes térmicos	22
Figura 3 - Evolução temporal do formato de uma gota durante o impacto em um meio poroso: (a) no momento do impacto, (b) $t = 0,16$ ms, (c) $t = 0,48$ ms, (d) $t = 0,96$ ms, (e) $t = 1,92$ ms e (f) $t = 2,84$ ms	25
Figura 4 - Imagens de uma gota de líquido absorvida por um meio poroso (gota de água de 1,6 mm de diâmetro em um meio poroso de esferas de vidro de 1200 μm). Regiões claras indicam a presença de líquido e a superfície plana na parte superior da gota representa a interface meio poroso/atmosfera.....	25
Figura 5 - Imagens de uma gota absorvida num meio poroso (gota de Dietil-malonato de 1,6 mm de diâmetro em um meio poroso composto de esferas de vidro de 120 μm diâmetro). Regiões claras indicam a presença de líquido e a superfície plana na parte superior da gota representa a interface meio poroso/atmosfera, onde o intervalo de tempo entre as figuras é de aproximadamente 12 minutos	26
Figura 6 - Evaporação tridimensional nos padrões de 80, 60, 40 e 20 % de saturação de líquido. Os poros cheios de líquido são mostrados na cor cinza. Não há transferência de massa pelas laterais e o fundo. O Vapor escapa pelo topo da matriz porosa. Os efeitos gravitacionais são desconsiderados	27
Figura 7 - Evolução temporal dos perfis de concentração de água e imagens do formato da gota dentro do meio poroso com partículas de esfera de vidro de 120 de diâmetro	29
Figura 8 - Representação esquemática da média do volume	30
Figura 9 - Representação esquemática da (a) microestrutura de um meio poroso, (b) representação da microestrutura como uma série de poros e ligações e (c) representação de uma matriz composta por poros e ligações usualmente utilizada em modelos de escala de poro.....	31
Figura 10 - Representação esquemática de uma evaporação de gota durante o período de secagem	33
Figura 11 - Esquemático das configurações para os três casos.....	35
Figura 12 - Representação esquemática dos filmes de líquido nos cantos e ao longo das paredes de uma ligação entre dois poros, sendo que, a ligação acabou de ser invadida pelo gás.	36
Figura 13 - Curvas de secagem dos experimentos e simulações. S é a saturação do líquido e t o tempo em horas.	39
Figura 14 - Evolução da evaporação de dois poros cheios de líquido. (a) Inicialmente os poros estão completamente cheios. (b) Quando a diferença de pressão da garganta superior excede sua resistência capilar, a interface retrocede e o poro é penetrado pela fase gasosa. A mesma transição ocorre em (c) e (d)...	42

Figura 15 - Representação esquemática da evaporação da matriz porosa e a formação dos <i>clusters</i>	42
Figura 16 - Representação esquemática dos tipos de poros.....	43
Figura 17 - Esquemático representando as equações aplicadas aos fluxos de vaporização de líquido, ao balanço do transporte de vapor nos poros vazios e ao fluxo de vapor para a atmosfera.....	46
Figura 18 - Definição do Fator de espalhamento (R^*) e da profundidade de penetração (H^*)	49
Figura 19 - (a) Imagem da vista superior do substrato (plano XZ) com representação esquemática da fatia de 1,5 mm que é utilizada para se obter a imagem lateral. (b) imagem lateral da gota dentro do substrato (plano XY). Os pontos claros representam a parte do substrato ocupado por líquido e os pontos escuros a parte que não foi ocupada.....	50
Figura 20 - Compactação das esferas com a formação dos poros. (a) Compactação cúbica ($\vartheta=90^\circ$). (b) Compactação hexagonal ($\vartheta=60^\circ$).....	52
Figura 21 - Representação esquemática da geometria determinando os poros com partículas perfeitamente esféricas. (a) Compactação cúbica. (b) Compactação hexagonal	52
Figura 22- Representação do tubo de ensaio contendo a matriz porosa e exemplos de imagens obtidas; imagem 1, vista superior (XZ) com representação esquemática da fatia de 1.5 mm que é utilizada para se obter a imagem lateral. Imagem 2, vista lateral (XY) da gota dentro do substrato. Os pontos claros representam a parte do substrato ocupado por líquido e os pontos escuros a partícula do meio poroso.....	56
Figura 23- Visão lateral da imagem do líquido logo após absorção no substrato e o correspondente perfil de concentração de líquido	57
Figura 24- Evolução no tempo das imagens da gota de água dentro do meio poroso com 400 μm de diâmetro das partículas. Dados experimentais no lado esquerdo e simulação no lado direito).....	65
Figura 25- Evolução no tempo do perfil de concentração de líquido (água) dentro do meio poroso com 400 μm de diâmetro das partículas. Dados experimentais no lado esquerdo e simulação no lado direito).....	67
Figura 26- Visão tridimensional dos poros cheios de líquido no interior da matriz porosa.....	70
Figura 27- Evolução no tempo das concentrações de vapor na matriz porosa da gota de água dentro do meio poroso com 400 μm de diâmetro das partículas.....	71
Figura 28- Fração mássica remanescente no meio poroso no tempo adimensional.....	72
Figura 29 - Variação da taxa de evaporação adimensional da gota no tempo adimensional.....	73
Figura 30- Variação da taxa de evaporação no tempo, a área exposta para evaporação no tempo dividido por 1000, e número de clusters gerados durante a secagem dividido por 10^{10}	73
Figura 31- Evolução no tempo das imagens da gota de água dentro do meio poroso com 120 μm de diâmetro das partículas. Dados experimentais no lado esquerdo (REIS, 2003) e simulação no lado direito.....	77
Figura 32- Evolução no tempo do perfil de concentração de líquido (água) dentro do meio poroso com 120 μm de diâmetro das partículas. Dados experimentais no lado esquerdo (REIS et al, 2003) e simulação no lado direito.....	79

Figura 33 - Evolução no tempo das imagens da gota de (DEM) dentro do meio poroso com 120 μm de diâmetro das partículas com ν_r igual a 0.0079. Dados experimentais no lado esquerdo (Reis, 2006) e simulação no lado direito.....	82
Figura 34 - Evolução no tempo das concentrações de vapor na matriz porosa da gota de dietil malonato dentro do meio poroso com 120 μm de diâmetro das partículas e ν_r igual a 0.0079. Dados experimentais no lado esquerdo (REIS et al, 2006) e simulação no lado direito.....	85
Figura 35 - Fração mássica do líquido remanescente dentro do meio poroso no tempo adimensional para o caso 3.....	88
Figura 36 - Variação da taxa de evaporação adimensional da gota no tempo adimensional, para o caso 3.....	89

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	17
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	21
2.1 EVAPORAÇÃO DE LÍQUIDOS EM MEIOS POROSOS	21
2.1.1 Evaporação de gota em meios porosos	24
2.2 MODELOS DE EVAPORAÇÃO EM MEIOS POROSOS.....	29
2.2.1 Revisão dos estudos em modelos de evaporação de gotas em meios porosos	31
2.2.2 Revisão dos estudos precedentes baseados nos modelos de escala de poros.....	34
3 METODOLOGIA	40
3.1 MODELO DE ESCALA DE POROS.....	40
3.1.1 Taxa de evaporação.....	43
3.1.2 Transporte de vapor dentro da matriz porosa	44
3.1.3 Remoção de vapor da superfície da matriz porosa para a atmosfera	45
3.1.4 Influência dos efeitos viscosos e gravitacionais	46
3.2 REPRESENTAÇÃO DA MATRIZ POROSA E DA GEOMETRIA DA GOTA	48
3.2.1 Formato da gota	48
3.2.2 Meio poroso	51
3.3 ALGORÍTIMO NUMÉRICO.....	54
3.4 DADOS EXPERIMENTAIS.....	55
3.5 PARAMETRIZAÇÃO	57
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	60
4.1 CASO 1	62
4.2 CASO 2	75
4.3 CASO 3	81
5 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	90
6 REFERÊNCIAS.....	92

1 INTRODUÇÃO

O estudo sobre o impacto e a evaporação de gotas em superfícies porosas, é um assunto científico e tecnologicamente de grande interesse em inúmeras aplicações industriais, tais como, petrolífera, têxtil, alimentícia, cerâmicos, materiais de construção, farmacêutica e em tecnologia de impressão a jato de tinta. Para esta classe de aplicações os focos principais de interesse são o formato da gota após o impacto e a taxa de evaporação. Por exemplo, em aplicações como o projeto de impressoras usando a tecnologia de jato de tinta os objetivos principais do estudo estão relacionados à determinação dos parâmetros ótimos para a qualidade e velocidade de impressão. Neste caso, o foco principal dos estudos é dirigido para a determinação do diâmetro da gota após o impacto e a taxa de evaporação, que estão fortemente ligados à qualidade final da impressão (resolução de impressão) e ao tempo de secagem.

Para aplicações ambientais, como o lançamento de líquidos nocivos na atmosfera durante acidentes ambientais (ruptura de vasos de pressão ou lançamento de pesticidas, por exemplo), é necessário identificar e quantificar o impacto ambiental causado. Neste caso, é importante considerar os riscos relacionados à inalação do vapor gerado pela volatilidade do líquido, além dos riscos do contato direto do líquido contaminante. Assim, para se avaliar o impacto ambiental na área contaminada é necessário prever a concentração de vapores na atmosfera, que além de estar relacionada às condições atmosféricas influenciando a dispersão, está principalmente ligada à taxa de evaporação do líquido no interior da superfície contaminada.

Muitos estudos têm sido realizados nesta área, entre outros podem-se citar Baines e James (1994), Roberts e Griffiths (1995), Westin et al(1998), Griffiths e Roberts (1999), que são análises experimentais e/ou teóricas do problema. Apesar dos mecanismos de transporte dentro do meio poroso já serem razoavelmente conhecidos, a interação complexa entre a quantidade de movimento da gota em queda, a tensão superficial atuante dentro e fora do meio poroso somados ao transporte através das capilaridades do meio poroso causam grandes dificuldades para a modelagem matemática (ALLEBORN; RASZILLIER, 2004). Além disso, a redistribuição de fase, devida ao transporte capilar durante a evaporação, é frequentemente subestimada, levando a imperfeição nas taxas de evaporações previstas (PRAT, 2007). Desta

forma, este tópico de pesquisa ainda requer consideráveis esforços no sentido de melhorar a capacidade de predição dos modelos (REIS et al., 2006).

A evaporação de gotas em meios porosos é um caso particular dos problemas de secagem em meios porosos. Os primeiros modelos de secagem de meios porosos envolvendo efeitos capilares e o transporte de vapor foram desenvolvidos na década de 50, por Phillip e de Vries (1957) e Luikov (1958). Estes modelos são baseados no tratamento macroscópico do problema, considerando o meio poroso como um meio contínuo fictício. Nesta abordagem o transporte de líquido e de vapor no interior do substrato é descrito por uma equação de difusão de massa, onde os coeficientes de transporte de massa são funções das características da matriz porosa. Modelos baseados nesta hipótese têm sido amplamente utilizados desde então, incorporando mecanismos mais complexos e um maior formalismo na dedução das equações governantes, melhorando consideravelmente a qualidade das predições, entre outros Nasrallah e Perre (1988), Whitaker (1991) e Westin et al. (1998).

Especificamente para a evaporação de gotas a partir de meios porosos os modelos têm se baseado em duas abordagens principais: (i) aqueles considerando a teoria de avanço de 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 (REIS, 2000).

O primeiro grupo, baseado na teoria de avanço de uma frente de evaporação, negligencia o movimento do líquido durante o processo e aborda a evaporação considerando somente o efeito do vapor se movendo através do meio poroso, enquanto o líquido restante da gota mantém sua posição original. Assim, o transporte de vapor para a atmosfera é caracterizado por dois fenômenos, a difusão molecular do vapor dentro do meio poroso até alcançar a superfície e a difusão de vapor na interface entre o meio poroso e a atmosfera, que é caracterizada pelas condições do escoamento na atmosfera.

Outros autores (WESTIN et al., 1998) questionam o fato desta abordagem não considerar o movimento do 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 – estes modelos estão incluídos no grupo (ii).

Resultados experimentais apresentados por Reis et al (2003) forneceram fortes indícios de que a abordagem através das equações de difusão é mais adequada do que a teoria de avanço da frente de evaporação para situações de secagem de gota. A importância do transporte capilar durante a evaporação faz com que ocorra uma considerável redistribuição do líquido durante o processo. Isso leva a uma grande necessidade de se avaliar, com mais detalhe, o fenômeno da evaporação considerando o transporte tanto de vapor quanto do próprio líquido no processo.

Muitos autores, dentre eles Figus et al. (1999) e Yotis et al. (2001), afirmam que o uso da hipótese de um meio contínuo e de coeficientes empíricos de transporte pode apresentar imperfeições consideráveis, especialmente em condições onde os poros da matriz apresentam uma distribuição de diâmetros com muito espalhamento. Além disso, a região do meio poroso ocupada por líquido em estudos de evaporação de gotas é da ordem de milímetros ou décimos de milímetros ($10^{-3} - 10^{-4}$ m) e os poros do meio poroso de interesse (como areia, por exemplo) são da ordem de dezenas ou centenas de micrometros ($10^{-4} - 10^{-5}$ m). Portanto, uma gota absorvida por um meio poroso pode possuir diâmetro de apenas algumas dezenas ou centenas de poros, tornando a representação como um meio contínuo claramente questionável para esta classe de problemas, veja Figura 1 como exemplo.

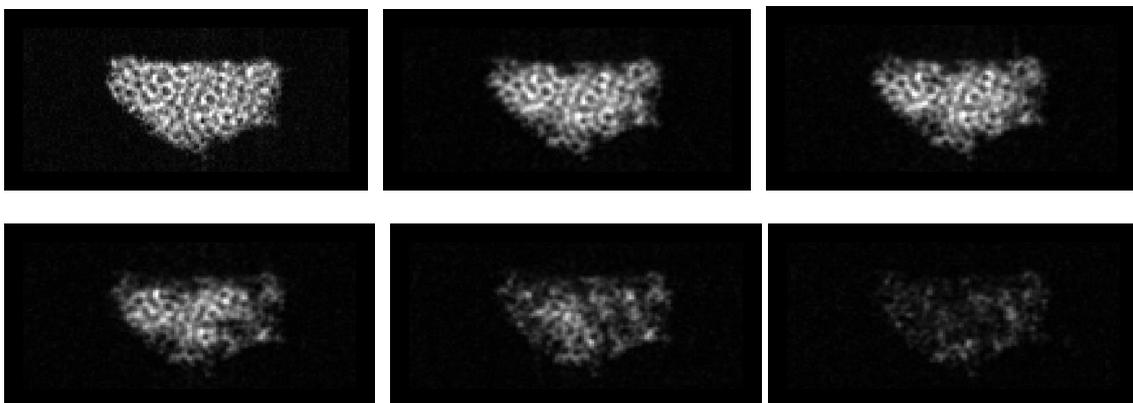


Figura 1 - Imagens de uma gota de líquido absorvida num meio poroso (gota de água de 1,6 mm de diâmetro em um meio poroso composto de esferas de vidro com 400 μm de diâmetro). Regiões claras indicam a presença de líquido e a superfície plana na parte superior da gota representa a interface meio poroso/atmosfera (REIS et al., 2003), onde o intervalo de tempo entre as figuras é de aproximadamente 12 minutos.

Na última década, diversos trabalhos científicos têm surgido na literatura reportando o uso de “modelo de escala de poros” ou “*pore-scale model*” que representam melhor os fenômenos microscópicos de transporte, entre Laurindo e Prat (1996), Yiotis et al. (2001), Moreira e Rajagopal (2006), Prat (2007) e Yiotis et al. (2007). Esta classe de modelos representa o transporte de massa em nível microscópico, incorporando efeitos com a aleatoriedade da matriz porosa sobre o transporte de vapor e líquido durante a mudança de fase.

Neste contexto, o objetivo deste trabalho é desenvolver um algoritmo capaz de simular a evaporação de gotas em meio porosos e compará-lo com os resultados experimentais obtidos por Reis et al. (2003) e Reis et al. (2006). Com base neste objetivo, foram estabelecidos os seguintes objetivos específicos:

- a) Desenvolver um modelo computacional baseado em uma abordagem de escala de poros para simular a evaporação de gotas em meios porosos.
- b) Avaliar a precisão do algoritmo no comportamento da redistribuição de líquido e de vapor dentro do meio poroso e avaliar o comportamento da taxa de evaporação da gota.

Esta dissertação se estrutura em cinco capítulos, sendo eles: Introdução no Capítulo 1, o Capítulo 2 apresenta uma revisão sobre os estudos científicos realizados nesta área de pesquisa, no Capítulo 3 é apresentada a metodologia utilizada para a simulação do problema. São descritos o modelo de escala de poros e condições de contorno envolvidas no problema, a representação estruturada do meio poroso, do formato inicial da gota e o detalhamento dos procedimentos implementados no algoritmo desenvolvido. Os resultados obtidos pela simulação computacional e discussão relacionada à comparação com os resultados experimentais são apresentados no Capítulo 4. Por fim, o Capítulo 5 apresenta a conclusão e os comentários finais.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo apresenta uma descrição dos aspectos físicos envolvidos no fenômeno em estudo e uma breve revisão dos principais estudos na área da evaporação de líquidos em meios porosos. O capítulo está dividido em duas seções, sendo elas: a Seção 2.1 que apresenta um breve resumo sobre o processo de absorção da gota no substrato como também descreve o comportamento do processo de evaporação e remoção do vapor do meio poroso para a atmosfera. Já a Seção 2.2 apresenta uma descrição sucinta sobre os modelos de evaporação e suas respectivas escalas de aplicação numa revisão sobre os principais estudos que utilizam os modelos de escala de poros.

2.1 EVAPORAÇÃO DE LÍQUIDOS EM MEIOS POROSOS

Como discutido em Prat et al. (1999) e Prat (2002) a distribuição de fase sobre condições de secagem lenta e na ausência do gradiente de temperatura é controlada pelos efeitos capilares, viscosos e gravitacionais. Sabe-se que as forças viscosas e gravitacionais atuam na pressão interna do líquido, influenciando assim, seu transporte. Alguns padrões de secagem são esperados para diferentes condições de secagem. Esses padrões são mostrados no diagrama de fase da Figura 2. L representa o comprimento característico da região ocupada por líquido dentro do meio poroso. L_g é o comprimento característico da gravidade e representa a distância na qual a diferença de pressão devido a gravidade se compara com a diferença de pressão interfacial do líquido. L_g é proporcional ao inverso de B (número de Bond) que relaciona forças gravitacionais sobre forças capilares ($B^{-1} = 2\gamma \cos \theta / \bar{r}^2 \rho_l g$). Onde γ é a tensão superficial, θ o ângulo de molhabilidade, \bar{r} é o raio médio dos poros, ρ_l é a densidade do líquido e g a aceleração da gravidade. L_{cap} é o comprimento característico viscoso, representa a distância a qual a diferença de pressão devido aos efeitos viscosos é comparável com a diferença de pressão interfacial. O valor de L_{cap} é proporcional ao inverso de Ca (número capilar) que é a razão entre forças viscosas e capilar ($Ca^{-1} = 2\gamma \cos \theta / \mu_l \nu$). μ_l é a viscosidade dinâmica do líquido e ν a velocidade de Darcy.

Quando L_g e L_{cap} são maiores do que L o diagrama da Figura 2 mostra que o sistema como um todo (líquido no meio poroso) é pequeno demais para que as forças viscosas e gravitacionais possam influenciar na secagem. O processo é então dominado pelos efeitos capilares caracterizados pelos padrões fractais. Quando L_g ou L_{cap} são menores do que L , a gravidade e viscosidade passam a interferir na secagem estabilizando a frente de evaporação (IPGE para viscosidade e IPGD para gravidade).

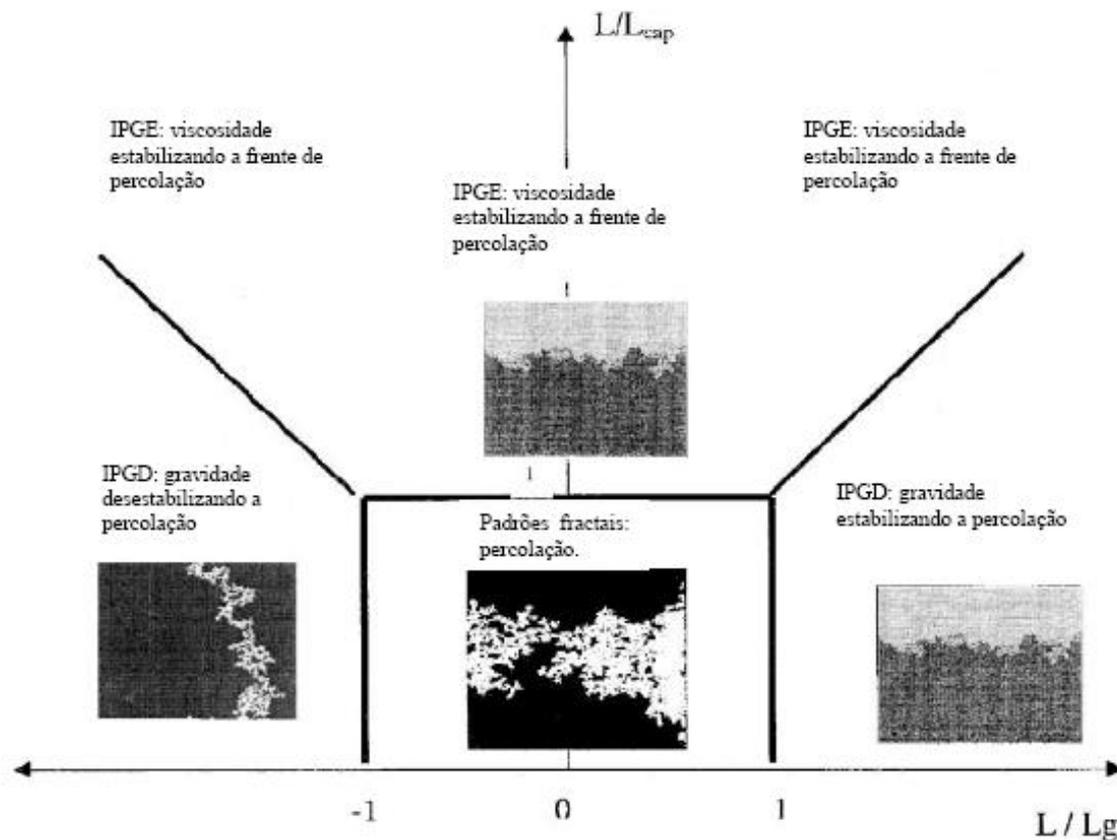


Figura 2 - Diagrama de fase de secagem na ausência dos efeitos dos gradientes térmicos (PLOURD; PRAT, 2003).

Estimativas para L_g e L_{cap} são extraídas de Laurindo et al. (1996).

$$L_{cap} = \frac{\gamma d_p \varepsilon^3}{\mu_l v 180 \sqrt{-\varepsilon}} \quad (2.1)$$

Onde d_p é o diâmetro da partícula do meio poroso e ε é a porosidade do meio. Se e é a densidade média do fluxo de massa evaporada, então, a velocidade de Darcy do líquido pode ser estimada em:

$$v = \frac{e}{\rho_l} \quad (2.2)$$

Sendo ρ_l a densidade do líquido. Se considerarmos que uma camada limite se desenvolve no escoamento externo ao meio poroso e assumindo que esse fluxo seja turbulento, então de acordo com Kays e Crawford (1980) e pode ser calculado da seguinte maneira:

$$e = 0,0359 \rho_g D L^{-0,28} Sc^{\frac{3}{5}} \left(\frac{U_\infty}{\nu} \right) (C_w - C_\infty) \quad (2.3)$$

Sendo ρ_g a densidade do gás, D o coeficiente de difusão, Sc é o número de Schmidt ($Sc = 0,62$ para o ar), U_∞ é a velocidade característica do fluxo externo e C_∞ a umidade específica do fluxo característico externo.

Nesse mesmo contexto, o comprimento característico da gravidade pode ser determinado por:

$$L_g = \frac{\gamma}{d_p g \rho_l} \quad (2.4)$$

Onde g é a aceleração da gravidade.

Uma situação que pode ser notada, em condições normais de secagem, é que à medida que a evaporação vai evoluindo, o fluxo de vapor externo tem uma redução considerável numa etapa inicial. Dessa maneira, o valor de e diminui progressivamente, ao mesmo tempo o valor de C_a aumenta. Portanto, em alguns casos, podemos ter $L_{cap} < L$ no início do processo que provoca uma evaporação inicial caracterizada por uma frente de avanço dominada pela

viscosidade (IPGE) até certo instante onde L_{cap} se torna maior do que L , daí a capilaridade passa a controlar o processo.

2.1.1 Evaporação de gota em meios porosos

A evaporação de gotas é um caso particular dos problemas de secagem em meios porosos.

Para a maioria dos problemas de secagem de gotas L/L_{cap} e L/L_g são muito menores do que

1. Este tópico será novamente abordado no Capítulo 3.

Conforme descrito em Reis et al. (2003), quando uma gota colide numa superfície lisa e não permeável, há um grande aumento de pressão no exato ponto de impacto, transformando a força de momento axial do líquido em escoamento lateral, causando assim, um espalhamento da gota na superfície. No impacto da gota, em superfícies permeáveis, duas situações ocorrem simultaneamente: uma, é a transformação do momento axial do líquido para momento radial causando o espalhamento, e a outra, é a pressão do impacto que força o líquido a entrar no meio poroso, logo, os efeitos capilares passam a dominar o escoamento. Como consequência dessas duas situações, a gota reside no meio poroso num formato similar a uma semi-esfera, no qual a razão de aspecto (razão entre o diâmetro e a profundidade) dependerá das características do meio poroso e do líquido, (Figura 3).

A Figura 4 mostra a imagem de uma gota logo após a absorção. Deve-se notar que a superfície superior da gota está descontínua, ou seja, não está plana como se deveria. Essas irregularidades são causadas pelo distúrbio das esferas de vidro (meio poroso) devido ao impacto da gota, que causa pequenas crateras na superfície porosa.

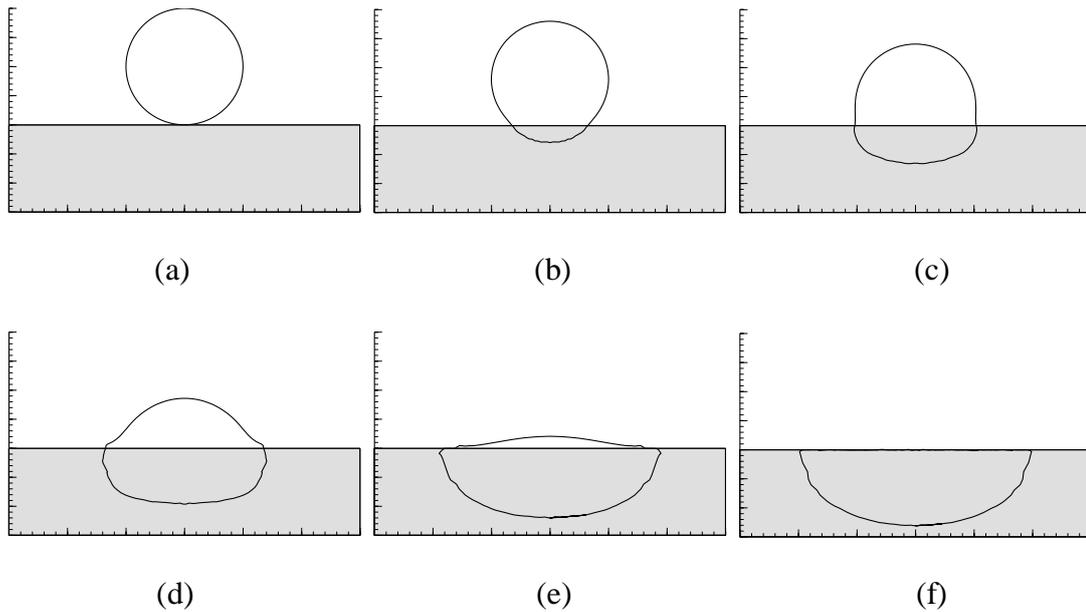


Figura 3 - Evolução temporal do formato de uma gota durante o impacto em um meio poroso (REIS et al., 2000): (a) no momento do impacto, (b) $t = 0,16$ ms, (c) $t = 0,48$ ms, (d) $t = 0,96$ ms, (e) $t = 1,92$ ms e (f) $t = 2,84$ ms.

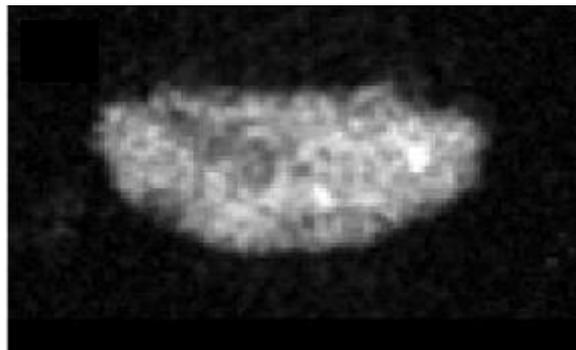


Figura 4 - Imagens de uma gota de líquido absorvida por um meio poroso (gota de água de 1,6 mm de diâmetro em um meio poroso de esferas de vidro de $1200 \mu\text{m}$). Regiões claras indicam a presença de líquido e a superfície plana na parte superior da gota representa a interface meio poroso/atmosfera (REIS et al., 2003).

Nos estágios iniciais da secagem, a taxa de evaporação é maior principalmente numa região localizada nas proximidades da interface entre atmosfera e meio poroso. Durante este período, conhecido como *Constant Rate Period* (CRP), a taxa de evaporação é praticamente constante e depende quase que inteiramente de parâmetros externos ao meio poroso, como propriedades do líquido e velocidade, temperatura e umidade do fluxo de ar. Porém, a evaporação causa uma gradual redução de concentração de líquido na região próxima à superfície, de maneira que a evaporação no interior do meio poroso torna-se cada vez mais importante (Figura 5). Assim, o processo passa a ser dominado pelo mecanismo de transporte no interior do meio poroso e menos dependente das propriedades do fluxo de ar sobre a superfície. Esse estágio é

chamado de *Falling-Rate Period* (FRP). Este mesmo comportamento pode ser observado em outros estudos de secagem em meios porosos, como por exemplo, a Figura 6 mostra a evolução da evaporação de um líquido obtido por uma simulação de Yiotis et al. (2006).

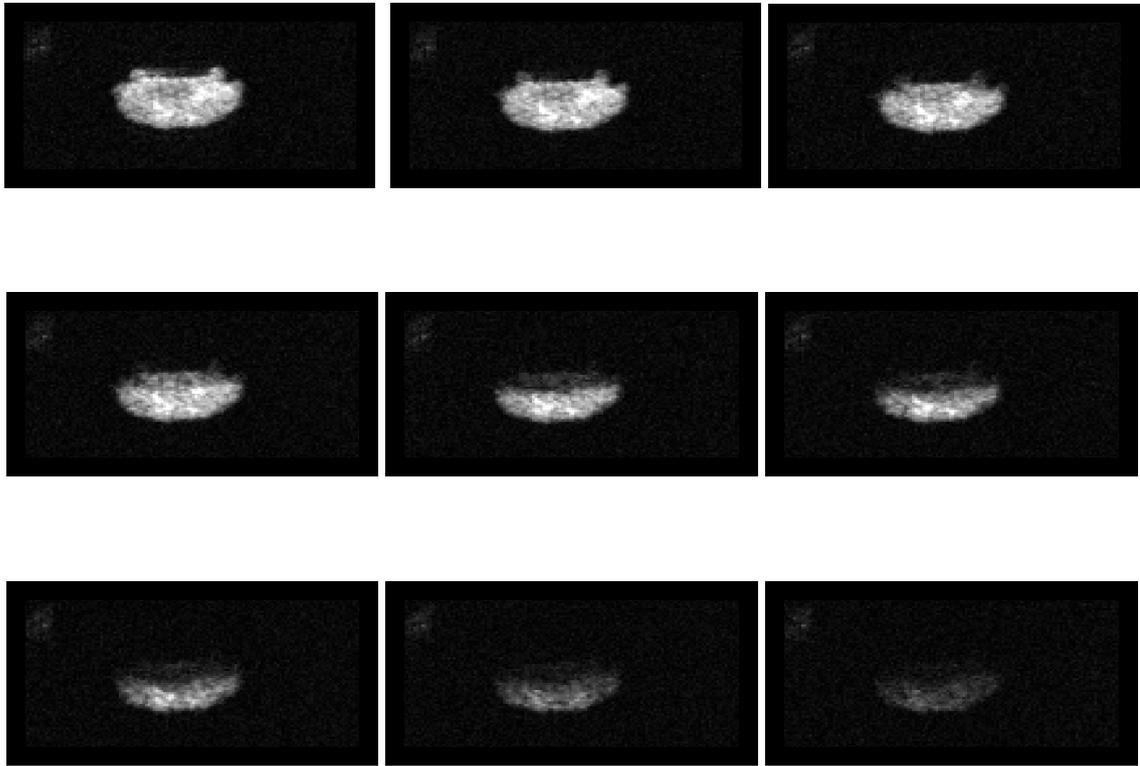


Figura 5 - Imagens de uma gota absorvida num meio poroso (gota de Dietil-malonato de 1,6 mm de diâmetro em um meio poroso composto de esferas de vidro de 120 μm diâmetro). Regiões claras indicam a presença de líquido e a superfície plana na parte superior da gota representa a interface meio poroso/atmosfera, onde o intervalo de tempo entre as figuras é de aproximadamente 12 minutos (REIS et al., 2006).

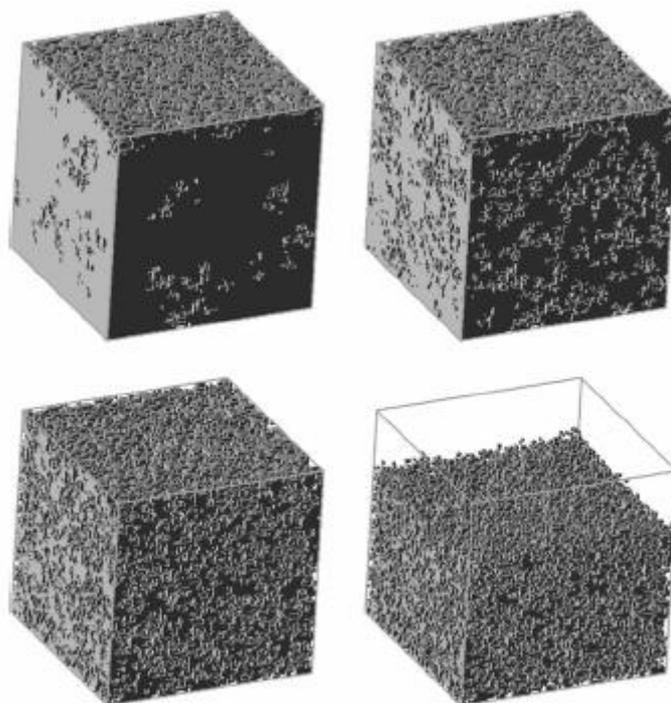


Figura 6 - Evaporação tridimensional nos padrões de 80, 60, 40 e 20 % de saturação de líquido. Os poros cheios de líquido são mostrados na cor cinza. Não há transferência de massa pelas laterais e o fundo. O Vapor escapa pelo topo da matriz porosa. Os efeitos gravitacionais são desconsiderados (YIOTIS et al, 2006).

Os principais processos envolvidos na evaporação de gotas em meios porosos são:

- 1) Processo de absorção da gota no solo.
- 2) Processo de evaporação dominado pela difusão capilar para transporte do líquido e difusão no transporte de vapor.
- 3) Processo de remoção do vapor do meio poroso para a atmosfera.

Os experimentos de Reis et al. (2003) mostram o comportamento da evaporação de gotas de água em meios porosos através de imagens obtidas por ressonância magnética (NMR – *Nuclear Magnetic Resonance*). Foi avaliada a evaporação em quatro meios porosos diferentes, areia com o diâmetro médio de partícula de 180 μ m, esferas de vidro com 50 μ m, 120 μ m e 400 μ m de diâmetro. A gota inicialmente está absorvida pelo meio poroso e então é evaporada num período de algumas horas, sendo que, a superfície é ventilada por um fluxo representando o escoamento na atmosfera.

A Figura 7 mostra a evolução temporal da distribuição de líquido no meio poroso obtida durante a evaporação de uma gota de água a partir de um substrato composto de esferas de

vidro de 120 μm . Como se pode observar, a primeira figura do perfil mostra o instante inicial da evaporação. A maior concentração de líquido está num nível muito próximo a superfície, enquanto, a concentração tende a zero ao se aproximar da profundidade final da gota. Pequenas concentrações estão presentes na região logo acima da superfície nominal. Segundo os autores, isso está relacionado às irregularidades na superfície do meio poroso devido ao impacto da gota. À medida que a secagem prossegue, a evaporação se inicia na superfície da gota, como pode ser visualizado claramente nas primeiras imagens. A mudança de fase ocorre em todo contorno da gota, com isso, a concentração de vapor dentro do meio poroso (região externa da gota) aumenta. Se esse vapor não fosse removido, essa concentração iria aumentar até alcançar os níveis de saturação do vapor limitando assim a mudança de fase. No entanto, próximo à superfície há menos resistência no transporte difusivo do vapor para a atmosfera, portanto, quanto mais distante da superfície menor é a taxa de evaporação local no dado contorno. Isso explica porque nos instantes iniciais há uma maior taxa de evaporação no topo da gota. Nas regiões mais inferiores a concentração de vapor é maior tornando a taxa de evaporação muito baixa.

Em relação ao processo de remoção do vapor do meio poroso para a atmosfera, segundo Roberts e Griffiths (1994), os parâmetros que caracterizam esse processo estão relacionados às condições atmosféricas, tais quais, o fluxo de vento sobre a superfície, a difusão turbulenta e molecular na região da subcamada superficial localizada nos primeiros metros da altura da camada limite planetária (CLP). As condições atmosféricas são caracterizadas pela velocidade de fricção, u_* , pelas condições de estabilidade e rugosidade superficial e tem influência direta na velocidade de transporte do vapor para a atmosfera, v_r . Quanto maior é essa velocidade, evidentemente, maior será a remoção de vapor e mais rápido será o processo de secagem. O equacionamento e maiores detalhes desse processo de remoção serão tratados na Seção 3.2 do próximo capítulo.

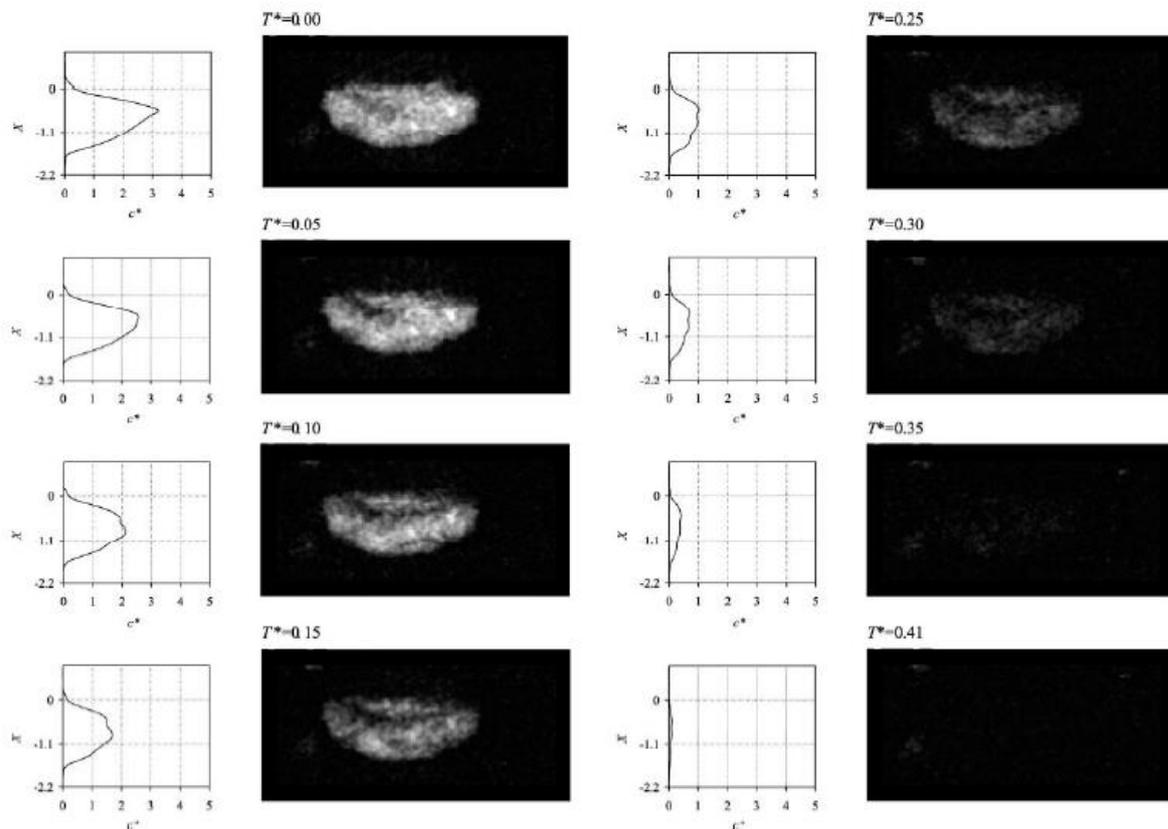


Figura 7 - Evolução temporal dos perfis de concentração de água e imagens do formato de uma gota de água dentro do meio poroso com partículas de esfera de vidro de $120\mu\text{m}$ de diâmetro (REIS et al., 2003). O eixo X representa a profundidade da gota em milímetros e o eixo c^* é a concentração adimensional de líquido.

2.2 MODELOS DE EVAPORAÇÃO EM MEIOS POROSOS

O desenvolvimento de modelos de secagem em meios porosos tem sido assunto de vários estudos, uma vez que são inúmeras e variadas as motivações, devido ao fato de existir uma grande variedade de aplicações onde a secagem pode ser considerada em diferentes escalas. Para cada caso, o modelo proposto numa dada escala deve ter resultados coerentes com um modelo de menor escala, mostrando então, uma boa representatividade do meio. Evidentemente, para aplicações em situações de grande escala, o emprego de modelos de escalas menores poderia aumentar significativamente o custo computacional. Em contra partida, em problemas de pequenas escalas, os modelos de escalas maiores talvez não representem de forma aceitável as características do processo.

Os modelos de secagem estão divididos em duas abordagens principais. Os modelos macroscópicos, que se baseiam na hipótese de que o meio seria contínuo, e modelos microscópicos que caracteriza o meio diretamente na escala do poro.

Os modelos baseados no tratamento macroscópico consideram o meio poroso como um meio contínuo, ou seja, trata o meio poroso como a média de um volume (*volume average*). Consideram que a matriz é composta por duas fases, fase- α (sólida) e fase- β (fluido) aleatoriamente (Figura 8). A matriz porosa é dividida por vários volumes representativos que contem ambas as fases. A quantidade de fase líquida está relacionada à porosidade do meio poroso. Em cada volume, a fase líquida corresponde à relação entre a porosidade e o próprio volume. A evaporação é calculada baseada em quantidades médias de líquido contido nos volumes e nas características do meio poroso.

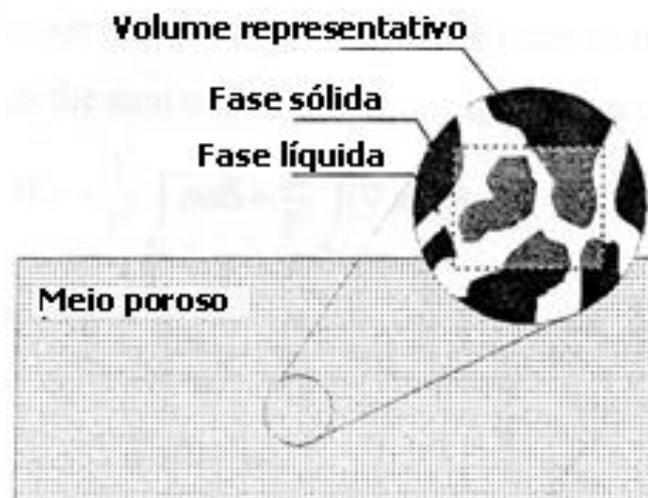


Figura 8 - Representação esquemática da média do volume (REIS, 2000).

O modelo de escala de poros se baseia numa representação matricial da estrutura do meio poroso. O modelo distingue a microestrutura de um meio poroso em poros e suas ligações (Figura 9). Uma estrutura irregular é obtida ao interligar cada poro com seus vizinhos (Figura 9 (b)). Por fim, considera-se uma matriz tendo a mesma coordenação principal com a estrutura irregular (Figura 9 (c)). Isso é justificável, pois algumas propriedades essenciais são independentes da coordenação dos poros (na linguagem física, se diz que as várias matrizes obtidas para as varias coordenações principais pertencem à mesma classe universal).

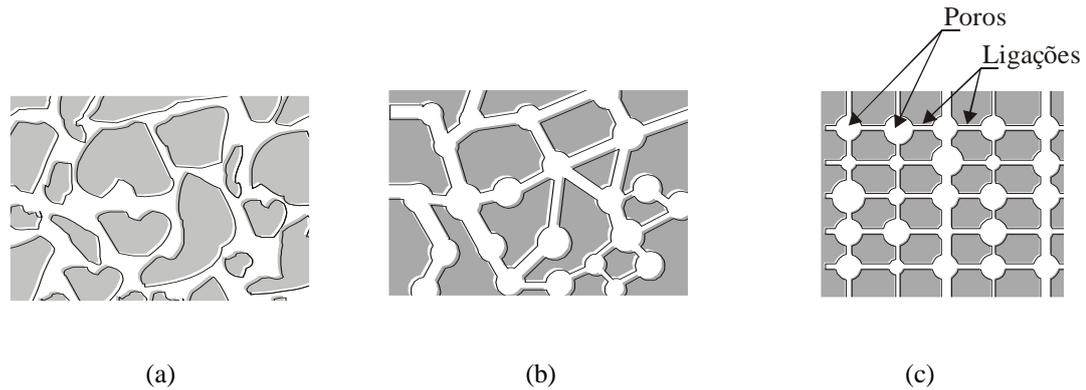


Figura 9 - Representação esquemática da (a) microestrutura de um meio poroso, (b) representação da microestrutura como uma série de poros e ligações e (c) representação de uma matriz composta por poros e ligações usualmente utilizada em modelos de escala de poros.

2.2.1 Revisão dos estudos em modelos de evaporação de gotas em meios porosos

Roberts e Griffiths (1994) relatam que a maioria dos modelos, existentes no passado, que simulavam a evaporação de gotas quimicamente perigosas no solo se preocupavam com terrenos cobertos por vegetação ou terreno sem porosidade e descrevem o processo de evaporação de duas maneiras principais: (i) aproximação empírica, que não se modela diretamente o processo físico que ocorre, e sim com as relações empíricas de dados experimentais obtidos por uma gama de situações aplicáveis, como exemplo, a expressão empírica de Chinn (1981) e para uma superfície não-porosa e o modelo empírico de Pasquill (1943); (ii) aproximação teórica, a qual o processo físico é descrito por uma série de equações onde os parâmetros das equações são estimados usando uma combinação de argumentos teóricos e dados experimentais, como o modelo teórico de Baines e Douglas (1994) para uma superfície não-porosa e o modelo teórico de Monaghan e McPherson (1971) para superfície gramada.

Até os anos 80, não havia significantes tentativas de se modelar a evaporação de líquidos perigosos em areias sem contar que era difícil de aplicar relações empíricas baseados em experimentos, que eram limitados. Por exemplo, Pasquill (1943) reporta que a taxa de evaporação em superfície gramada era 2,5 vezes maior do que em areia. Isso daria uma idéia da diferença de comportamento de evaporação que ocorre para diferentes tipos de superfícies .

No início dos anos 80 notou-se que a modelagem matemática da evaporação de gotas em superfícies diferentes era dificultada pela falta de dados experimentais. Então Cooper et al. (1983, 1986, 1990) iniciaram um extensivo programa experimental para investigar a evaporação de gotas em inúmeras superfícies sobre condições controladas em túnel de vento. Além das taxas de evaporação, também foi medido e relacionado o diâmetro das gotas com o diâmetro da poça na superfície, relação chamada de *Spread Factor*. Fisicamente variou-se a velocidade do vento, viscosidade do líquido, umidade, temperatura e tamanho das partículas do meio poroso. Os resultados indicaram que os parâmetros mais significantes na evaporação foram: Temperatura, diâmetro da gota e velocidade do vento.

Griffiths (1991) desenvolveu um simples modelo (teoria de avanço de uma frente de evaporação) baseado na descrição física do processo de evaporação onde considerou o formato inicial cilíndrico para a gota. Nesse modelo, é assumido que o líquido após o impacto é absorvido pelo meio poroso e permanece em repouso próximo a superfície livre. A medida que a evaporação vai progredindo o líquido da superfície superior da gota vai descendo para o interior do meio poroso enquanto o líquido restante da gota mantém sua posição original. O transporte do vapor da superfície líquida até a atmosfera passa por duas resistências em série. A primeira resistência é o transporte por difusão molecular do vapor através da areia até a superfície. A segunda é o transporte por difusão molecular do vapor através da subcamada laminar da superfície. A figura 10 uma representação esquemática deste modelo. Os resultados foram comparados com os experimentos de Cooper (1990) e apresentaram boa concordância durante as primeiras horas de evaporação.

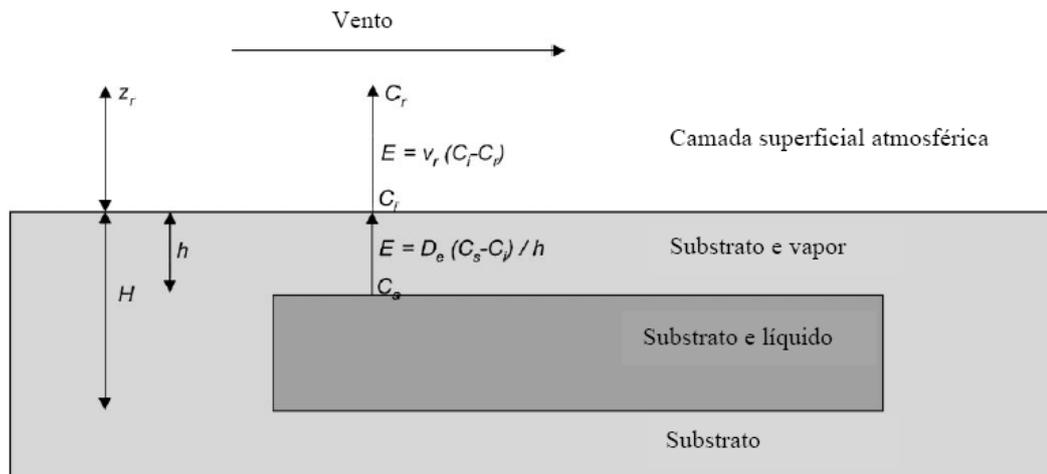


Figura 10 - Representação esquemática de uma evaporação de gota durante o período de secagem (ROBERTS; GRIFFITHS, 1999).

A abordagem do avanço de uma frente de evaporação foi questionada por alguns autores pelo fato de não considerar o movimento do líquido no interior do meio poroso. Propôs-se então, a utilização de modelos que incluam, além da difusão de vapor, o movimento de difusão do líquido dentro do meio poroso. Westin et al. (1998), realizou um estudo utilizando essa abordagem com um modelo macroscópico. Esse estudo propôs um processo de evaporação em meios porosos dividindo-se em três etapas: (i) Modelar o imediato alargamento da gota devido ao momento do impacto onde é usado uma correlação empírica; (ii) promover o alargamento causado por capilaridade expandindo a superfície e modelando a absorção em três dimensões; (iii) promover a secagem e redistribuição do líquido que são descritas em um processo unidimensional (vertical). O modelo calculou a evaporação do líquido metil salicilato com raio da gota de $136 \mu\text{m}$.

Observa-se que os resultados do modelo foram concordantes em bastante acordo com os dados experimentais, mostrando assim, grande potencialidade na predição de evaporação do modelo proposto apesar de não ser analisado uma gama maior de situações com outros tipos de líquido e outros meios porosos.

Todavia, o problema de evaporação de gotas em meios porosos exibe características que dificultam a utilização de modelos baseados na hipótese de um meio contínuo. Isso pode se verificar através do estudo envolvendo técnicas de imagens obtidas por ressonância magnética

para mostrar o comportamento de uma gota d'água evaporando em meios porosos apresentado por Reis et al. (2003). Os modelos macroscópicos têm dificuldades em representar a gota. O fato da gota ter dimensões pequenas implica em um número muito baixo de poros preenchidos por líquido, o que torna difícil dividi-la em volumes capazes de representar, devidamente, as características média do meio.

Por descrever o processo na escala do poro, os modelos microscópicos, oferecem um melhor entendimento da física envolvida em toda secagem. Assim, como descrito por Yiotis et al. (2005), a evaporação é um processo de fluxo de duas fases, que envolve vários mecanismos na escala do poro, por exemplo o movimento devido a capilaridade da interface líquido/gás contida em cada ligação entre poros, o transporte por difusão do gás saindo de cada poro com líquido e passando através de cada poro vazio, o transporte por difusão do líquido através de cada poro cheio, o fluxo viscoso presente em ambas as fases, capilaridade e fluxo de líquido através dos filmes remanescentes nos cantos e paredes das ligações. Todos esses mecanismos devem ser explicados na escala de poro.

Esses fatores levam ao entendimento de que os modelos de escala de poros têm maior precisão para o cálculo da evaporação de gotas.

2.2.2 Revisão dos estudos precedentes baseados nos modelos de escala de poros

O primeiro trabalho apresentado na literatura envolvendo o uso de modelo de escala de poros para uma situação de evaporação em meios porosos foi o trabalho de Prat (1993), que propôs um modelo de secagem em meios porosos baseado numa forma modificada da teoria de percolação. A proposta desse estudo foi de apresentar um modelo de secagem em meios porosos que permite simular o processo de evaporação ao nível do poro, diferentemente dos, até então, modelos tradicionais que se baseiam numa abordagem onde o meio poroso é contínuo. O meio poroso é representado por uma matriz quadrada e bidimensional, de poros com tamanhos variados e conectados por gargantas também com tamanhos variados. A matriz considerada é de 50 x 50, tendo assim, 5000 gargantas na simulação. Inicialmente os poros estão totalmente cheios de líquidos. A evaporação ocorre, nos primeiros momentos, apenas

pelo lado aberto, que é o lado superior, pois os demais são considerados isolados. Ao modelo são adicionados os efeitos de capilaridade, gravidade, evaporação microscópica da interface gás/líquido e a difusão do vapor na fase gás. Os resultados das simulações comparados com dados experimentais mostram que o modelo representa bem as características essenciais de evaporação.

Mais recentemente diversos trabalhos têm sido apresentados na literatura empregando esta técnica, proposta inicialmente por Prat (2003), para simular a evaporação de líquidos em meios porosos. Laurindo e Prat (1996) fizeram comparações com dados experimentais utilizando este modelo. Eles simularam três casos em condições bidimensionais e isotérmicas. Um caso na ausência de efeitos gravitacionais (Figura 11 (a)), um caso com um campo gravitacional estável (Figura 11 (b)) e outro com o campo gravitacional instável (Figura 11 (c)).

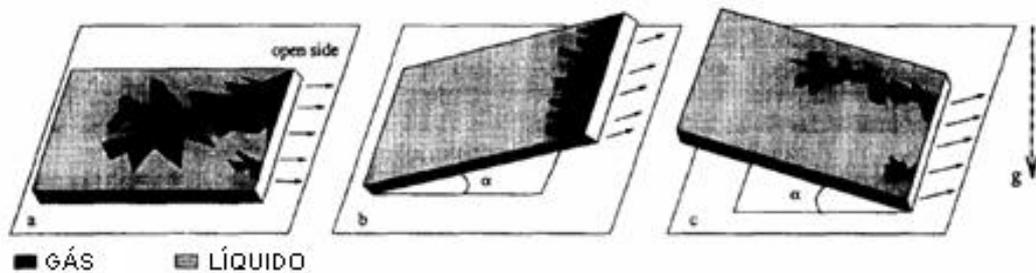


Figura 11 - Esquemático das configurações para os três casos.

A matriz porosa é formada por um quadrado de 140 x 140, totalizando assim, 39000 dutos que fazem a ligação entre os poros. O líquido utilizado é o hexano. O vapor escapa apenas pela superfície superior enquanto as demais laterais são isoladas. Segundo os autores, os resultados obtidos nas simulações para os três casos concordaram satisfatoriamente com os dados experimentais apenas quanto às distribuições de líquido durante o processo de secagem. Mas, atentaram para as limitações dos casos simulados, abrindo questionamentos para situações tridimensionais envolvendo transferência de calor e considerando efeitos viscosos.

Laurindo e Prat (1998) apresentaram comparações entre experimentos e simulações bidimensionais baseadas nos três casos apresentados em seu trabalho anterior em Laurindo e Prat (1996). No presente estudo o foco está em avaliar a precisão do modelo com relação à taxa de evaporação. Enquanto um ótimo resultado na comparação com dados experimentais

foi encontrado para a distribuição de fase, as taxas de evaporação foram apenas determinados qualitativamente de acordo com os experimentos. Os resultados das taxas de evaporação das simulações foram sistematicamente menores do que as taxas medidas nos experimentos. O autor atribui este comportamento ao fato de existir um fluxo de uma fina camada de líquido (filme de líquido) na parede e quinas dos dutos de ligação (Figura 12). Esse fluxo é gerado devido a efeitos capilares secundários, pois após a invasão de vapor num duto há esse fluxo que se origina na interface líquido/gás. Isso leva a uma baixa resistência no transporte interno se comparado com apenas a difusão de vapor, logo, o transporte é mais acelerado levando a um aumento na taxa de evaporação.

Lê Bray e Prat (1999), desenvolveram um modelo para simular secagem numa matriz tridimensional de 51 x 51 x 51. Os resultados não foram comparados com dados experimentais, mas produziram informações detalhadas em vários aspectos da secagem, como distribuição de fase e taxa de evaporação. Os resultados são essencialmente qualitativos e restritos a apenas efeitos capilares, negligenciando efeitos viscosos e gravitacionais. O modelo teve boa precisão quanto aos padrões de secagem, capturando as características das invasões devido a percolação seguido do surgimento de clusters isolados que são características de secagem dominadas por forças capilares.

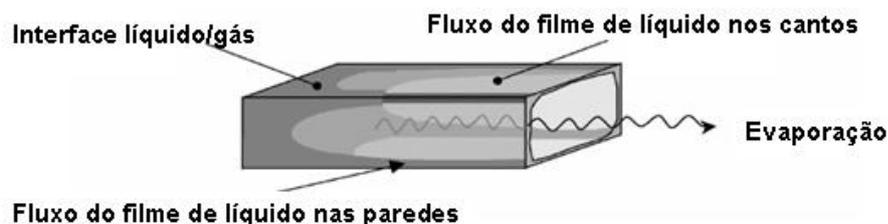


Figura 12 - Representação esquemática do filme de líquido nos cantos e ao longo das paredes de uma ligação entre dois poros, sendo que, a ligação acabou de ser invadida pelo gás (PRAT, 2002).

Em 2002, Prat (2002) faz uma revisão geral sobre as principais evoluções sobre o assunto. Ele ressalta que os resultados obtidos por Laurindo e Prat (1998) demonstram preocupação na modelagem da evaporação, pois como sugere Prat (2002), numa visão prática, prever a taxa de evaporação é certamente o objetivo mais importante dos modelos de secagem. Ele explica essa divergência do valor da taxa de evaporação devido a não incorporação, nas simulações, da existência do fluxo do filme de líquido.

Yiotis et al. (2005) apresentaram resultados de um modelo 2D em condições isotérmicas de secagem incluindo no mecanismo de transporte advecção e difusão para a fase de gás, fluxos devido a viscosidade para as fases de líquido e gás e efeitos capilares para as faces líquido/gás nas ligações dos poros. O principal objetivo desse estudo era avaliar os efeitos dos fluxos dos filmes de líquido durante a secagem. Um modelo matemático foi desenvolvido para quantificar o fluxo viscoso tanto nos filmes de líquido quanto em toda fase líquida. Como conclusão, observou-se que os fluxos dos filmes são um grande mecanismo de transporte e seus efeitos são dominantes quando o processo de secagem é caracterizado pelo domínio dos efeitos capilares.

Moreira e Rajagopal (2006) apresentam resultados de simulações utilizando uma matriz porosa tridimensional correlacionando os tamanhos dos poros e das ligações e as dimensões da matriz para se verificar a influência desses parâmetros no processo de secagem de um n-hexano num meio poroso puramente dominado pelos efeitos capilares. Os parâmetros de evaporação obtidos foram os mesmos em todos os casos. Inicialmente os poros da superfície são evaporados seguidos pelo surgimento dos *capillary fingers* que causam o aparecimento de *clusters* desconectados. Na etapa final, a evaporação ocorre de maneira mais homogênea até a secagem total do líquido. Como conclusão, os autores observaram que independentemente da correlação entre os tamanhos dos poros e ligações e do tamanho da matriz, os padrões de secagem foram globalmente os mesmos.

Yiotis et al. (2006) estudaram os regimes característicos de secagem, o CRP e FRP. O modelo simulou a evaporação de líquido numa matriz 3D considerando efeitos capilares na interface líquido/gás. O trabalho teve como foco, avaliar a influência dos efeitos da transferência de massa por difusão numa matriz exposta a um fluxo de ar na superfície e efeitos gravitacionais na variação da taxa de evaporação. Como principal conclusão, o estudo demonstrou que quando há um escoamento de ar na superfície do meio poroso o regime CRP torna-se mais longo. Este fato está associado a um mecanismo de transporte que mantém a superfície ainda conectada por líquido mesmo após a frente de evaporação ter avançado para dentro da matriz porosa. Enquanto esse mecanismo existe, a taxa de evaporação permanece constante. Os

autores sugerem que este mecanismo seja consequência do fluxo viscoso através do *cluster* principal ou do fluxo dos filmes de líquido presentes na parede das ligações.

Em 2007, Yiotis et al. (2007) realizaram o mesmo estudo apresentado em Yiotis (2006), mas neste caso foram incorporados no mecanismo de transporte de massa os fluxos de líquido. Os resultados mostram que o mecanismo de transporte que mantém a superfície com saturação de líquido devido à conectividade existente com a frente de evaporação, mencionado no trabalho anterior em 2006 são caracterizados pelos filmes de líquido. Os autores concluem que a transição da CRP para FRP ocorre quando os filmes de líquido ligados à superfície se tornam tão finos que não são mais capazes de manter um fluxo de massa através da superfície do meio poroso.

Prat (2007) realizou um estudo sobre a influência do formato do poro, ângulo de contato e do filme de líquido na secagem em meios porosos. Ele cita que quando os poros e suas ligações têm seções poligonais, ou seja, possuem quinas, o fluxo de filme de líquido nesses locais é maior, e com isso, a evaporação é muito mais rápida se comparado com seções circulares. A figura 13, mostra o resultado da comparação de duas simulações, uma considerando a existência dos filmes e a outra não, com dados experimentais. Como pode ser observado, ao considerar a influencia do filme no transporte os resultados são muito mais próximos aos dados experimentais, mostrando assim, a importância desse fenômeno no processo de secagem. Porém, sua aplicabilidade torna muito difícil de prever quantitativamente a taxa de evaporação, pois o processo passa a depender de pequenos detalhes da geometria do poro e é afetado por possíveis mudanças nas condições do líquido no local. Isso explica porque prever a taxa de evaporação ainda é uma questão aberta e com um campo de informações muito grande para se desenvolver.

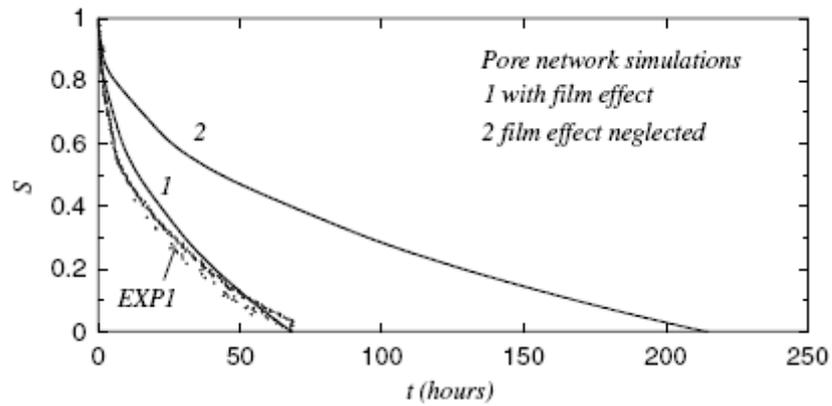


Figura 13 - Curvas de secagem dos experimentos e simulações. S é a saturação do líquido e t o tempo em horas. (PRAT, 2007).

Esta revisão demonstra a potencialidade do uso de modelos de escala de poros para a simulação de problemas de evaporação. O próximo capítulo descreve a metodologia empregada na implementação do modelo para um problema de evaporação de gotas em meios porosos.

3 METODOLOGIA

Neste capítulo, a metodologia utilizada no estudo é apresentada em 5 seções. Primeiramente, a Seção 3.1, descreve em detalhes o modelo de escala de poros mostrando todo equacionamento matemático sobre a taxa de evaporação do líquido, o transporte de gás dentro do meio poroso, sua remoção para a atmosfera e os valores de L/L_g e L/L_{cap} mostrando que são menores do que 1, justificando porque o modelo negligencia a influencia dos efeitos viscosos e gravitacionais. A Seção 3.2, relata sobre a representação da matriz porosa, caracterizada pela configuração de suas partículas e lacunas, e as considerações incluídas no modelo para identificar a geometria inicial da gota. A rotina implementada no algoritmo numérico desenvolvido esta descrita na Seção 3.3, Os dados experimentais realizados nos trabalhos de Reis et al. (2003) e Reis et al. (2006), que serão fonte de comparação para a avaliação da precisão do modelo, estão descritos na Seção 3.4. finalmente, a Seção 3.5 mostram toda parametrização adotada para adimensionalizar as principais variáveis do problema.

3.1 MODELO DE ESCALA DE POROS

Conforme descrito na seção 2.2.2, o modelo de escala de poros representa o meio poroso através de uma matriz. A região vazia entre as partículas do meio poroso é representada por uma matriz formada por poros conectados por ligações cilíndricas. Os poros atuam como reservatório para armazenar líquido ou gás. As ligações agem como condutores do fluxo e atuam como barreiras capilares, mas seu volume pode ser desprezado nos cálculos. Assim, quando a interface líquido/gás se encontra na entrada da ligação adjacente a um poro vazio, uma diferença de pressão interfacial é criada entre os dois poros, que é igual à pressão capilar entre os poros:

$$P_c = 2\gamma / r \quad (3.1)$$

γ é o coeficiente de tensão superficial e r é o raio das ligações. Dentre as interfaces das ligações de um poro que está sendo evaporado, a que apresentar menor pressão capilar calculada pela Equação (3.1) retrocederá imediatamente fazendo com que o gás penetre no poro.

A Figura 14 mostra uma representação esquemática da evolução da secagem de dois poros. Como se pode observar, inicialmente os dois poros estão cheios (Figura 14 (a)), das interfaces líquido/gás dos poros, a que possuir menor barreira capilar é então invadida pelo gás (Figura 14 (b)). Na etapa seguinte, o mesmo procedimento ocorre com o outro poro (Figura 14 (c) e (d)).

Esta abordagem é uma analogia ao fenômeno de percolação, que representa o escoamento de dois fluidos imiscíveis no interior de um meio poroso. Neste caso, os fluidos são o líquido e o gás. No fenômeno de percolação, um fluido (gás, por exemplo) penetra na matriz porosa deslocando o outro fluido (líquido). A cada passo de tempo o gás penetra apenas na ligação que está associada a menor barreira capilar, a qual tem o maior diâmetro. Desta forma, o poro adjacente a uma ligação que possui a menor barreira devida à pressão capilar será invadido por gás. Esse processo resulta no surgimento de regiões de líquido completamente cercados por regiões secas.

Obviamente o conceito de percolação aplicado à evaporação de líquidos em meios porosos é apenas uma analogia. De fato, o gás não está invadindo os poros, e sim, sendo gerado neles. Durante o fenômeno de evaporação existe geração de vapor ou mudança de fase ao longo de toda a interface líquido/gás, reduzindo a quantidade de líquido em toda a região saturada. Todavia, a existência de poros com ligações de diferentes diâmetros gera diferentes pressões capilares (Equação 3.1) ao longo da região saturada. Desta forma, estes gradientes de pressão geram redistribuição de líquido, movendo-se dos poros de maior pressão capilar (maior diâmetro de ligação) para os poros de menor pressão capilar (menor diâmetro de ligação). Este comportamento faz com que poros com maiores ligações esvaziem primeiro, em uma clara analogia ao fenômeno de percolação.

Baseado na teoria de percolação, durante o processo de secagem dominado por efeitos capilares, regiões de líquido podem ficar cercadas por regiões secas. A evaporação do líquido faz com que uma frente de secagem penetre na região líquida conforme a penetração por percolação, gerando os *capillary fingers* deixando para trás regiões de líquido desconectadas, ou *clusters*, com variação de tamanho continuamente. Esses são os chamados clusters. Pode-se dizer que no instante inicial, quando a matriz porosa esta completamente cheia de líquido, existe um único cluster, também chamado de cluster principal ou cluster contínuo (CC). À medida que a secagem vai ocorrendo há um surgimento de vários clusters desconectados (CD) a partir desse cluster principal (Figura 15).

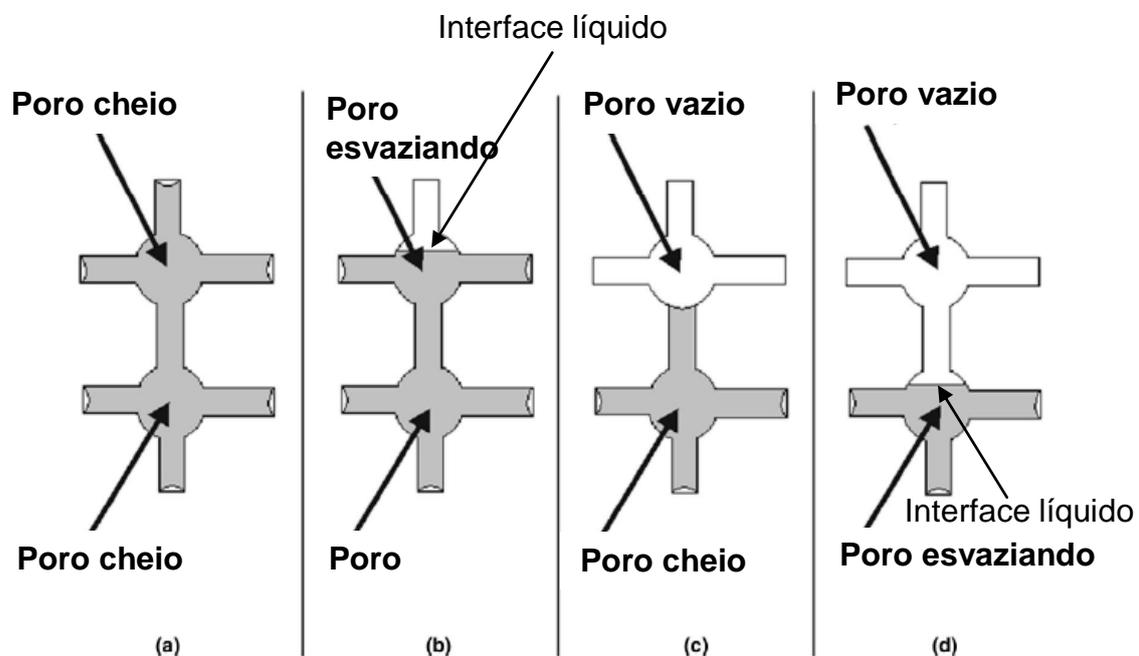


Figura 14.- Evolução da evaporação de dois poros cheios de líquido. (a) Inicialmente os poros estão completamente cheios. (b) Quando a diferença de pressão da garganta superior excede sua resistência capilar, a interface retrocede e o poro é penetrado pela fase gasosa. A mesma transição ocorre em (c) e (d) (YIOTIS et al., 2001).

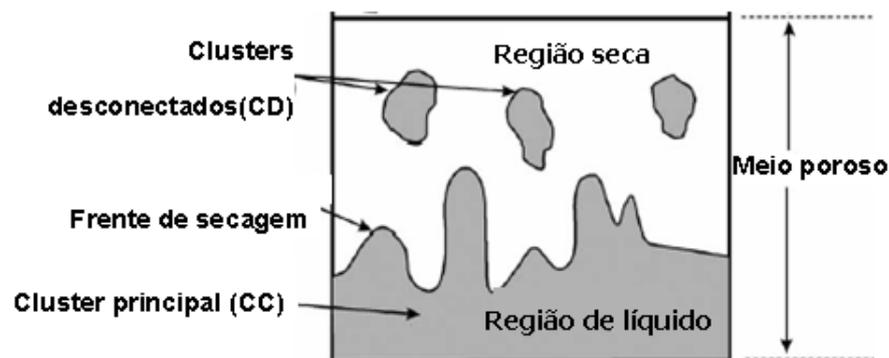


Figura 15 - Representação esquemática da evaporação da matriz porosa e a formação dos clusters (YIOTIS, 2006).

Durante a evaporação distingui-se a matriz em cinco diferentes tipos de poros (Figura 16): o tipo (0) é vazio com todas as ligações vazias, o tipo (1), é o poro vazio, mas pelo menos uma ligação ainda não foi invadida, o tipo (2) é o poro parcialmente cheio, tipo (3) é o poro cheio com as ligações cheias e por ultimo o tipo (4) onde o poro é cheio com pelo menos um poro vizinho vazio.

Na simulação desse estudo, os raios dos poros e das gargantas foram distribuídos randomicamente variando conforme as características do meio poroso em estudo. A distância de centro a centro dos poros esta relacionada ao comprimento da ligação que é definida conforme condições iniciais. A seção 3.4.1 detalha essa variação dos diâmetros dos poros e ligações, e, o comprimento da ligação para cada tipo de meio poroso.

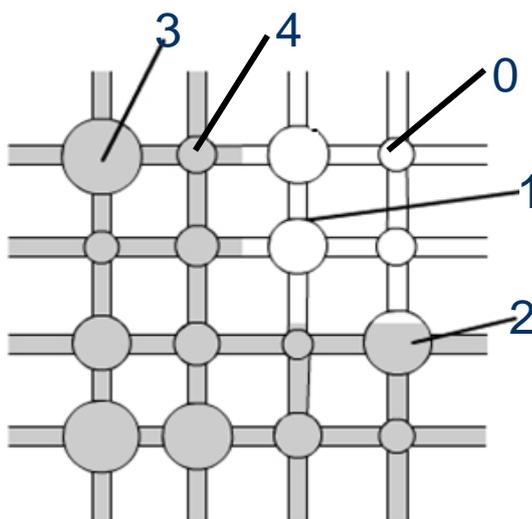


Figura 16 - Representação esquemática dos tipos de poros.

3.1.1 Taxa de evaporação

Conforme citado anteriormente, apesar da clara analogia com a percolação, o fenômeno de evaporação apresenta uma diferença significativa: o gás é gerado no interior da matriz porosa. Assim, para determinar o padrão de escoamento é necessário prever a taxa de mudança de fase líquido/vapor no interior do meio poroso. Essa taxa de evaporação é determinada pela transferência de massa na fase gasosa, e é governada por difusão e pode ser expressa por:

$$F_{ij} = D\pi r_{ij}^2 \frac{C_i - C_j}{l} \quad (3.2)$$

onde F_{ij} é o fluxo, de evaporação através da ligação que conecta os poros i e j , D é o coeficiente de difusão do componente de vapor/líquido na fase de gás, r_{ij} é o raio da ligação entre os poro i e j , C_i é a concentração de líquido no poro (4) ou (2) e C_j é a concentração do poro adjacente que deve ser do tipo(1) (Figura 16).

3.1.2 Transporte de vapor dentro da matriz porosa

Nos poros vazios dentro da matriz porosa (poros do tipo (0) e (1)), há somente transporte de gás. Assim, a concentração de vapor em todo o meio poroso é calculada com base no balanço de massa em cada poro descrito pela equação de conservação de massa de uma espécie, que na ausência de fluxos convectivos, pode ser escrita como:

$$V_i \frac{\Delta C_i}{\Delta t} = \sum_j \left[D\pi r_{ij}^2 \frac{C_i - C_j}{l} \right] \quad (3.3)$$

Onde V_i é o volume do poro i , ΔC_i é a variação de C_i no tempo e l é a distância de centro a centro dos poros.

A equação governante (Equação. 3.3) é resolvida para todos os poros vazios presentes no meio poroso, cujas condições de contorno são (YIOTIS et al., 2001):

- a) A concentração C nas regiões ocupadas por líquido é considerada como sendo a concentração de saturação do vapor na fase gasosa, isto é, poros cheios do tipo (4) e (3) ou parcialmente cheios do tipo (2) são considerados como saturados de vapor e tem o valor da concentração igual ao valor da concentração de saturação.

- b) Para os poros localizados na superfície do meio poroso, que estão expostos à atmosfera, o cálculo do balanço de massa é acrescentado por um termo sumidouro. Esse termo representa o transporte de vapor para o meio externo através da equação do fluxo externo (em maiores detalhes na Seção 3.1.3). Em outras palavras, o balanço de massa num dado poro da superfície tem fluxos de vapor entrando ou saindo de seu volume, vindos de todos os poros adjacentes, exceto na vizinhança superior, que representa a atmosfera, onde há sempre um fluxo que é determinado com base nas características da atmosfera, (Figura 17).

O sistema linear de equações gerado é resolvido com o método SOR (*Successive Over-Relaxation*) baseado no método de Gauss-Seidel (RUGGIERO; LOPES, 1996).

3.1.3 Remoção de vapor da superfície da matriz porosa para a atmosfera

O transporte do gás da superfície do meio poroso 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 da 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:

$$E_e = v_r \pi r_{ij}^2 (C_i - C_r) \quad (3.4)$$

Onde v_r é a velocidade externa do gás, também chamada de velocidade característica do transporte de vapor, C_i é a concentração do gás (vapor do líquido) na interface substrato/atmosfera e C_r é a concentração do gás na altura de referência acima da superfície Z_r usualmente, considerada como igual a zero. Esse fluxo, E_e , é calculado somente para os

poros da superfície do meio poroso. A velocidade externa do gás depende das condições atmosféricas, rugosidade da superfície e da altura de referência, e é parametrizada via

$$v_r = \frac{k u_*}{\left[\ln \left(\frac{Z_r}{Z_{Ov}} \right) - \psi_v \left(\frac{Z_r}{L_m} \right) + \psi_v \left(\frac{Z_{Ov}}{L_m} \right) \right]} \quad (3.5)$$

Onde k é a constante de Von Karman, u_* é a velocidade de fricção, Z_{Ov} é o comprimento de rugosidade, L_m é o comprimento de Monin-Obukhov e ψ_v é a função do perfil do gás na atmosfera que é, por sua vez, uma função da estabilidade atmosférica. Neste trabalho, os valores de v_r são estabelecidos de maneira a repetir as condições experimentais.

A Figura 17 mostra um esquemático representando as aplicações das equações que governam o transporte de vapor.

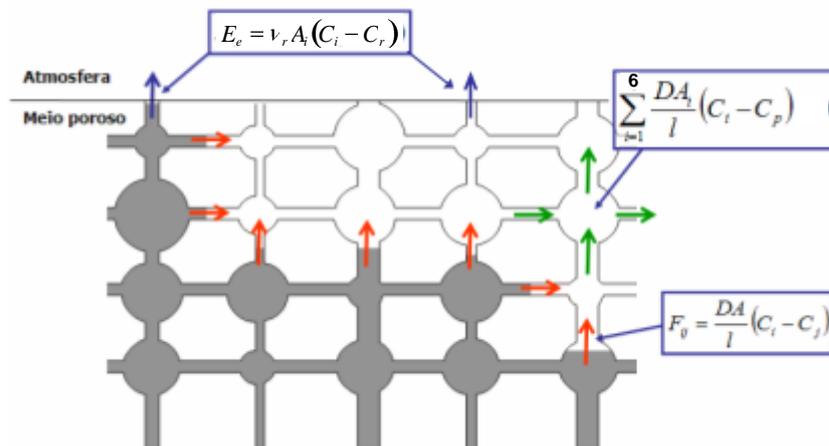


Figura 17 - Esquemático representando as equações aplicadas aos fluxos de evaporação de líquido, ao balanço do transporte de vapor nos poros vazios e ao fluxo de vapor para a atmosfera.

3.1.4 Influência dos efeitos viscosos e gravitacionais

Como discutido no Capítulo 2, a evaporação de líquidos em meios poros é dominada não só pelos efeitos capilares, mas também pelos gravitacionais e viscosos. Em geral, para os casos

de secagem de gotas, esses efeitos não têm grande influência no processo em relação aos efeitos capilares. Para se determinar as hipóteses sobre quais efeitos dominam o problema em estudo, esta seção apresenta os valores de L_g e L_{cap} referentes às simulações efetuadas no presente estudo. As configurações simuladas representam dados experimentais obtidos por Reis et al. (2003) e Reis et al. (2006), que representam a secagem de água nas configurações de meio poroso com partículas de diâmetros de $120\mu\text{m}$ e $400\mu\text{m}$ (Caso 1 e 2) e dietil malonato na matriz porosa com partículas com diâmetros de $120\mu\text{m}$ (Caso 3 e 4). Os demais detalhes das configurações dos casos simulados estão descritos no Capítulo 4.

Com base nas expressões 2.1 e 2.4, é possível determinar os valores de L/L_{cap} e L/L_g . O comprimento característico nestas simulações é o diâmetro aproximado das gotas dos dados experimentais equivalente a ($L \approx 0,004m$). Os resultados calculados são mostrados na Tabela 1 e os valores das constantes e propriedades físicas dos líquidos utilizadas para os cálculos estão na Tabela 2. Pode-se observar que tanto para os casos de água quanto para os de Dietil Malonato, que L_{cap} é muito maior do que o valor de L . Os valores encontrados para L_g em todos os casos são de 3 a 12 vezes maiores do que L , o que sugere que a influencia dos efeitos gravitacionais seja insignificante neste problema. Por não incorporar tais efeitos, não é necessário se calcular a pressão no interior do líquido, dessa forma, a implementação do modelo, conforme descrita nessa seção, se equivale a implementação feita por Prat (1993) em seu modelo.

TABELA 1 - VALOR DE L_{cap} E L_g PARA OS QUATRO CASOS SIMULADOS. ÁGUA NUM MEIO POROSO DE ESFERAS DE VIDRO DE $400\mu\text{m}$ DE DIÂMETRO COM v_r IGUAL A 0.0079 M/S (CASO 1), ÁGUA NUM MEIO POROSO DE ESFERAS DE VIDRO DE $120\mu\text{m}$ DE DIÂMETRO COM v_r IGUAL A 0.0079 M/S (CASO 2) E DEM COM v_r IGUAL A 0.0079 M/S E MEIO POROSO DE ESFERAS DE VIDRO DE $120\mu\text{m}$ DE DIÂMETRO (CASO 3).

	CASO 1	CASO 2	CASO 3
L_{cap}	50	15.03	23.6
L_g	0.017	0.057	0.026

TABELA 2 - VALORES DAS PROPRIEDADES FÍSICAS DA ÁGUA E DEM E CONSTANTES UTILIZADAS PARA OS CÁLCULOS DE L_{cap} E L_g

ÁGUA	$\gamma = 0.068$	$\mu_l = 0.00127$	$\rho_l = 1000$	$Sc = 0.62$	$\nu = 1.2E-06$
	$C_\infty = 0.00$	$\varepsilon = 0.41$	$\rho_g = 1.16$	$U_\infty = 0.0079$	$C_w = 0.0196$
DEM	$\gamma = 0.032$	$\mu_l = 0.004$	$\rho_l = 1055$	$Sc = 0.62$	$\nu = 3.8E-06$
	$C_\infty = 0.00$	$\varepsilon = 0.41$	$\rho_g = 1.16$	$U_\infty = 0.0079$	$C_w = 0.0196$

3.2 REPRESENTAÇÃO DA MATRIZ POROSA E DA GEOMETRIA DA GOTA

Esta seção está dividida em duas partes. A primeira trata sobre o formato inicial da gota após impacto e posterior absorção no solo. Nela, são definidas as dimensões iniciais a serem consideradas na simulação. A segunda parte descreve como deve ser a representação do meio poroso para uma matriz estruturada composta por poros e ligações.

3.2.1 Formato da gota

Segundo Roberts e Griffiths (1999), o formato inicial da gota após o impacto e absorção no solo era um grande problema no que se diz respeito à evaporação em meios porosos e os modelos existentes de secagem não incorporavam de maneira adequada tais dimensões. Essas informações somente se tornaram disponíveis em estudos mais recentes, como as observações experimentais apresentadas por Reis et al. (2003).

Como observado na Figura 19 (b), o formato da gota após absorção se parece com uma semi-elipsoide. A profundidade de penetração e o alargamento lateral da gota variam conforme cada meio poroso. Evidentemente, não são apenas as características do meio poroso que influenciam no formato, mas também as dimensões e características da gota antes do impacto no solo. Uma relação entre o raio da gota antes do impacto (r_0) com o raio final, r_{gota} , após

alargamento durante a absorção se dá através da razão chamada de Fator de espalhamento (*spread factor*):

$$R^* = \frac{r_{gota}}{r_0} \quad (3.6)$$

A profundidade final (h_{gota}) que a gota atinge após absorção, também pode ser relacionada com r_0 através da penetração adimensional dada por:

$$H^* = \frac{h_{gota}}{r_0} \quad (3.7)$$

A Figura 18 mostra um desenho esquemático dessas relações no formato da gota.



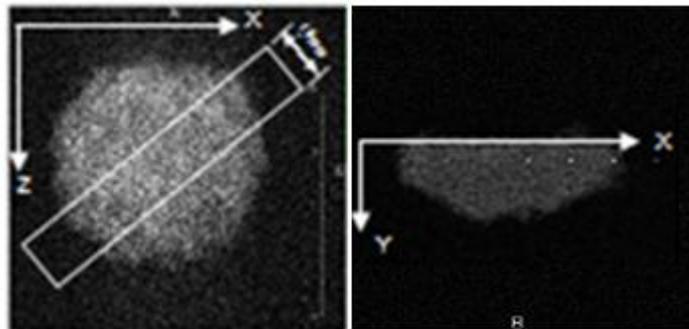
Figura 18 -. Definição do Fator de espalhamento (R^*) e da profundidade de penetração (H^*) Reis (2000).

Portanto, as dimensões iniciais da gota inseridas no modelo, para cada meio poroso, são determinadas através de R^* e H^* . Esses valores foram obtidos nos experimentos de Reis (2000) e são mostrados na Tabela 3.

TABELA 3. VALORES OBTIDOS ATRAVÉS DE REIS (2000) PARA OS CASOS ESTUDADOS NO PRESENTE TRABALHO.

	R^*	H^*
CASO 1	1,53	1,73
CASO 2	1,74	1,40
CASO 3	1,75	1,40

Como pode ser observado na vista superior do plano XZ da Figura 19 (a), o formato da gota é circular. Já na vista lateral (planos XY e YZ Figura 19 (b)) o perfil da gota admite um formato elíptico.



(a)

(b)

Figura 19 - (a) Imagem da vista superior do substrato (plano XZ) com representação esquemática da fatia de 1,5 mm que é utilizada para se obter a imagem lateral. (b) imagem lateral da gota dentro do substrato (plano XY). Os pontos claros representam a parte do substrato ocupada por líquido e os pontos escuros a parte que não foi ocupada (REIS, 2000).

Tendo o valor do raio e da profundidade, o contorno da gota é então traçado, obedecendo a curva formada pela equação da elipse (Equação 3.8).

Essa forma geométrica foi inserida no modelo. Os poros contidos no interior da região delimitada pela curva elíptica são considerados componentes da gota e no instante inicial são assumidos estar cheios de líquido.

$$\frac{x^2}{r_{gota}^2} + \frac{y^2}{h_{gota}^2} = 1 \quad (3.8)$$

Como na superfície o formato da gota é circular, nos planos XY e YZ o perfil elíptico é o mesmo. Os poros que fazem parte do contorno da gota e da superfície são do tipo (4), os imediatamente abaixo do limite da gota são do tipo (1), os que estão dentro do limite da gota são do tipo (3) e os demais são do tipo (0).

3.2.2 Meio poroso

Para representar um meio poroso pode se utilizar um sistema consistindo de partículas esféricas de diâmetros suficientemente pequenos e iguais (LUIKOV, 1966). As partículas esféricas podem estar compactadas de formas diferentes. Os tipos de compactação gerarão diferentes tamanhos e formas dos poros entre as esferas. A Figura 20 mostra uma representação esquemática dos tipos de compactação das esferas de um meio poroso. O ângulo (ϑ) entre as partículas podem variar entre o limite de 60° à 90° . O primeiro caso corresponde ao menos compactado (compactação cúbica, Figura 20 (a)) e o segundo caso o mais compactado (compactação hexagonal, Figura 20 (b)). A porosidade média do substrato não depende do tamanho da partícula, mas sim do tipo de compactação que é determinado por ϑ .

Para o primeiro caso, compactação cúbica ($\vartheta=90^\circ$), a porosidade média é igual a 47,64%. Todo poro tem a forma de um octaedro com as faces esféricas e côncavas (Figura 21 (a)). O poro é formado pelo espaço formado entre oito partículas adjacente. Então, pode-se considerar o poro como sendo um círculo inscrito no meio dessas partículas. A ligação com outro poro adjacente seria através de uma pequena passagem localizado no espaço do meio da compactação de quatro partículas (raio do círculo inscrito à quatro partículas adjacentes) como mostra a Figura 20 (a). O raio é então estimado em $0,41R$, onde R é o raio da partícula.

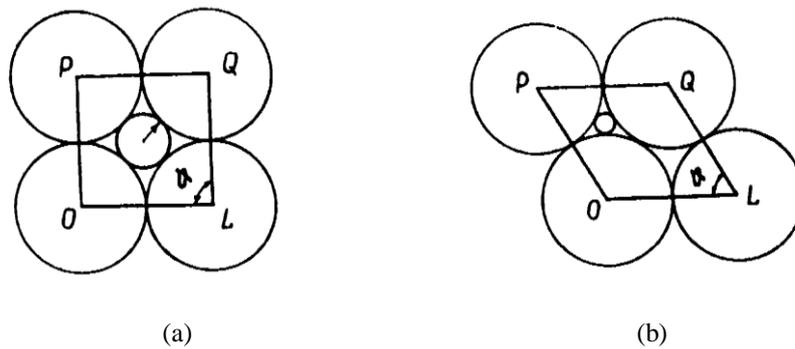


Figura 20 - Compactação das esferas com a formação dos poros. (a) Compactação cúbica ($\vartheta=90^\circ$). (b) Compactação hexagonal ($\vartheta=60^\circ$).

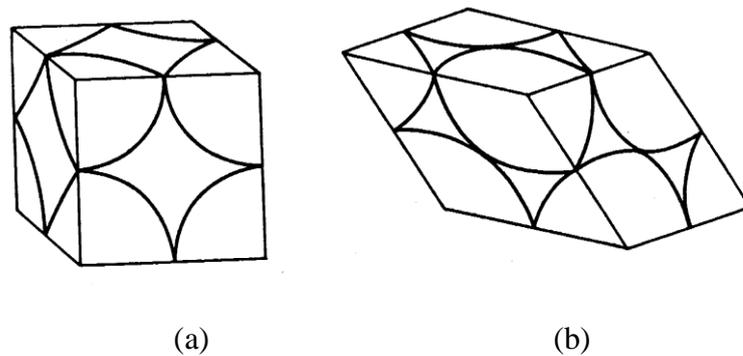


Figure 21 - Representação esquemática da geometria determinando os poros com partículas perfeitamente esféricas. (a) Compactação cúbica. (b) Compactação hexagonal (LUIKOV, 1966).

Para compactação hexagonal ($\vartheta=60^\circ$), toda partícula está em contato com doze partículas vizinhas. A porosidade média desta situação é de 25,95%. Os poros primários podem ter duas formas genéricas: tetraédrica ou romboédrica, sendo que o poro adquire uma configuração muito complexa. O raio da passagem mais estreita que uni dois poros adjacentes é de $0,155R$ (Figura 20 (b)). Neste tipo de arranjo o volume ocupado pelo poro tetraédrico é de 7,36% e para o romboédrico é de 18,58% (LUIKOV, 1966).

De acordo com as considerações propostas por Luikov (1966), os raios das ligações entre os poros estão em um intervalo de $0,41R$ e $0,155R$. Logo:

$$0,155R \leq \text{raio da ligação} \leq 0,41R \quad (3.9)$$

Considerando as frações de volumes dos poros cúbicos (47,64%), tetraédrica (7,36%) e romboédrica (18,58%), pode-se calcular o raio dos poros em cada situação.

$$\begin{aligned}
 V_{\text{poro}} &= \text{Porosidade} \cdot V_{\text{arranjo}} \\
 \frac{4}{3} \pi r_p^3 &= \text{Porosidade} \cdot V_{\text{arranjo}}
 \end{aligned}
 \tag{3.10}$$

TABELA 4 - DETERMINAÇÃO DO RAIO DO PORO PARA CADA TIPO DE ARRANJO

Tipo de arranjo	Volume do arranjo	Raio do poro
Cúbica	$V_{\text{Cubo}} = h^3$	$r_p = 0,969R$
Tetraédrica	$V_{\text{tetraedro}} = \frac{h^3}{12} \sqrt{2}$	$r_p = 0,5619R$
Romboédrica	$V_{\text{romboedro}} = h^3$	$r_p = 0,2549R$

Onde h é o comprimento do lado do arranjo. Assim os raios dos poros estão em um intervalo de $0,25492R$ e $0,969R$, logo:

$$0,25492R \leq r_p \leq 0,969R \tag{3.11}$$

Desta forma, os diâmetros dos poros e ligações são distribuídos aleatoriamente, de forma uniforme, ao longo das faixas expressão pelas Equações 3.9 e 3.11.

Obedecendo aos mesmos critérios geométricos, a distância entre poros deve estar entre $0,577d_p$ e $1,0d_p$. Sendo que, quanto menor é a distância entre poros, mais poros fazem parte da região limitada pela equação elíptica, obedecendo dessa forma, as dimensões iniciais da

gota. Como a quantidade inicial de massa de líquido tem um valor fixado em M_0 , equivalente a massa inicial da gota utilizada nos experimentos, a distância entre poros é ajustada entre limites, de maneira a agrupar uma quantidade suficiente de poros, dentro da elipse, que ao se somar todas as massas de líquido o resultado tem que ser igual a M_0 .

3.3 ALGORITMO NUMÉRICO

A seguir é mostrado a seqüência completa de operações implementadas no programa desenvolvido para simular a evaporação. O procedimento computacional para o algoritmo de solução foi implementado na linguagem de programação FORTRAN 95. A seqüência de operações é descrita como:

1. Definir randomicamente os diâmetros dos poros e ligações;
2. Determinar os poros cheios de líquido, parcialmente cheios e vazios, determinando regiões cheias de líquido e as interfaces líquido/gás;
3. Calcular o volume de líquido em cada poro;
4. Calcular a concentração de vapor em cada poro (no primeiro instante os poros vazios tem concentração igual a zero enquanto os poros cheios a concentração é igual a concentração de saturação do vapor);
5. Identificar todos os *clusters*;
6. Verificar dentre todas as ligações dos poros cheios, que estão no contorno externo de cada *clusters*, qual possui a menor pressão capilar. Com isso, cada cluster terá um poro sujeito a ser invadido pelo gás;
7. Calcular a taxa de evaporação, conforme a equação 3.2, de cada poro que esta no contorno externo de cada cluster. Somam-se essas taxas, e então, obtem-se a taxa de evaporação de cada cluster;
8. Calcular o tempo necessário de se esvaziar cada poro identificado no passo 6;
9. Escolher o menor dos tempos calculados no passo 8. Esse tempo corresponde ao tempo de evaporação do próximo poro a ser invadido. Com isso, tal poro é identificado;

10. Calcular a concentração de vapor em todos os poros através do balanço de massa descrito pela equação 3 referentes a evolução temporal definida no passo 9;
11. O poro identificado no passo 9 torna-se vazio (tipo 1). Os demais poros identificados no passo 6 se tornam parcialmente cheio (tipo 2), isto é, ainda não foram invadidos completamente pelo gás;
12. A distribuição de líquido e gás no substrato é atualizada, identificando os poros tipo 4 e 0;
13. Atualiza o volume de líquido contido em cada poro;
14. Avança-se para o próximo passo de tempo;
15. Retornar para o passo 5.

3.4 DADOS EXPERIMENTAIS

Os dados experimentais utilizados para a comparação dos resultados das simulações do modelo desenvolvido foram obtidos através dos trabalhos de Reis et al. (2003) e Reis et al. (2006). Nesses estudos, o monitoramento do episódio de secagem foi determinado através de imagens de ressonância magnética extraídas da gota dentro da matriz porosa.

O procedimento experimental envolveu primeiramente o preenchimento do tubo de ensaio com um material poroso (por exemplo, areia ou esferas de vidro), a fim de se obter uma camada porosa bem definida. A célula de ventilação é então colocada cuidadosamente em contato com o campo magnético. Um tubo capilar foi usado para depositar uma gota na matriz porosa. Após a gota ser depositada uma corrente de ar é mantida constante pelos canais de entrada e saída de ar, criando um fluxo de ar paralelo à superfície porosa.

Inicialmente, a gota foi posicionada na matriz porosa e uma imagem 2D foi feita com a finalidade de scanear o volume. Essa imagem representava uma vista integral do topo da gota. Baseado nesta imagem, uma fatia de 1.5mm e 45° foi selecionada para se obter as imagem 2D (Figura 22).

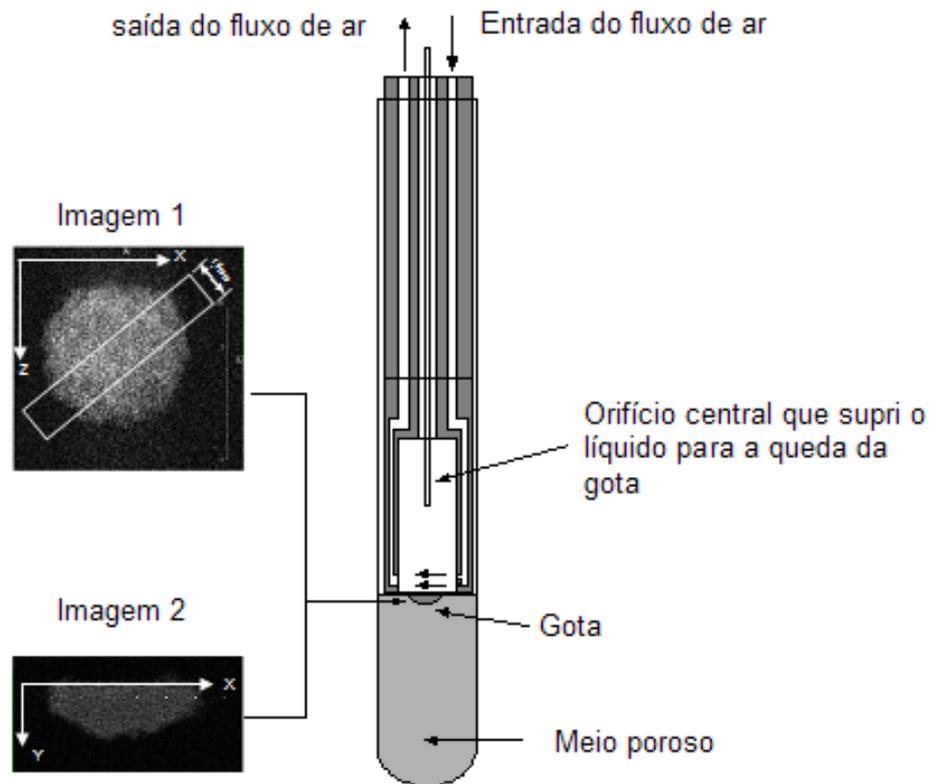


Figure 22 - Representação do tubo de ensaio contendo a matriz porosa e exemplos de imagens obtidas; imagem 1, vista superior (XZ) com representação esquemática da fatia de 1.5 mm que é utilizada para se obter a imagem lateral. Imagem 2, vista lateral (XY) da gota dentro do substrato. Os pontos claros representam a parte do substrato ocupado por líquido e os pontos escuros a partícula do meio poroso (REIS, 2000).

Cada imagem subsequente é adquirida desta mesma fatia, dando uma boa indicação da evolução do fenômeno. Cada imagem 2D representava uma vista integrada da fatia selecionada. As imagens obtidas representam somente a forma da gota dentro do substrato e a intensidade do brilho indica a concentração de líquido.

As imagens unidimensionais também são chamadas de perfis de concentração. A saída de dados dessa imagem nos proporciona a concentração de líquido dentro da matriz porosa no eixo inferior (eixo Y) em kg/m. Como citado anteriormente na Seção 2.1.1, a Figura 7 mostra os perfis de concentração de líquido e as imagens correspondentes para a evolução temporal da secagem líquido no meio poroso.

A figura 23 mostra uma representação esquemática dos perfis de concentração obtidos e sua correlação com a posição da fonte de NMR, onde é possível ver a gota disposta na matriz porosa.

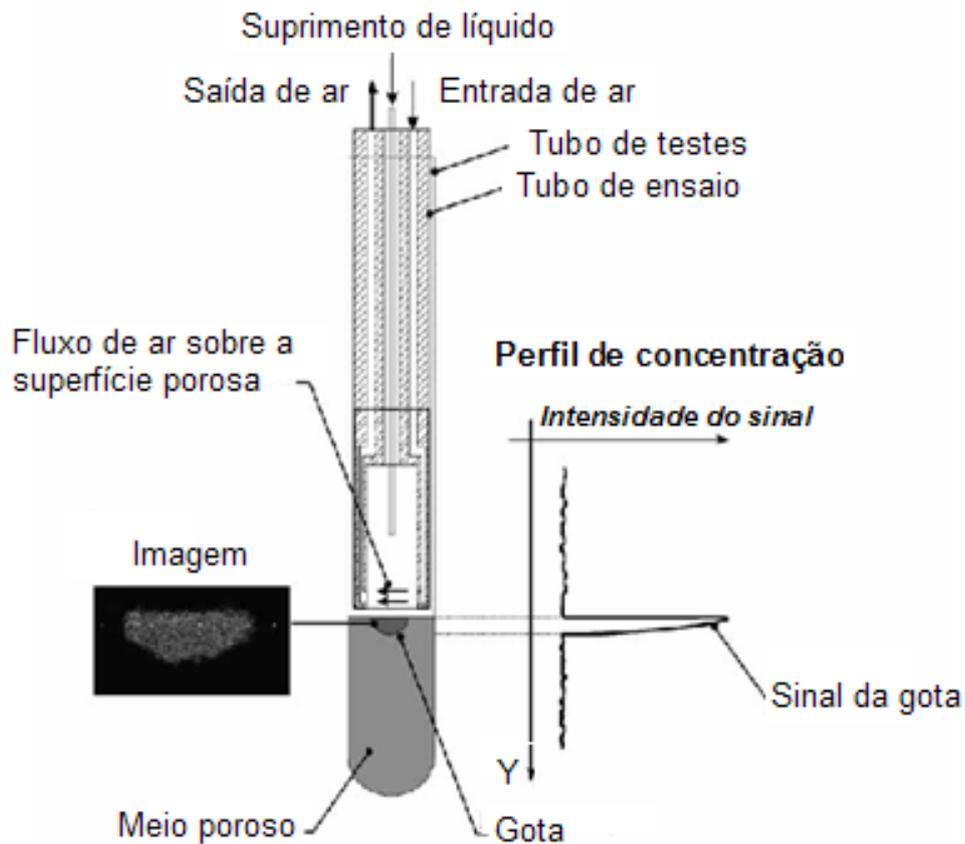


Figura 23 – Visão lateral da imagem do líquido logo após absorção no substrato e o correspondente perfil de concentração de líquido (REIS et al, 2003).

3.5 PARAMETRIZAÇÃO

Uma vez que, as configurações estudadas apresentam diferentes líquidos e formatos da região saturada por líquido, as taxas de evaporação obtidas são significativamente diferentes. Com o objetivo de permitir uma parametrização dos resultados, os dados são apresentados no próximo Capítulo em sua forma adimensional.

Neste trabalho, foi utilizado uma escala de tempo normalizada pela massa da gota e taxa inicial de evaporação:

$$T^* = \frac{t}{T_0} \quad (3.12)$$

Onde T^* é o tempo adimensional, t é o tempo em segundos e T_0 é a escala de tempo característica do processo:

$$T_0 = \frac{M_0}{\overline{Dm/Dt}} \quad (3.13)$$

Onde M_0 é a massa inicial de líquido e $\overline{Dm/Dt}$ é a taxa inicial de evaporação.

Nos instantes iniciais da evaporação todas as configurações estudadas apresentam a superfície superior completamente saturada de líquido. Desta forma, a taxa de evaporação inicial é pouco dependente do meio poroso, sendo principalmente determinada pelas características da gota (área exposta e concentração de saturação) e características do escoamento (coeficiente de transferência de massa).

Com o avanço da evaporação, Dm/Dt deve se tornar cada vez mais influenciado pelo meio poroso. Desta forma, a escala de tempo selecionada apresenta uma métrica do efeito limitante do meio poroso sobre a evaporação. Caso a gota evapore com a mesma taxa inicial (não afetada pelo meio poroso) T^* ao final do processo será 1, caso a evaporação seja mais lenta T^* será superior a 1, indicando a limitação da taxa de evaporação imposta pelo meio poroso.

Analogamente ao tratamento dado ao tempo, massa e taxa de evaporação, é necessário representar os perfis de concentração de uma forma adimensional. O perfil é expresso em kg/m porque representa a concentração integrada num plano horizontal da gota. A idéia seria representar a concentração de saturação de líquido no meio poroso para kg/m usando a área característica da gota antes de tocar o solo (A_0), sendo ($A_0 = \pi r_0^2$). A concentração pode então ser adimensionalizada da seguinte forma:

$$C^* = \frac{c}{c_0} \quad (3.14)$$

Onde c é a concentração expressa em kg/m e c_0 é a concentração característica ($c_0 = c_{sat}A_0$), que representa a concentração numa região porosa completamente saturada de líquido de raio r_0 . c_{sat} é a concentração de saturação num meio poroso ($c_{sat} = \rho\varepsilon$).

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos pelo modelo desenvolvido. A avaliação dos resultados é baseada nos experimentos de Reis et al. (2003) e Reis et al. (2006). Foram simulados três casos, sendo que, o caso 1 simula a evaporação de uma gota de água exposta a um fluxo de ar na superfície porosa que gera uma velocidade característica do transporte do vapor para a atmosfera (v_r) de 0.0079 m/s numa matriz porosa composta por esferas de vidro com 400 μm de diâmetro; o caso 2 simula a mesma situação, mas com o diâmetro das partículas do meio poroso de 120 μm , e o caso 3 representa a evaporação de uma gota de dietil malonato (DEM) numa matriz porosa de esferas de vidro com 120 μm diâmetro com v_r similar aos casos 1 e 2. O capítulo está dividido em três seções, sendo uma seção para cada caso.

A Tabela 5 mostra os parâmetros utilizados em cada caso, indicando o tipo de líquido, configuração do meio poroso, característica do fluxo atmosférico representado pela velocidade característica da remoção de vapor e demais parâmetros característicos usados para normalizar os resultados (r_0 , Mo e To). As dimensões da matriz porosa e o número de poros que formam a gota também estão na tabela. As propriedades dos líquidos utilizados (água e DEM) são apresentadas na Tabela 6.

TABELA 5 - SUMÁRIO DAS CONFIGURAÇÕES ADOTADAS PARA OS QUATRO CASOS SIMULADOS.

	Caso 1	Caso 2	Caso 3
Líquido	Água	Água	Dietil malonato
Substrato	Esfera de vidro 400 μ m	Esfera de vidro 120 μ m	Esfera de vidro 120 μ m
ν_r [m/s]	0.0079	0.0079	0.0079
r_0 [mm]	1.66	1.66	1.15
M_0 [kg]	Rodada 1	2.14E - 05	1.93E - 05
	Rodada 2	2.18E - 05	–
	Rodada 3	2.20E - 05	–
	Rodada 4	2.15E - 05	–
T_0 [min]	32.1	9.1	325.7
Dimensões da matriz porosa	30 x 16 x 30	107 x 45 x 197	74 x 31 x 74

TABELA 6 - PROPRIEDADES FÍSICAS DOS LÍQUIDOS SIMULADOS

Propriedades	Água	Dietil malonato (DEM)
Coeficiente de difusão [m ² /s]	2.50E - 05	8.00E - 06
Concentração de saturação de vapor [kg/m ³]	1.52E - 02	1.10E - 03
Densidade [kg/m ³]	1000	1055
Viscosidade [kg/ms]	1.27E - 03	4.0E - 03
Tensão superficial [N/m]	6.80E - 02	3.24E - 02

4.1 CASO 1

Nesta seção, são apresentados os resultados obtidos nas simulações e experimentos para o caso da evaporação de gota de água num meio poroso composto por esferas de vidro com 400 μ m de diâmetro com v_r igual a 0.0079 m/s. As dimensões da matriz porosa são definidas a partir das dimensões da gota após absorção no substrato. Estas dimensões foram representadas através de um semi-esferóide, cuja profundidade e diâmetro foram obtidos a partir de dados experimentais apresentados por Reis et al. (2000). Neste caso o raio e profundidade do semi-esferóide são 1.53 e 1.73 vezes o raio original da gota antes do impacto (r_0), que era igual a 1.66. As dimensões horizontais (eixos X e Z) do domínio são três vezes o tamanho do raio da gota enquanto a profundidade (eixo y) corresponde a soma da profundidade da gota mais metade do seu raio. Dessa forma, como mostra a Tabela 5, as dimensões da matriz são: 30 x 16 x 30, o que representa um substrato composto por 14400 poros, desses, 2119 formam a gota. Os resultados foram processados num computador AMD Athlon 64 3200 + 2.21 GHz com 1,0 GB de RAM durando em torno de dez minutos para cada rodada.

Os diâmetros dos poros e ligações variam randomicamente, dentro dos limites estabelecidos pela Seção 3.2.2. Com o objetivo de garantir a representatividade dos resultados obtidos, os dados de evolução temporal da saturação de líquido e taxa de evaporação apresentados nesta seção representam valores médios de 4 simulações (cada simulação representa uma evaporação completa da gota). Por outro lado, as imagens da mudança de fase e da concentração de vapor apresentadas são resultados de apenas uma simulação de cada caso, permitindo a visualização dos efeitos das características randômicas do meio poroso de uma secagem completa.

A Figura 23 mostra a evolução temporal do formato da gota no interior do meio poroso, de maneira a permitir uma comparação entre as imagens dos experimentos e simulação. Os resultados representam uma somatória da concentração de líquido nos poros em uma fatia de 1,5 mm da gota (Figura 22). Conforme pode ser visto, as imagens em $M^* = 1.0$ mostram os formatos das gotas, experimental e numérica, logo após a absorção no substrato. Nota-se boa semelhança no formato semi-esférico de ambas as gotas. Entretanto, existem diferenças significativas entre eles, visto que, o formato da gota dos experimentos não é

exatamente um elipsóide enquanto a gota do modelo segue estritamente a equação da elipse (Equação 3.8) onde suas dimensões são definidas através das constantes R^* e H^* que são valores médios extraídos de vários experimentos. (REIS, 2000)

Como reportado por Reis et al. (2003), as imagens obtidas nos experimentos indicam que a evaporação ocorre em toda interface líquido/gás ou contorno da gota, com isso, não há uma mudança de fase somente na superfície do meio poroso. Tal fato também pode ser observado nas imagens geradas pelas simulações, pois no decorrer da evaporação pode-se notar que a concentração de líquido em todo contorno é gradualmente reduzida, conforme pode ser evidenciado pelo escurecimento das bordas da região saturada da gota. Neste mesmo período, as imagens experimentais e numéricas apresentam um avanço de frentes de evaporação de formato significativamente irregular (*capillary fingers*), gerando pequenas regiões de líquido isoladas chamadas de *clusters*, que podem ser notados mais claramente nas imagens com M^* inferior a 0.548.

Apesar do surgimento dos *fingers*, percebe-se, tanto nos resultados do modelo quanto nos dados experimentais, que a secagem aparenta ser homogênea em todo o contorno da gota deixando a região central com maior concentração de líquido. Nos instantes finais, em $M^* = 0,470, 0,390$ e $0,290$, a evaporação da gota dos experimentos demonstra ser mais uniforme em todo líquido remanescente, tal comportamento também pode ser notado nos resultados numéricos.

É importante notar que os níveis de concentração de líquido nas imagens dos experimentos são significativamente menores que nos resultados obtidos pelo modelo, a partir de M^* menor que 0.470. Conforme citado por Reis et al. (2003), as imagens obtidas por NMR apresentam uma sensível perda de sinal para baixas concentrações de líquido. Desta forma, os autores recomendam que análises para os estágios posteriores da secagem, sejam efetuadas através dos perfis de concentração. A Figura 25 mostra os perfis de concentração integrada obtidos experimentalmente (a esquerda) e os resultados obtidos pelos modelos (a direita). Pode-se observar que apesar das imagens experimentais indicarem níveis de concentração muito inferiores aos resultados do modelo, os perfis experimentais indicam níveis de concentração comparáveis aos resultados do modelo.

Conforme observado nas imagens, os perfis experimentais e simulados apresentam diferenças significativas nos instantes iniciais da evaporação. Diferentemente da simulação, a região de

maior concentração de líquido nos experimentos esta localizada pouco abaixo da superfície do meio poroso ($X = 0.0$) devido ao padrão de distribuição de líquido formado durante o impacto no meio poroso. Outra diferença entre os formatos é a profundidade de cada gota, a gota dos experimentos atinge uma profundidade de $X = -1,38$ e a gota das simulações chega somente a $X = -1,67$. Como descrito anteriormente, esse fato se explica devido ao modelo considerar valores médios R^* e H^* .

Nos primeiros instantes, os gráficos dos experimentos da Figura 25 mostram uma redução da concentração de líquido na superfície maior do que nas demais profundidades da gota. Com o decorrer do tempo, não há uma variação muito significativa no formato do perfil de concentração, havendo uma redução quase que uniforme em toda profundidade da gota. Segundo Reis et al. (2003), este comportamento sugere que a secagem nesse período é mais homogênea em toda gota. Os autores citam que se a redução da concentração de líquido ocorre de forma uniforme dentro da gota mesmo com a taxa de evaporação maior nas regiões superiores, então isso indica que há uma migração de líquido das camadas inferiores para as camadas superiores, provavelmente devido à difusão capilar. Os gráficos das simulações mostram que nos primeiros instantes há uma redução na concentração um pouco mais elevada na superfície em comparação com os experimentos, mas no restante do processo é de se notar que as alterações no formato dos perfis de concentração também são pouco significantes, sugerindo uma secagem mais uniforme, como a obtida experimentalmente.

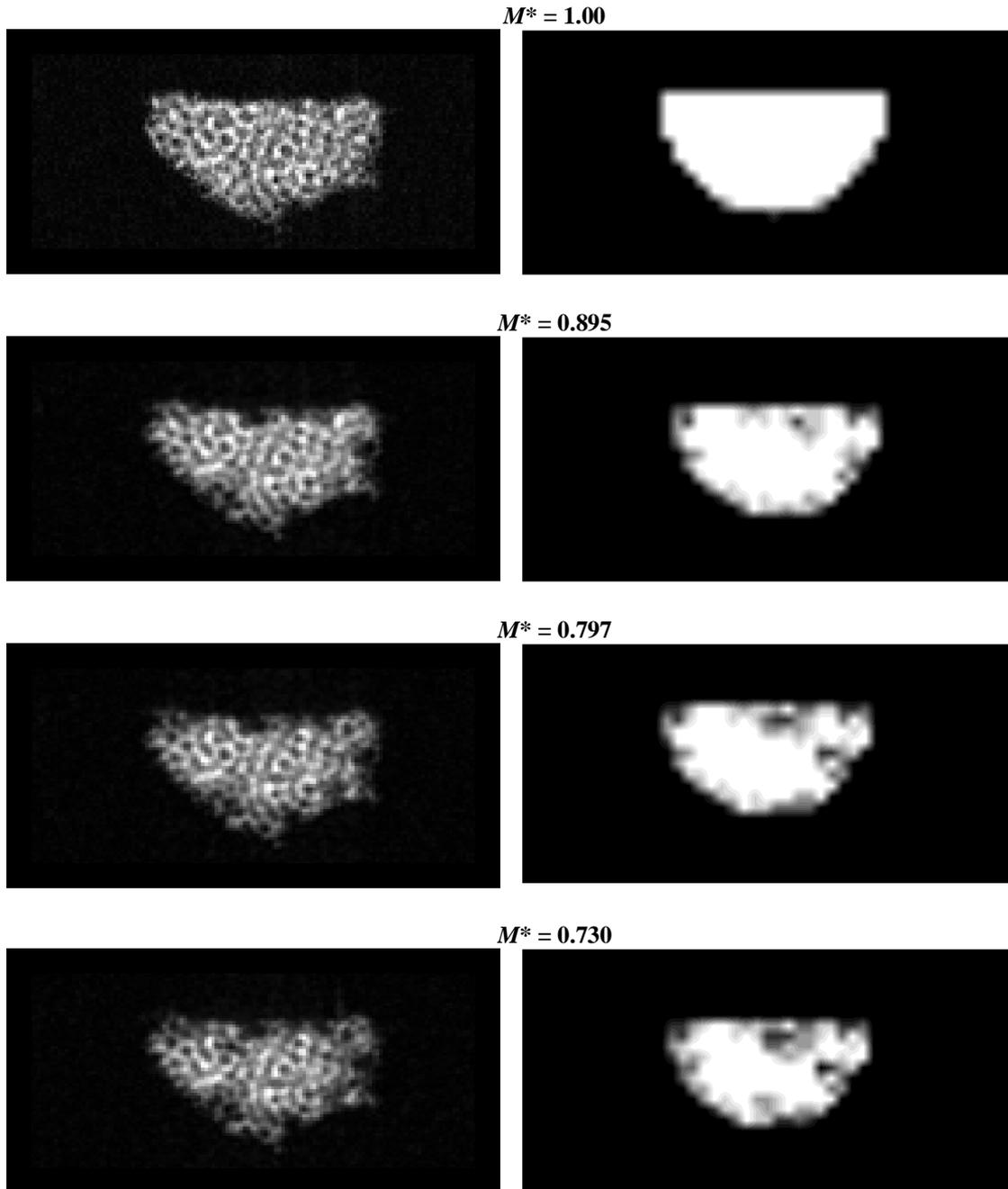


Figura 24 - Evolução no tempo das imagens da gota de água dentro do meio poroso com $400 \mu\text{m}$ de diâmetro das partículas. Dados experimentais no lado esquerdo (REIS et al, 2003) e simulação no lado direito.

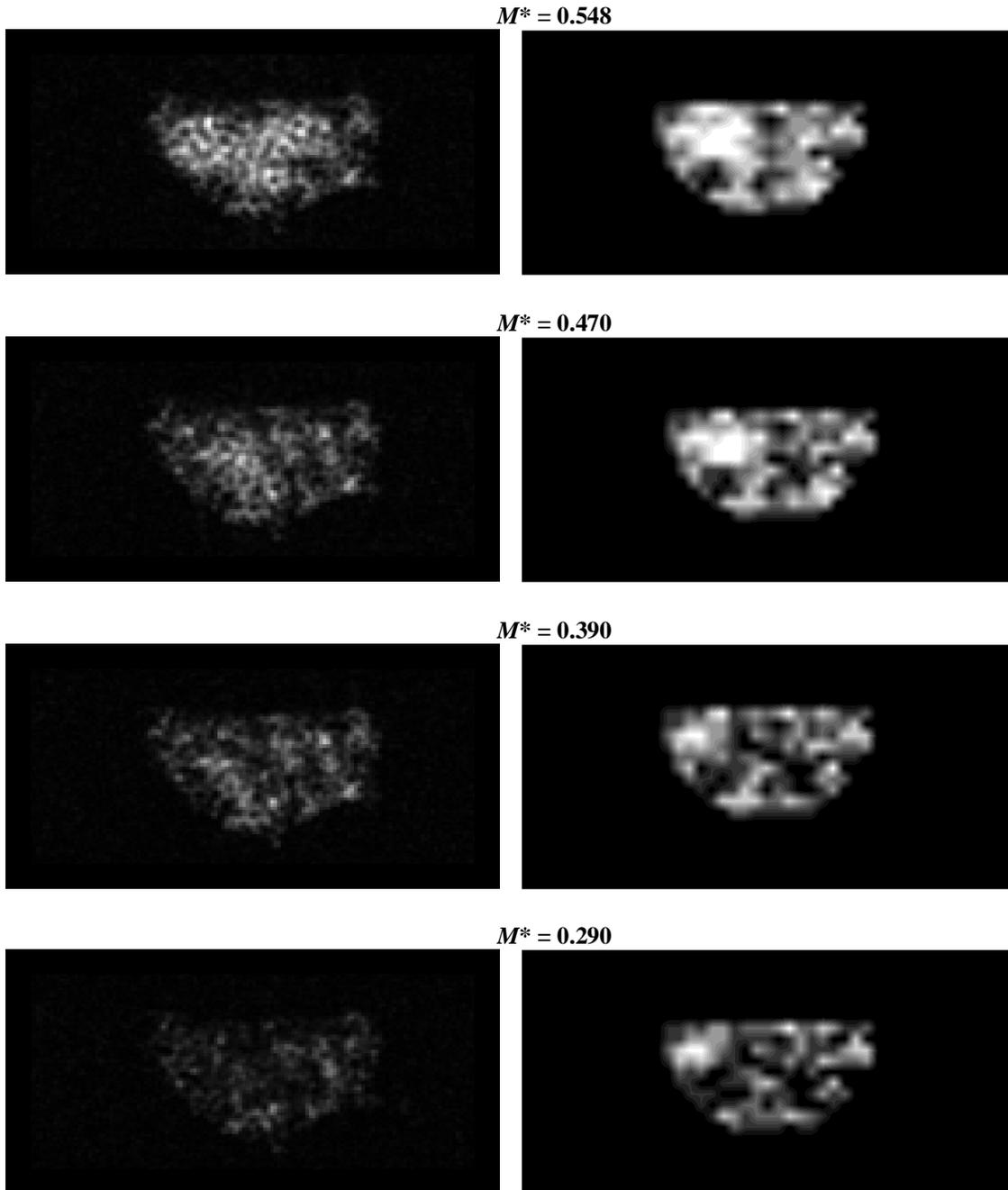


Figura 24 – (continuação)

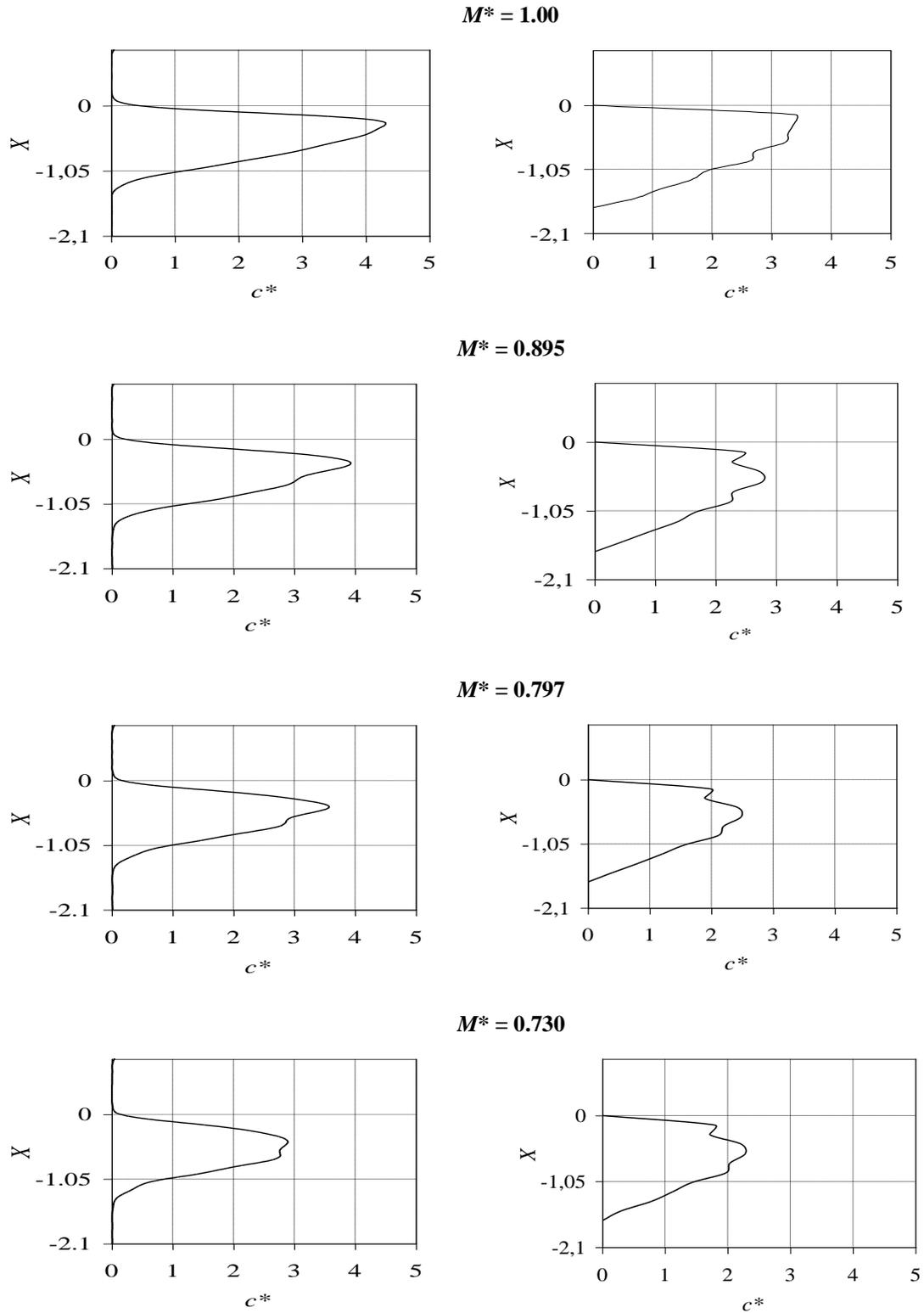


Figura 25 - Evolução no tempo do perfil de concentração de líquido (água) dentro do meio poroso com 400 μm de diâmetro das partículas. Dados experimentais no lado esquerdo (REIS et al, 2003) e simulação no lado direito. O eixo X representa a profundidade da gota em milímetros e o eixo c^* é a concentração adimensional de líquido.

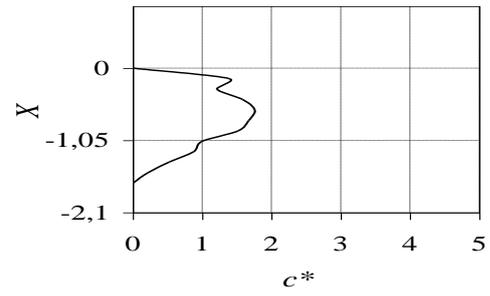
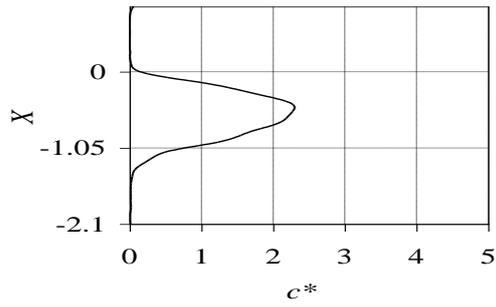
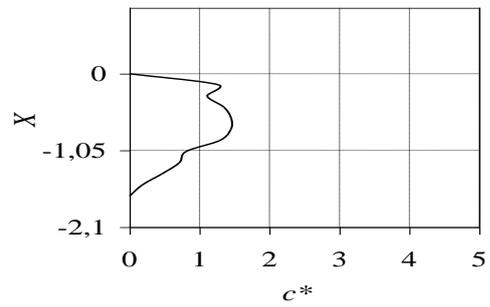
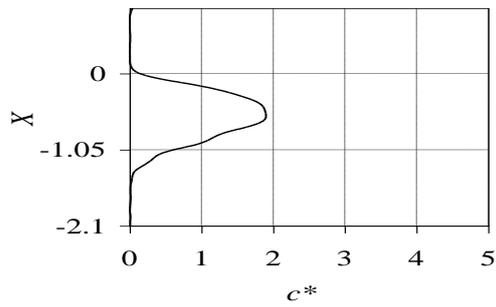
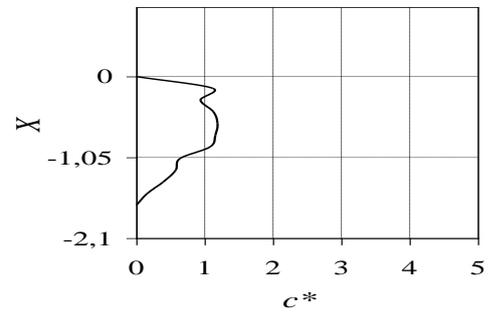
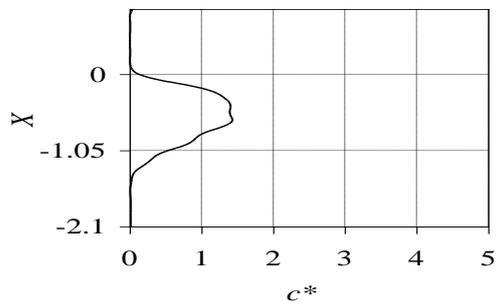
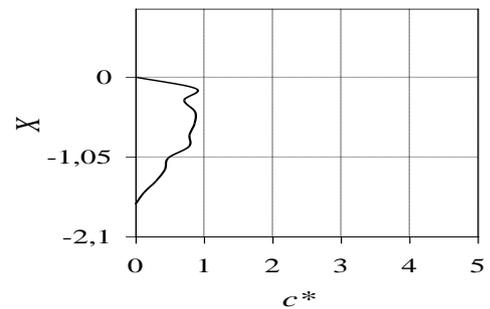
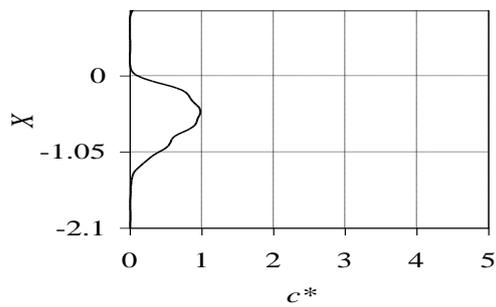
$M^* = 0.548$  $M^* = 0.470$  $M^* = 0.390$  $M^* = 0.290$ 

Figura 25 – (continuação)

A variação da distribuição de líquido pode ser claramente observada na Figura 26, que apresenta uma visão tridimensional dos poros cheios de líquido no interior da matriz porosa. Nos instantes iniciais, é possível notar a secagem de alguns poros da superfície, porém, poros em outras regiões também são evaporados. Na verdade, a escolha do poro a ser evaporado primeiro depende apenas da estrutura do meio poroso (diâmetro das ligações) enquanto o líquido permanece em um único *cluster* de poros.

Com o passar do tempo, o padrão fractal gerado pela formação de *fingers* durante a secagem resulta no surgimento de pequenos *clusters* desconectados espalhados em diversas profundidades. Nos instantes finais da evaporação, os *clusters* são gradualmente evaporados e o líquido é totalmente removido da matriz porosa.

A Figura 27 mostra a evolução temporal da concentração de vapor em um plano que passa pelo centro da gota, onde a concentração varia de 0 a 1, sendo que 1 é o valor da concentração de saturação de vapor.

Pode-se notar que o meio poroso composto por esferas de vidro de 400 μm de diâmetro não gera uma grande resistência ao transporte de vapor no meio poroso, visto que, logo nos instantes iniciais ($M^* = 1.00$ ou 0.895) a concentração de vapor começa a se espalhar pelo meio poroso. Isto pode ser também comprovado pelos valores relativamente baixos de concentração de vapor na superfície inferior da gota.

Logo após a secagem de um poro, os níveis de concentração são rapidamente reduzidos desde a concentração de saturação até níveis relativamente baixos, indicando a facilidade de remoção de vapores do meio poroso. Essa facilidade de remoção de vapores pode explicar a tendência de secagem ou redução de concentração de líquido aproximadamente uniforme em todas as profundidades, conforme indicado pelos perfis de concentração.

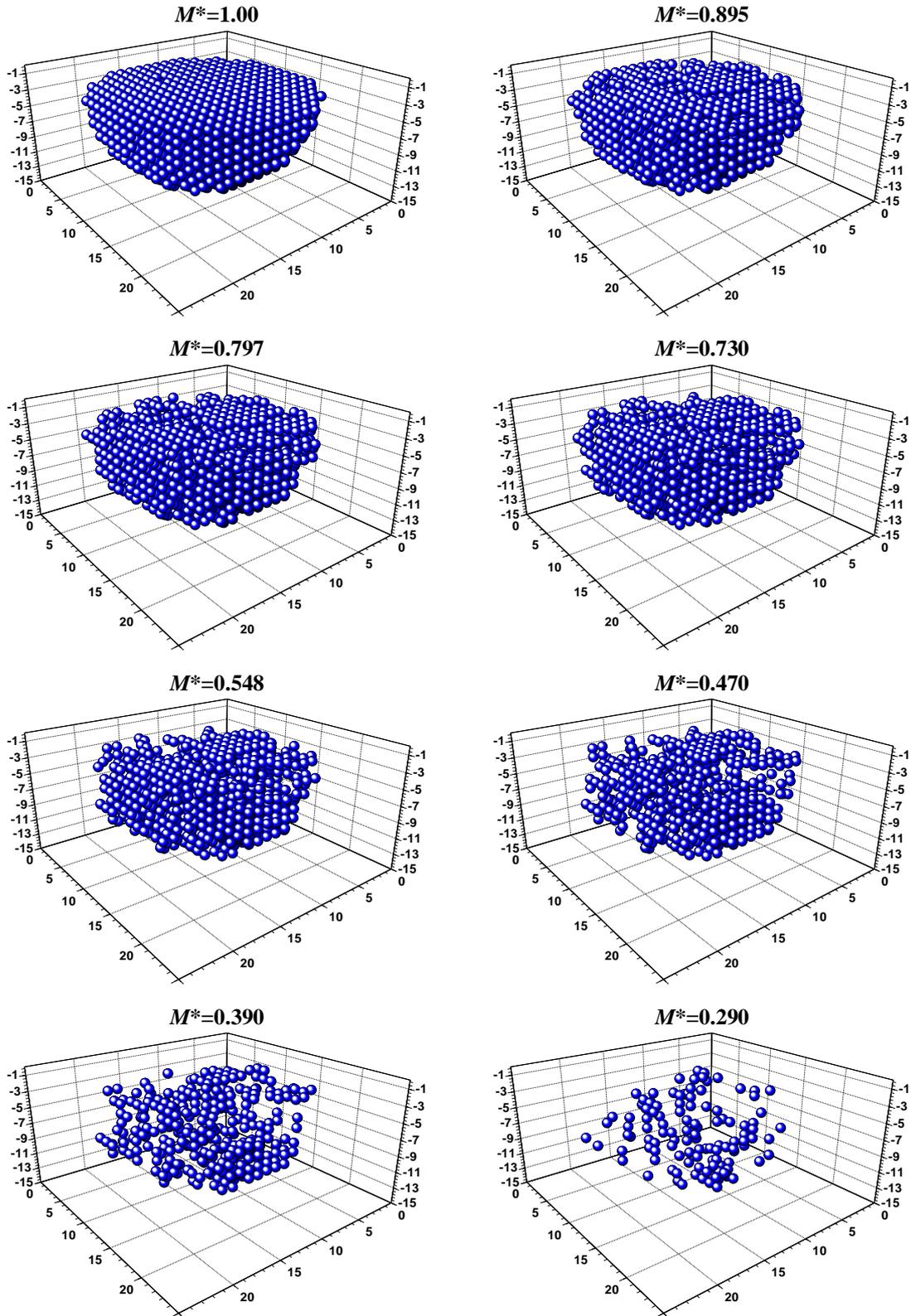


Figura 26 - Visão tridimensional dos poros cheios de líquido no interior da matriz porosa.

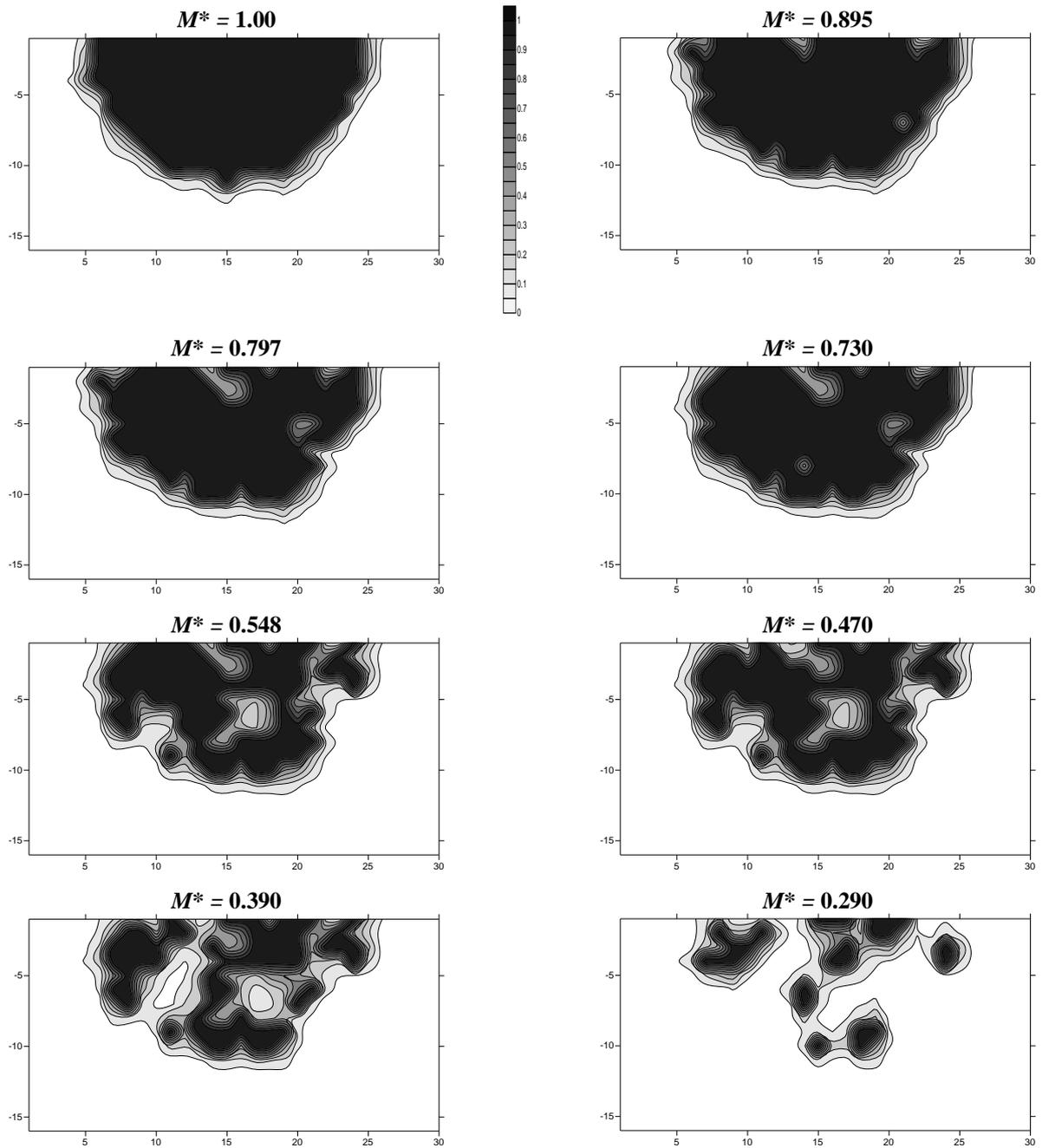


Figura 27 - Evolução no tempo das concentrações de vapor na matriz porosa da gota de água dentro do meio poroso com 400 μm de diâmetro das partículas.

A Figura 28, mostra a fração mássica remanescente no meio poroso no decorrer do tempo adimensionalizado. Como pode ser visto, a curva dos dados experimentais tem uma redução quase que contínua, durante todo episódio, isso pode ser confirmado através da análise da Figura 29 que mostra a taxa de evaporação. A taxa de evaporação experimental apresenta uma pequena redução inicial seguido por um longo período constante, sem grandes variações, até os instantes finais onde apresenta uma drástica queda. Ou seja, durante a secagem, ocorre uma redução mássica praticamente linear, pois a taxa de evaporação foi constante em quase todo tempo. Os autores justificam essa fase de evaporação constante devido a redistribuição de líquido dentro do substrato.

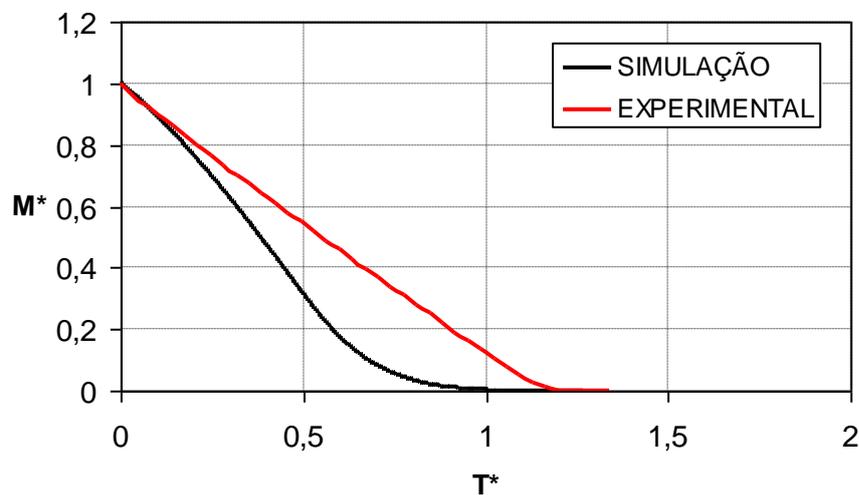


Figura 28 - Fração mássica remanescente no meio poroso no tempo adimensional.

Na simulação, a redução mássica apresenta uma queda que fica cada vez mais acentuada até atingir 40% de concentração de líquido. Como pode ser observado na Figura 29, nesse período a taxa de evaporação cresce gradualmente até atingir seu valor máximo. Nos instantes seguintes, a taxa tem declive bastante acentuado, que vai suavizando até os instantes finais onde a redução tem um decréscimo bastante lento. Como consequência a massa de líquido reduz de uma maneira mais suave neste mesmo período.

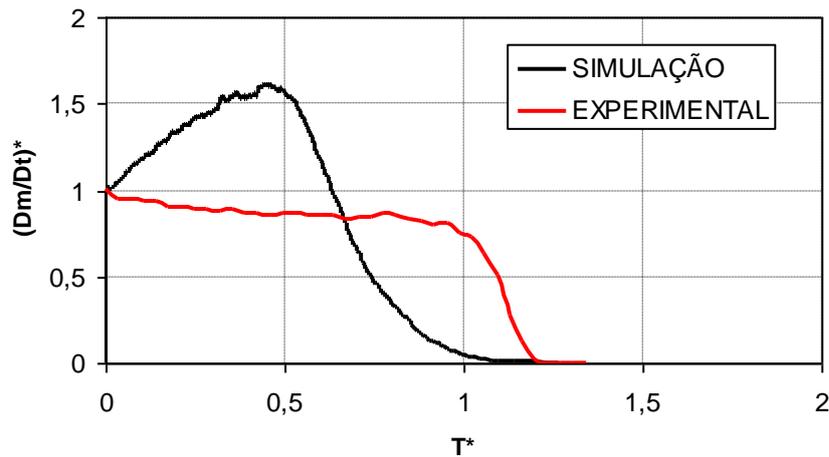


Figura 29 - Variação da taxa de evaporação adimensional da gota no tempo adimensional.

A taxa de evaporação calculada pelo modelo tem um comportamento significativamente diferente dos dados experimentais. Com o intuito de se avaliar os parâmetros que mais influenciam o comportamento da taxa de evaporação foram gerados os gráficos da Figura 30. Neles estão plotados, a variação da taxa de evaporação em Kg/s no tempo (curva 1), a área exposta para evaporação em m^2 no tempo, ou seja, o somatório das áreas de todas as ligações entre os poros cheios (curva 2), e o número de *clusters* gerados durante a secagem (curva 3). Para representar as três curvas na mesma ordem de grandeza, o valor das áreas expostas esta dividido por 1000 e o número de cluster esta dividido por 10^{10} .

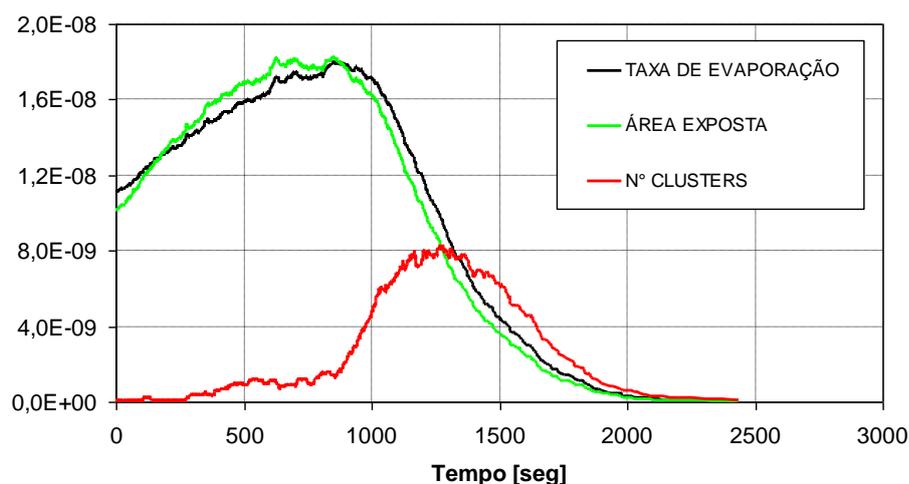


Figura 30 - Variação da taxa de evaporação em Kg/s no tempo, área exposta para evaporação em m^2 no tempo dividido por 1000, e número de clusters gerados durante a secagem dividido por 10^{10} .

Ao analisar a curva da quantidade de *clusters*, pode-se observar que no momento em que a taxa de evaporação atinge seu valor máximo, o número de *clusters* ainda é baixo. Quando a

quantidade de *clusters* chega ao ponto máximo, o valor da taxa é pouco menor do que no instante inicial. Isso sugere que a quantidade de *clusters* não tem uma influência direta nas variações da curva da taxa de evaporação. Este aumento do número de *clusters* durante a simulação do processo de secagem é reportado por diversos autores, entre outros Lê Bray e Prat (1999) e Yiotis et al. (2006).

Observa-se que o gráfico da área exposta tem um comportamento semelhante ao gráfico da taxa de evaporação, ou seja, com o passar do tempo a área superficial em toda região saturada aumenta consideravelmente. Este comportamento está, provavelmente, ligado à formação dos padrões fractais durante a secagem.

O aumento da área superficial da região saturada de líquido somado às concentrações de vapor relativamente baixas no interior da matriz porosa, causadas pela relativa facilidade de remoção dos vapores nesta configuração, resulta em um aumento considerável da taxa de evaporação. Enquanto a secagem total leva aproximadamente 207 minutos no experimento, a secagem na simulação levou apenas 41 minutos, indicando claramente uma super estimação das taxas de evaporação preditas. Este comportamento pode estar ligado a uma incorreta caracterização do meio poroso, subestimando a resistência imposta ao transporte de vapor.

É importante relatar que diversos autores reportam na literatura, entre outros Laurindo e Prat (1996), Prat (2002) e Yiotis et al. (2005), que modelos de escala de poros tendem a reproduzir de maneira adequada os padrões de distribuição de líquido durante a secagem, mas falham em predição de maneira adequada das taxas de evaporação. Esta tendência é semelhante à encontrada aqui, onde as distribuições de líquido são razoavelmente adequadas, mas as taxas de evaporação são fracamente preditas. Entretanto a literatura sugere que modelo de escala de poros semelhante ao implementado neste trabalho devem subestimar as taxas de evaporação por não incluírem os mecanismos de formação de filmes de líquido nas paredes das ligações, que contribuem para aumentar a velocidade de remoção de líquido das regiões saturadas, acelerando o processo de evaporação. Neste trabalho, os resultados indicam que as taxas de evaporação foram superestimadas, mesmo sem a incorporação da teoria da formação de filmes (PRAT, 2007; YIOTIS et al., 2007).

4.2 CASO 2

Nesta seção, são apresentados os resultados do caso da evaporação de gota de água num meio poroso composto por esferas de vidro com $120\mu\text{m}$ de diâmetro. Os resultados mostrados na Figura 32 foram extraídos de apenas uma única simulação, pois o tempo computacional é muito grande, em torno de 40 dias utilizando um computador AMD Athlon 64 3200 + 2.21 GHz com 1,0 GB de RAM. As dimensões da matriz porosa são $107 \times 45 \times 107$, muito maior do que o caso 1. A quantidade de poros na matriz é de 515205, sendo que, 69840 formam a gota. Para este caso, o fato de se ter uma quantidade de poros muito elevada a matriz pode reduzir a influência da redistribuição de diâmetros dos poros e gargantas. Portanto, apenas uma simulação da evaporação completa da gota é suficiente para representar a predição do modelo com um bom grau de confiança.

A Figura 30 apresenta uma comparação entre as distribuições de líquido obtidas experimentalmente por Reis et al. (2003) e os resultados obtidos neste trabalho. Pode-se notar que na primeira imagem da Figura 31 a superfície da gota dos experimentos não está totalmente plana igual a gota da simulação. Segundo Reis et al. (2003), o impacto da gota na superfície porosa causa alguns distúrbios nas partículas gerando irregularidades na superfície como pequenas crateras.

Por possuir esferas de vidro com menor diâmetro, o meio poroso é caracterizado por ter menor permeabilidade o que aumenta a resistência na penetração do líquido forçando-o a se espalhar para os lados. Como consequência, a gota tem um formato com maior diâmetro e menor profundidade do que o caso 1. Conforme descrito por Reis et al. (2003), a concentração de líquido não é uniforme em toda região da gota, diversas sombras cinza podem ser vistas nas imagens. A diferença de concentração pode ser atribuída a pequenas não homogeneidades no empacotamento das partículas. No modelo não se percebe esse tipo de irregularidade, pois a matriz porosa é estruturada conforme mostrado na Figura 9 (c), com isso, a distribuição de líquido é totalmente uniforme. Nos três primeiros instantes ($M^* = 1.00, 0.857$ e 0.719), é de se notar, que existe uma leve redução de concentração de líquido na superfície, porém, maior do que a redução apresentada nas outras regiões. As imagens da simulação não capturam tão bem esse comportamento. Há sim uma redução de concentração na superfície, mas não é de se

chamar tanta atenção em comparação com as demais regiões. No decorrer da evaporação, é possível de se ver um avanço de frentes de evaporação formando diversos clusters desconectados. Esta tendência é representada de maneira adequada pela simulação.

Reis et al. (2003) descreve que nas primeiras etapas da evaporação ($M^* = 1.00, 0.857$ e 0.719), os gráficos da Figura 32 apresentam uma redução considerável nos níveis de concentração dos perfis próximo à superfície, mostrando que tal comportamento não pode ser muito bem deduzido através das imagens. Os perfis obtidos pelas simulações mostram perfeitamente essa redução durante os mesmos instantes e a partir de $M^* = 0,730$ o perfil é reduzido igualmente em toda profundidade da gota da mesma forma como mostra o comportamento dos perfis dos experimentos.

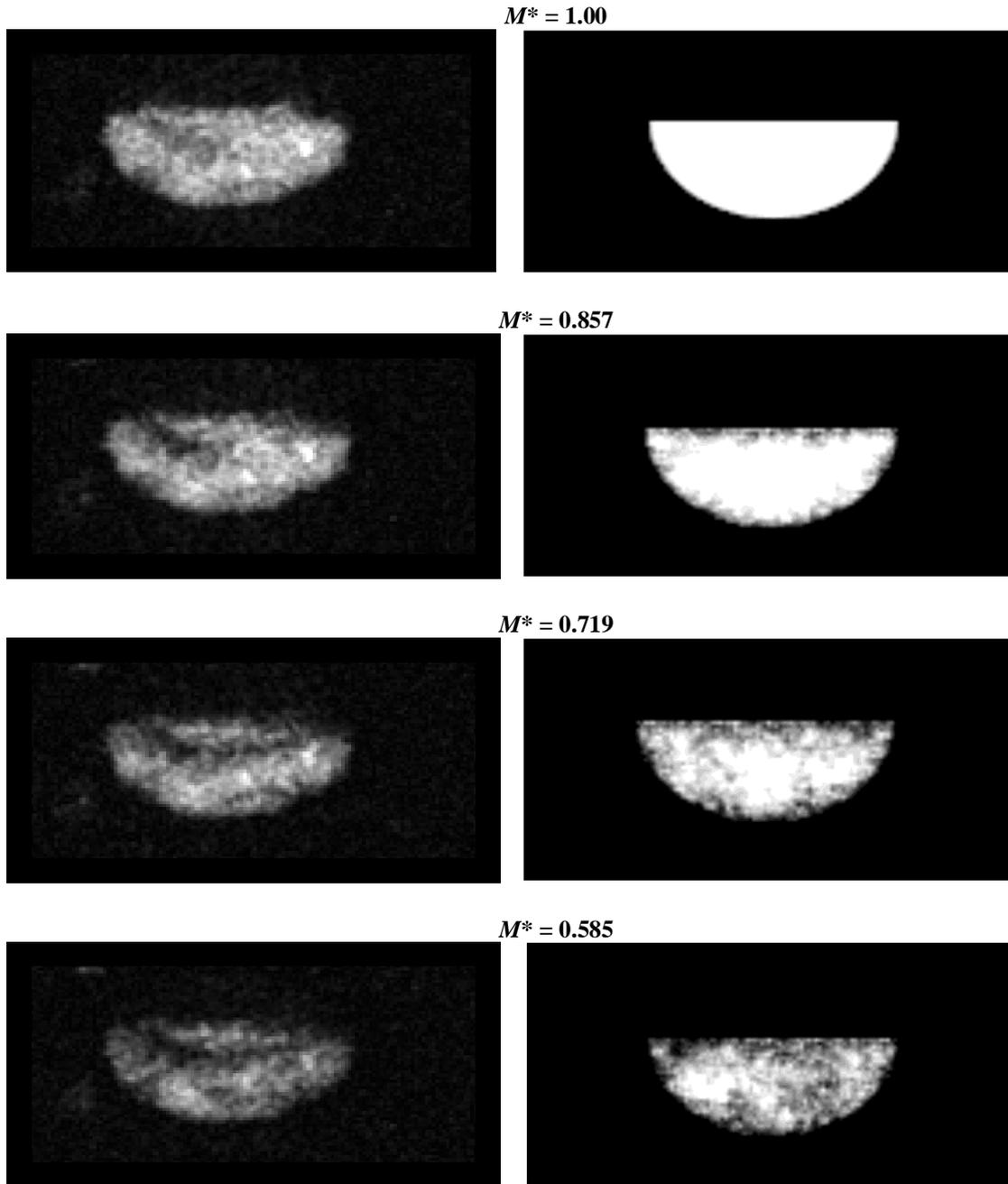


Figura 31 - Evolução no tempo das imagens da gota de água dentro do meio poroso com $120\ \mu\text{m}$ de diâmetro das partículas. Dados experimentais no lado esquerdo (REIS, 2003) e simulação no lado direito.

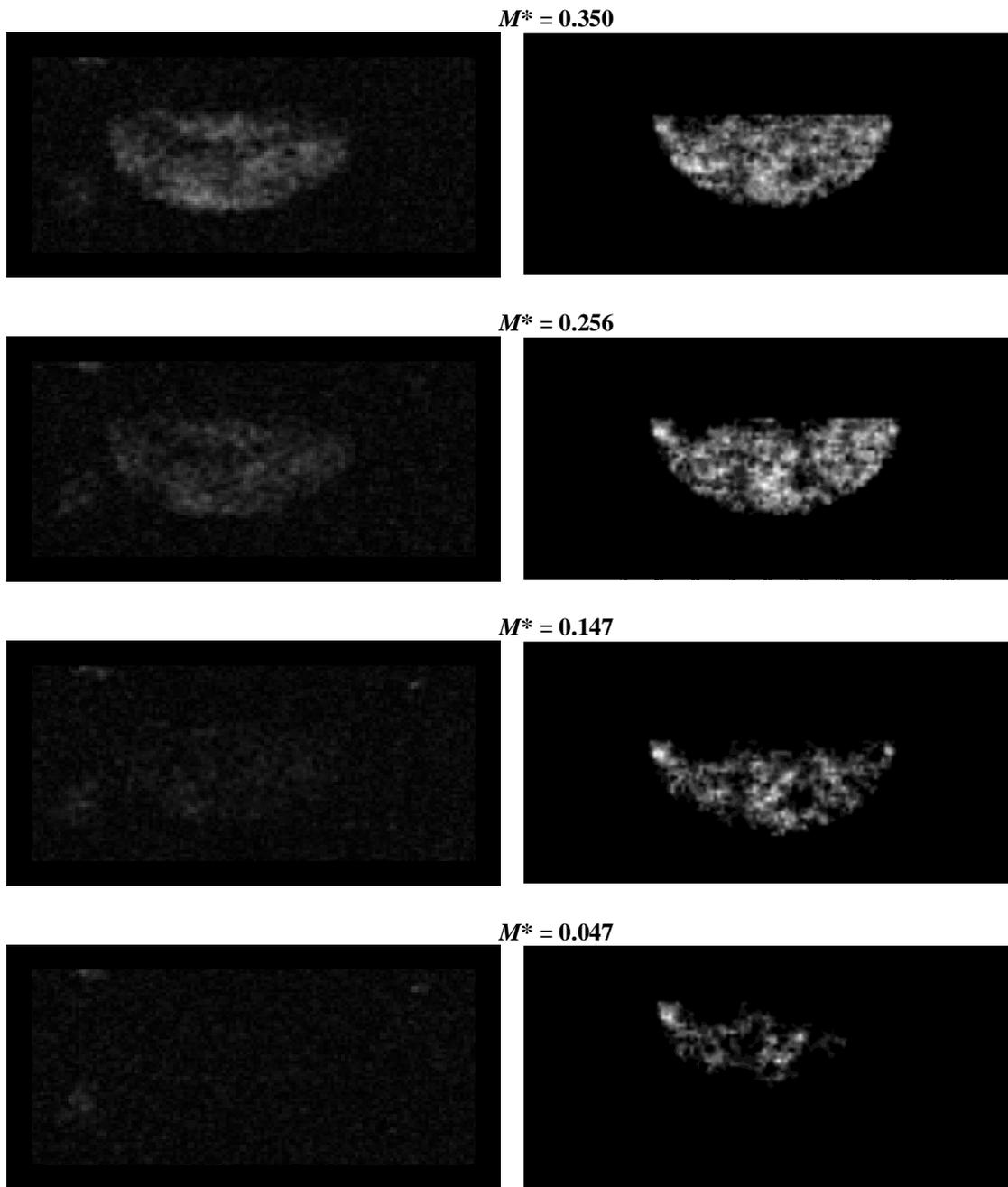


Figura 31 – (continuação)

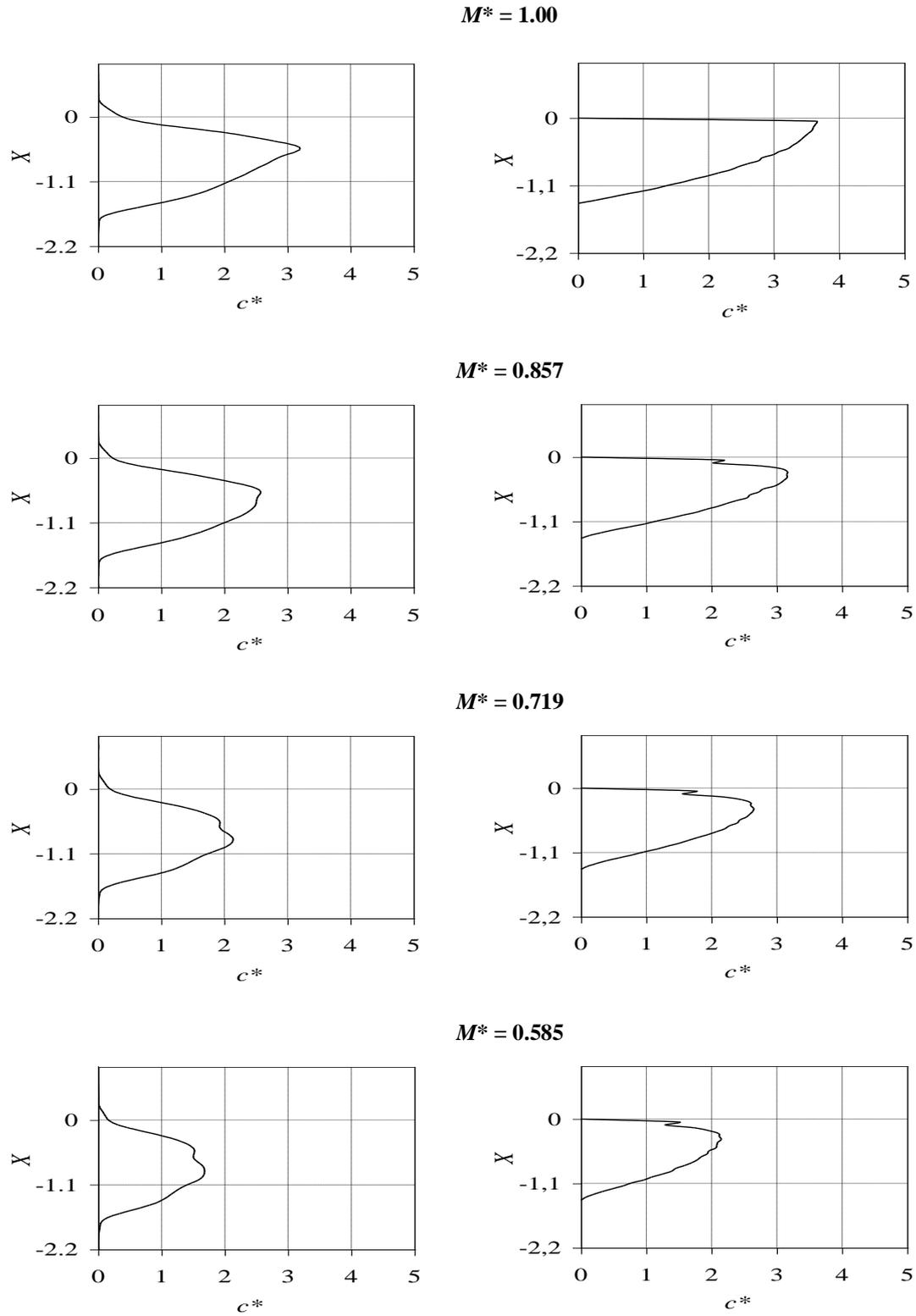


Figura 32 - Evolução no tempo do perfil de concentração de líquido (água) dentro do meio poroso com 120 μm de diâmetro das partículas. Dados experimentais no lado esquerdo (REIS et al, 2003) e simulação no lado direito.

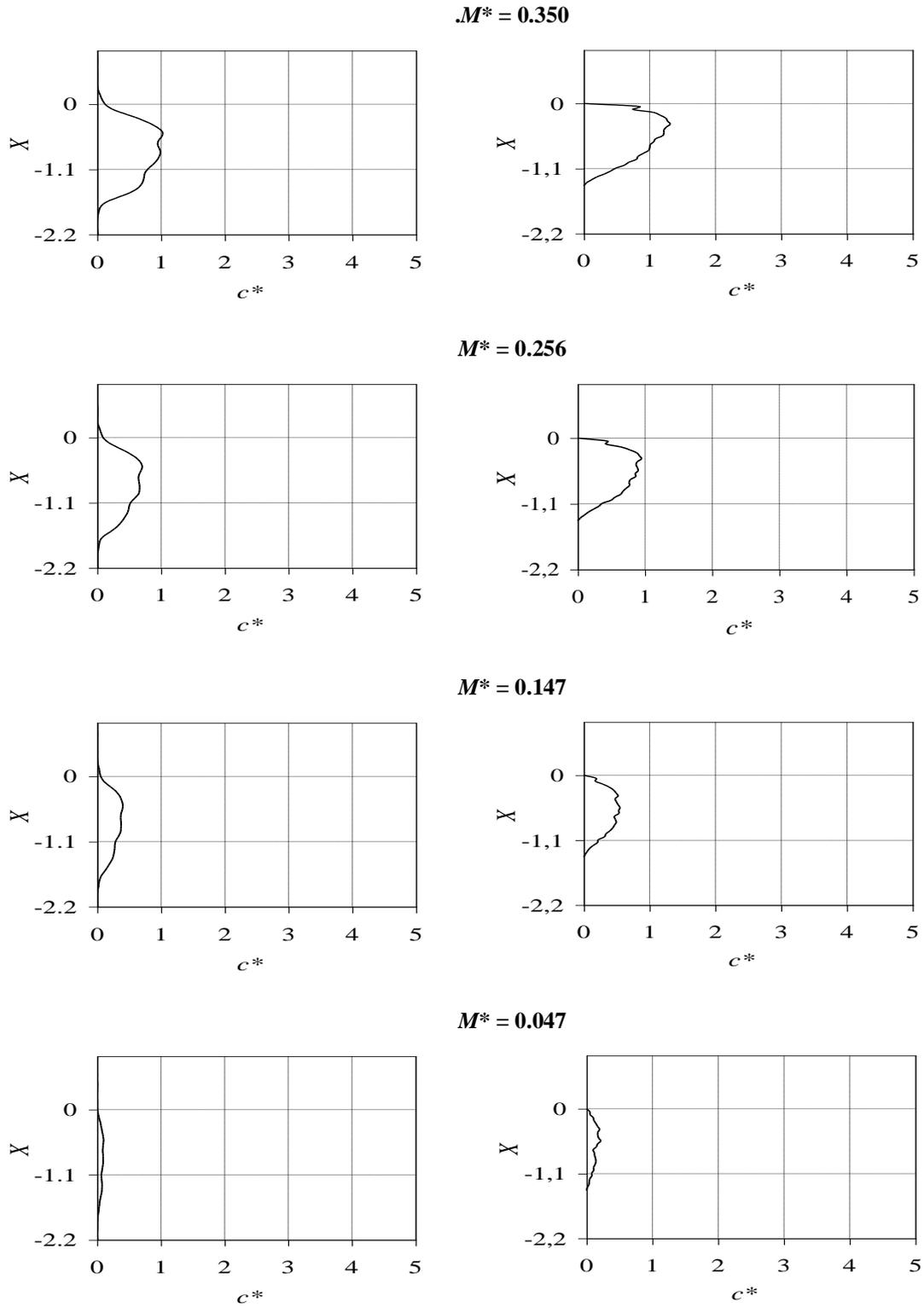


Figura 32 – (continuação)

4.3 CASO 3

O caso desta seção é da evaporação de gota de DEM num meio poroso composto por esferas de vidro com 120 μ m de diâmetro. Os resultados da Figura 34 são calculados com a média de duas rodadas. Os resultados das rodadas foram muito próximos, então não houve grande necessidade de novas simulações. O Computador utilizado foi AMD Athlon 64 3200 + 2.21 GHz com 1,0 GB de RAM e o tempo de processamento ficou em torno de seis dias.

Figura 33 apresenta a comparação entre a distribuição de líquido obtidas experimentalmente e os resultados do modelo. O formato inicial da gota também apresenta uma superfície que não está completamente plana (Figura 33). Reis et al. (2006) citam que o motivo é o mesmo explicado para o caso 2, mas as crateras geradas para o caso do DEM são mais visíveis. Segundo os autores, isso está relacionado ao fato desse líquido ser mais viscoso do que a água, pois pode causar uma maior tensão de cisalhamento na superfície do substrato que aumenta a força de impacto forçando um maior distúrbio nas partículas de vidro.

Reis et al. (2006) comentam que a redução de líquido na superfície é bem nítida nas primeiras imagens da Figura 33, onde também pode se notar que quase não há redução de concentração nas camadas mais inferiores da gota, diferentemente dos casos de água (Casos 1 e 2). As imagens do modelo não representam esse comportamento, observa-se que nos primeiros estágios há uma redução de líquido não só na superfície mais também em todo o contorno da gota inclusive nas camadas mais profundas, sendo que, na superfície a redução é apenas um pouco mais acentuada do que nas demais regiões do contorno.

Nos experimentos, a frente de evaporação não desce até a profundidade total da gota, ela para em torno da metade da profundidade ($M^* = 0.650$), até então, não é possível de se observar a geração de muitas regiões de líquido isoladas, pois nota-se que há grande concentração de líquido nas camadas mais profundas. A partir desse ponto, a evaporação torna se mais homogênea em toda região. As imagens das simulações mostram que no período até $M^* = 0.650$ a frente de evaporação avança vindo de todas as extremidades até o centro formando os

fingers e gerando vários *clusters*. No período seguinte, pode-se visualizar que a secagem passa a ser mais homogênea em toda a gota da mesma forma como ocorre nos experimentos.

Reis et al. (2006), ressaltam que os perfis de concentração apresentam, de forma semelhante às imagens, a redução de líquido na superfície e que o perfil é quase inalterado nas regiões próximas da superfície inferior durante os instantes iniciais. Em contra partida, da mesma maneira como ocorreu com as imagens, os perfis das simulações mostram uma redução da concentração da superfície significativamente menor até o momento $M^* = 0.86$. No decorrer do tempo, até $M^* = 0.65$, a região de maior concentração do perfil continua muito próxima da superfície, não se vê alteração significativa no formato do perfil, enquanto que no perfil experimental o ponto máximo vai se afastando da superfície. Nos instantes posteriores da secagem, o perfil mantém uma redução homogênea em toda região num comportamento semelhante aos dos experimentos.

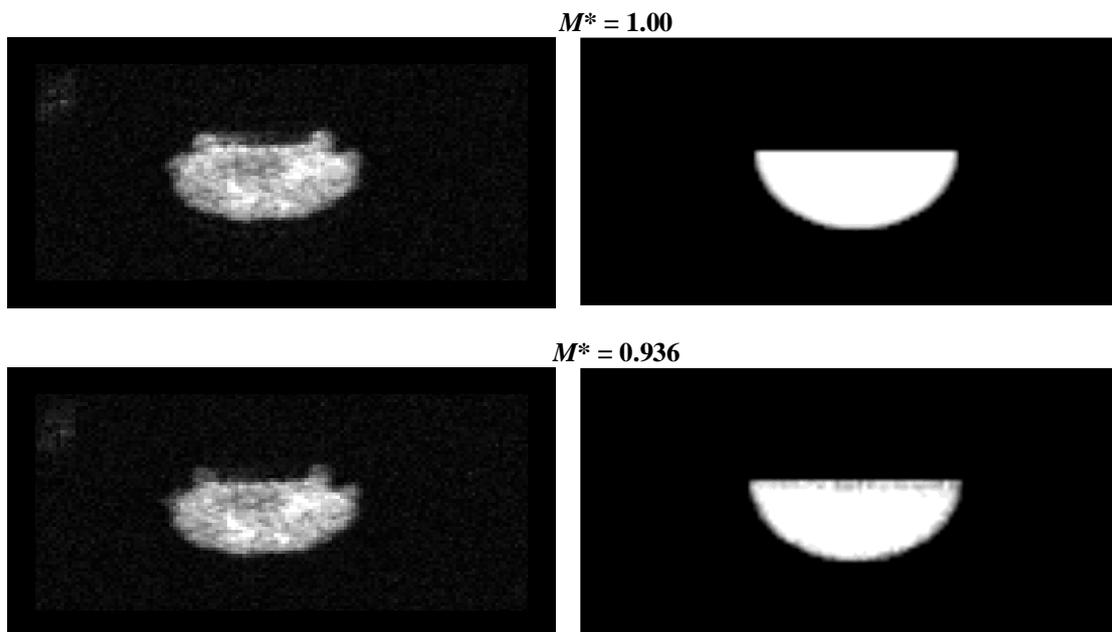


Figura 33 - Evolução no tempo das imagens da gota de (DEM) dentro do meio poroso com $120 \mu\text{m}$ de diâmetro das partículas com v_r igual a 0.0079. Dados experimentais no lado esquerdo (REIS et al, 2006) e simulação no lado direito.

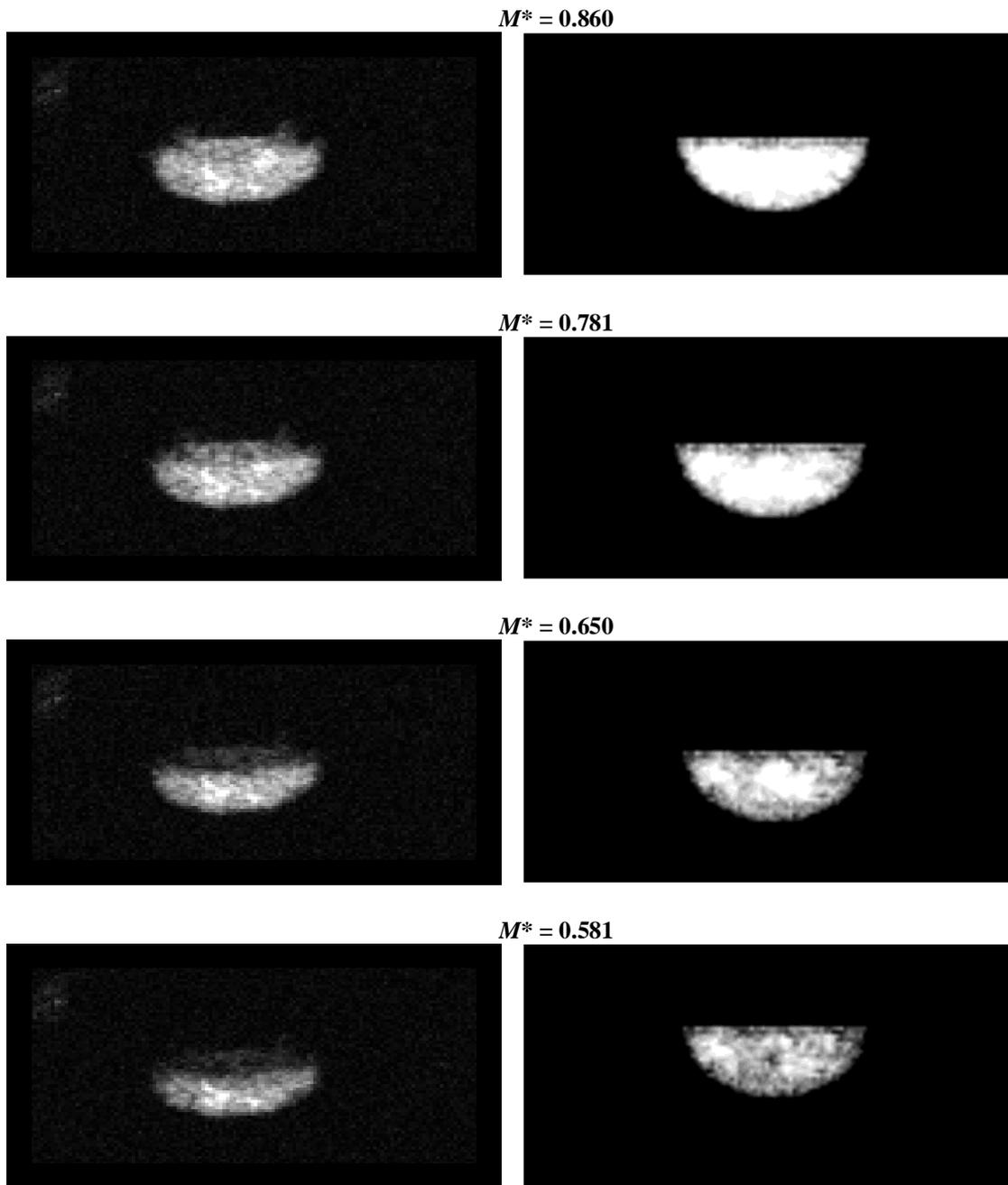


Figura 33 – (continuação)

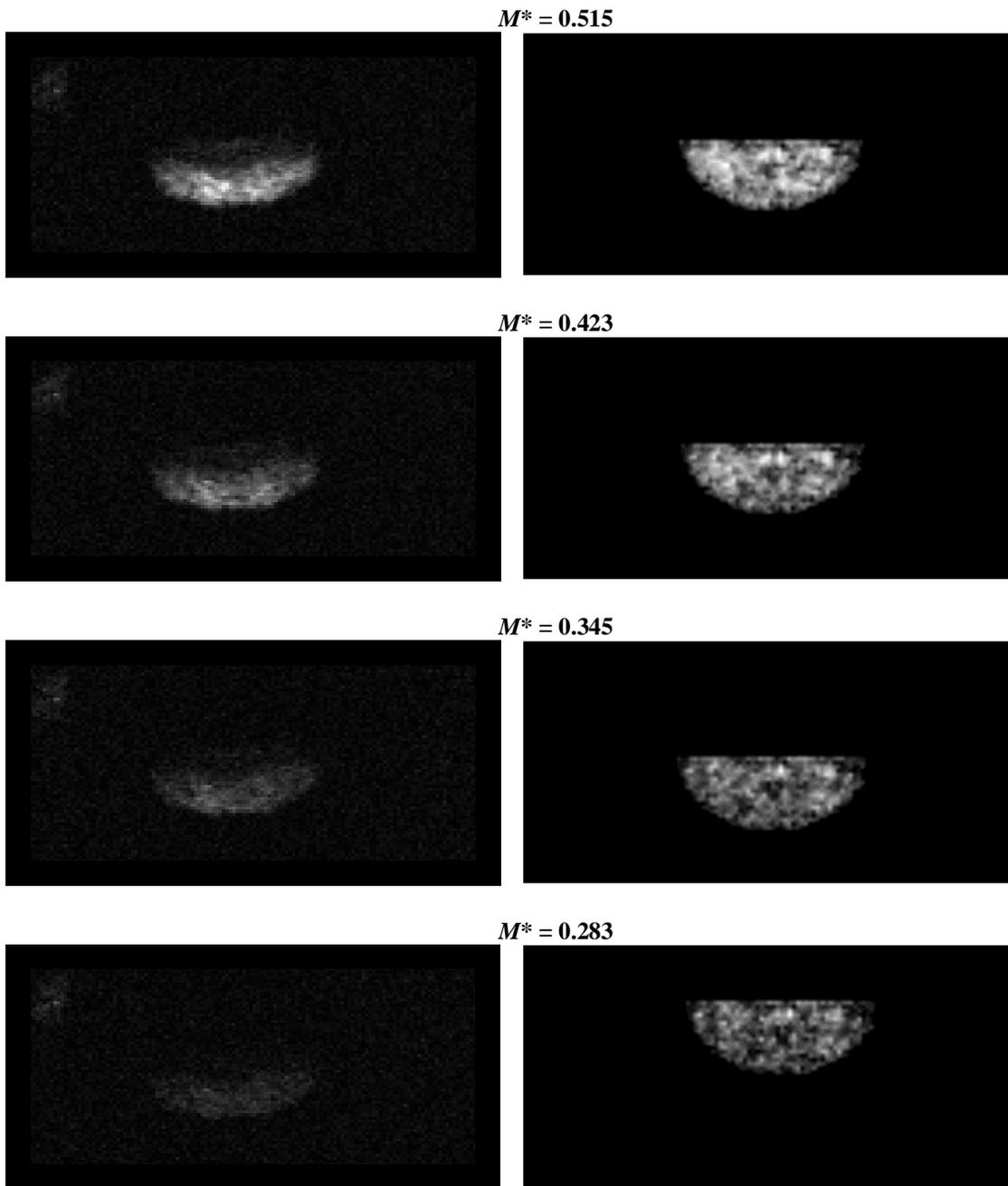


Figura 33 – (continuação)

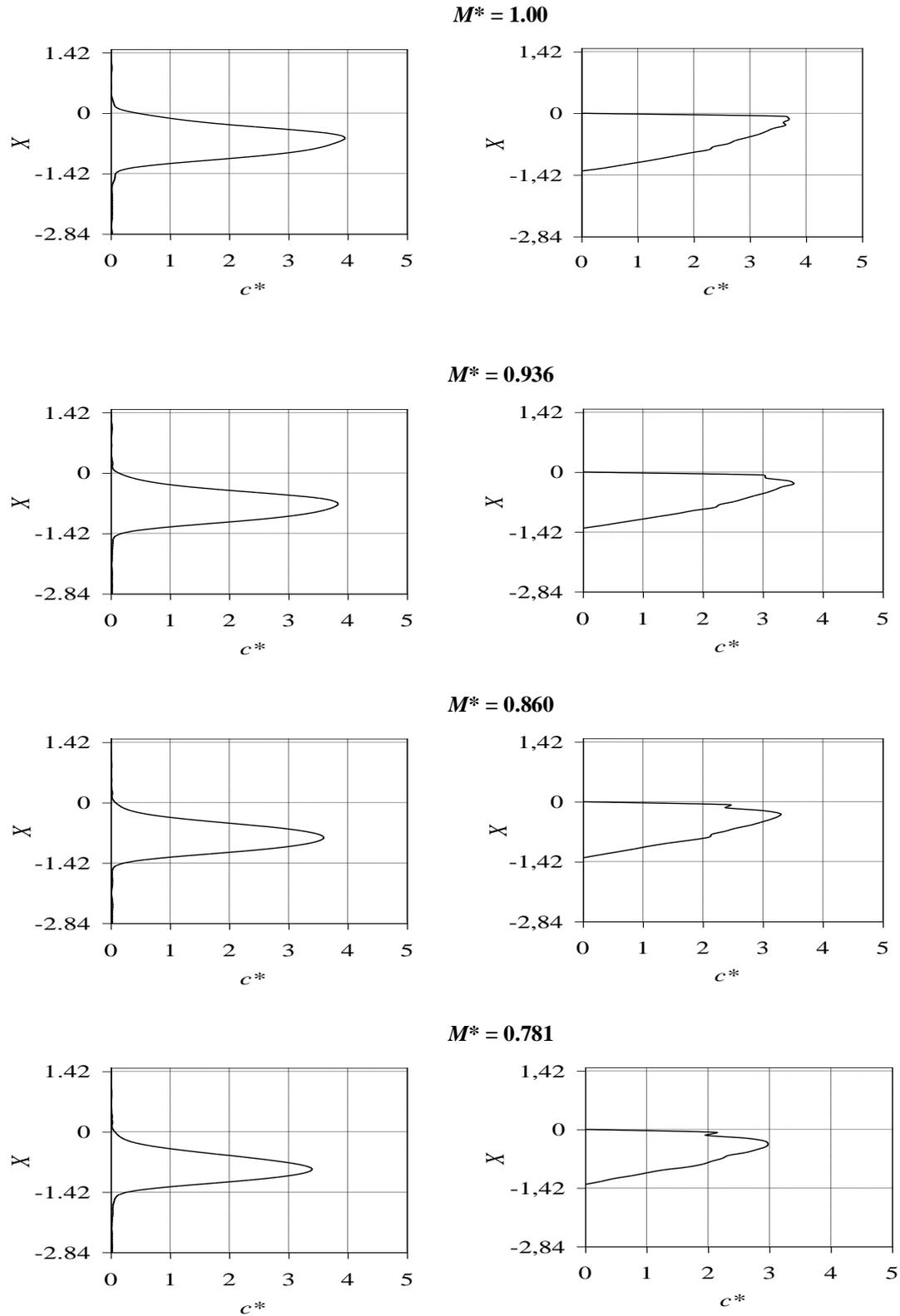


Figura 34 - Evolução no tempo perfil de concentração de líquido (DEM) dentro do meio poroso com 120 μm de diâmetro das partículas e v_r igual a 0.0079. Dados experimentais no lado esquerdo (REIS et al, 2006) e simulação no lado direito.

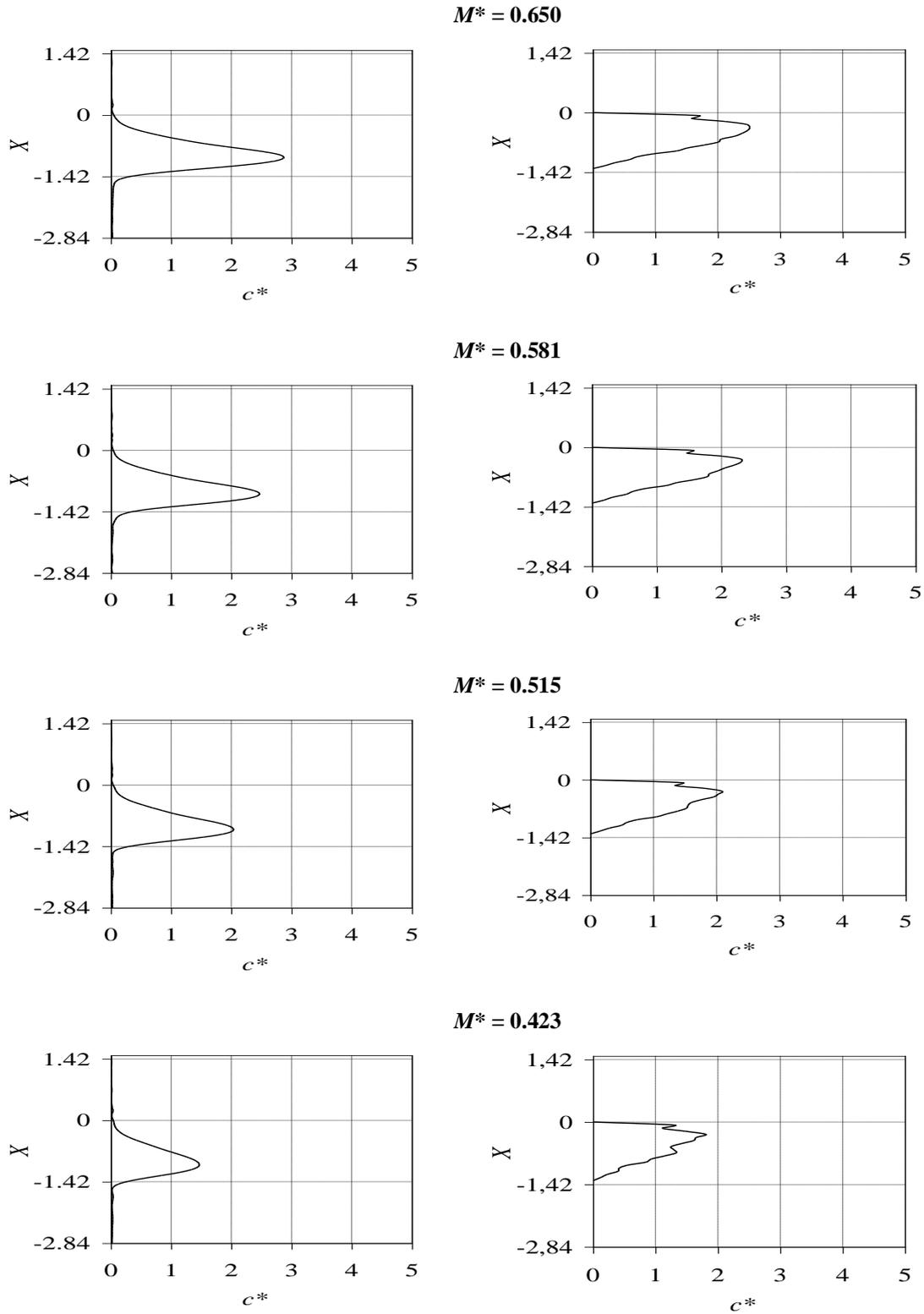


Figura 34 – (continuação)

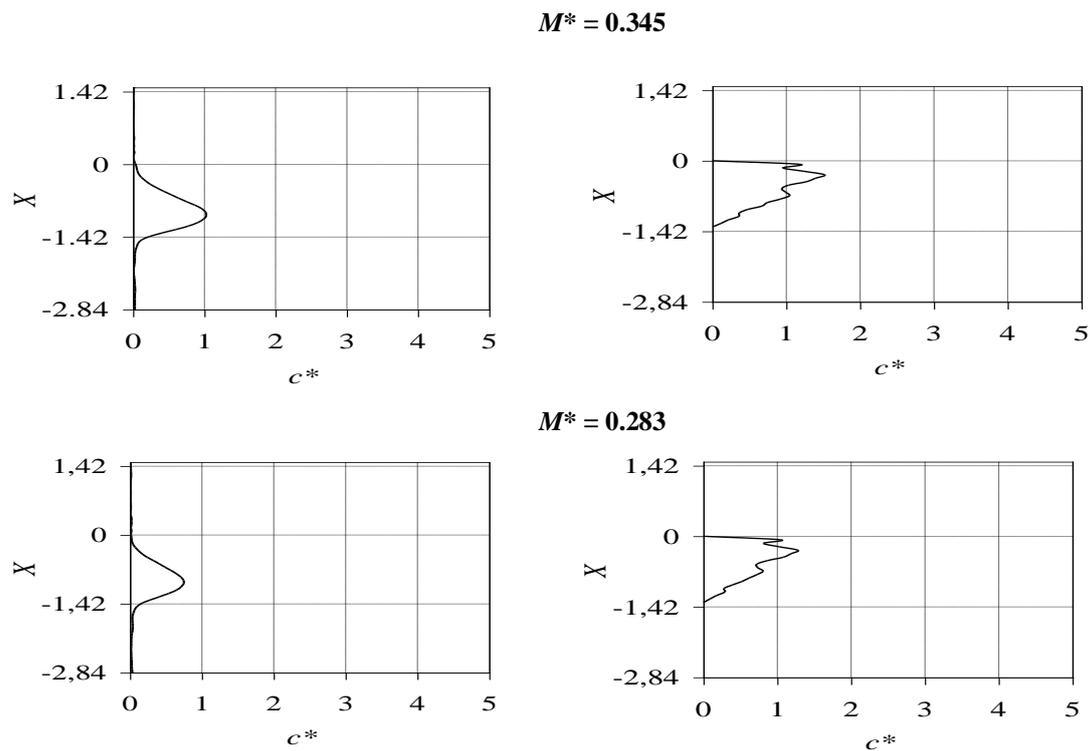


Figura 34 – (continuação)

Diferentemente dos casos anteriores, onde o modelo previu razoavelmente a distribuição de líquido durante o processo de evaporação, existem neste caso significativas discrepâncias entre as distribuições obtidas pelo modelo e os dados experimentais. Neste caso, os dados experimentais apresentam um considerável período caracterizado por uma frente de evaporação que se aprofunda no meio poroso (*receding front*), que não apresenta claramente o padrão fractal característico da percolação.

Os resultados destas simulações podem indicar que os efeitos estabilizantes da gravidade e/ou viscosidade sejam importantes para esta configuração. Entretanto, maiores investigações são necessárias para se chegar a uma conclusão definitiva sobre as causas deste comportamento, pois os experimentos não apresentam diversas repetições da mesma configuração. Além disso, outras configurações testadas não apresentam o mesmo comportamento, com um avanço tão claro de uma frente de evaporação. Em resumo, o comportamento obtido para esta configuração requer maior investigação.

Os comportamentos da redução de M^* (Figura 35) e a variação da taxa de evaporação (Figura 36) do experimento são muito semelhantes aos resultados do experimento do caso 1 (Figura 27 e 29). Percebe-se que a taxa de evaporação apresenta uma pequena queda nos instantes iniciais, mas no período seguinte comporta-se de uma forma mais constante até $T^* = 0.8$. Observa-se neste período, que a curva da Figura 36 apresenta um decaimento linear. A partir de então, a redução da fração mássica passa a ser mais suave como consequência de uma redução mais acentuada da taxa de evaporação que se mantém caindo até a secagem completa da gota. Em contra partida, a taxa de evaporação calculada pelo modelo não apresenta em nenhum momento um período de valor constante, seu comportamento se assemelha muito com os resultados da simulação do caso 1 (Figura 29). Nesse caso, como pode ser visto na Figura 35, a taxa de evaporação tem um aumento muito alto na primeira metade da evaporação, chegando a valores superiores em até em até três vezes o valor da taxa inicial. Da mesma forma como ocorreu na simulação da água. Baseados nos resultados obtidos no caso 1 (ver Figura 30), independentemente do tipo de líquido e diâmetro das partículas de vidro, a taxa de evaporação cresce devido ao aumento da área de líquido exposta para secagem, mas o fato de a taxa ter subido três vezes seu valor inicial, pode estar relacionado à baixa redução de concentração de líquido nas regiões próximas à superfície do meio poroso conforme mostram os gráficos dos perfis de concentração das simulações da Figura 34. Como há uma concentração de líquido maior nas regiões superiores, que são justamente as regiões de maior taxa de evaporação, logo, a taxa de evaporação da gota é extremamente alta neste período. Como consequência, a redução da fração mássica (Figura 35) tem uma variação cada vez maior. Na segunda metade da secagem a redução passa a ser mais gradual até atingir patamares bem suaves devido a redução das taxa de evaporação.

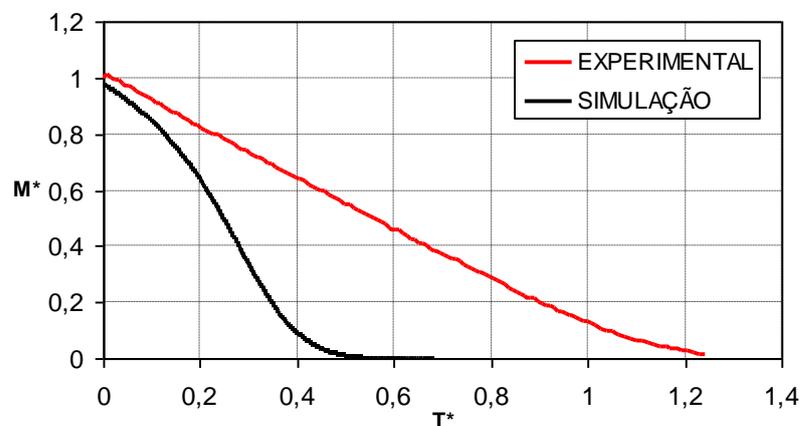


Figura 35 - Fração mássica do líquido remanescente dentro do meio poroso no tempo adimensional para o caso 3.

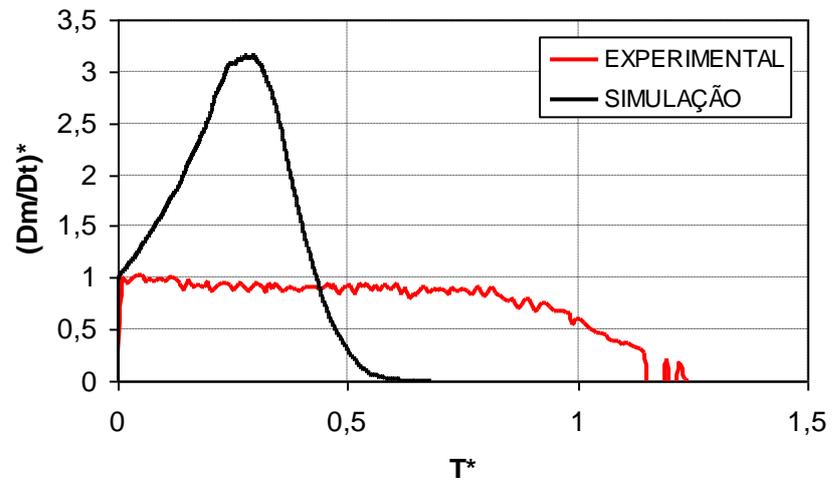


Figura 36 - Variação da taxa de evaporação adimensional da gota no tempo adimensional para o caso 3.

5 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

O presente estudo apresentou um modelo de escala de poros tridimensional para simular a evaporação de gotas em meios porosos baseado no modelo de secagem apresentado por Prat (1993). A avaliação dos resultados foi baseada nos experimentos de Reis et al. (2003) e Reis et al. (2006). No intuito de se avaliar a predição do modelo, foram simuladas três configurações diferentes. Um caso de gota de água evaporando em um meio poroso composto por esferas de vidros com diâmetro de 400 μm , outro com esferas de vidro com diâmetro de 120 μm e um caso com gota de DEM evaporando no mesmo meio poroso composto por esferas de vidro com diâmetro de 120 μm . Sendo que todos estes casos estão expostos a um fluxo de ar na superfície que gera um v_r igual a 0.0079 m/s.

As avaliações dos resultados mostraram que o modelo apresenta uma boa predição em relação a distribuição de líquido durante a secagem da gota de água. O modelo foi capaz de demonstrar os padrões de secagem como a redução inicial da concentração de líquido na superfície, o surgimento dos padrões fractais gerando os *clusters* desconectados e finalizando com um período de evaporação com uma secagem mais homogênea em toda região de líquido da gota, conforme mostrados nos experimentos de Reis et al. (2003).

Em contra partida, para a secagem da gota de DEM, os resultados não foram muito satisfatórios. O modelo mostrou fracamente o período caracterizado por uma frente de evaporação retrocedente, que não apresenta claramente o padrão fractal característico da percolação observado pelos dados experimentais. Somente no período de secagem final que a evaporação comportou-se de forma homogênea relativamente semelhante ao comportamento dos experimentos. Isso pode indicar que nesta configuração pode haver influência dos efeitos viscosos ou gravitacionais. Baseado nos valores mostrados na Tabela 1, o valor de L_g não foi tão distante de L como ocorre com L_{cap} para o DEM, o que sugere uma investigação melhor quanto aos efeitos da gravidade.

As características das taxas de evaporação foram semelhantes entre os casos simulados, porém, diferentes do comportamento apresentados nos experimentos de Reis et al. (2006). A

taxa de evaporação apresentada pelo modelo é caracterizada por um período inicial de forte aumento seguido de uma gradual queda até a secagem final. O aumento da taxa provavelmente está relacionado a dois fatores. Um seria o aumento da área superficial da região saturada de líquido e outro seriam as concentrações de vapor relativamente baixas no interior da matriz porosa, devido à alta eficiência de remoção dos vapores nesta configuração de meio poroso.

Como sugestões para trabalhos futuros, recomenda-se uma melhor investigação na influência das propriedades dos líquidos como viscosidade e tensão superficial, assim como, considerações referentes aos efeitos viscosos e gravitacionais no processo. Isso para que se possa fazer uma melhor análise na diferença do comportamento da distribuição de líquido do DEM.

Visto que a secagem do modelo ocorre de maneira mais rápida do que os experimentos devido a fraca predição da taxa de evaporação, sugere-se a implementação de uma caracterização mais correta do meio poroso, considerando de forma mais real a resistência imposta pelo meio poroso ao transporte de vapor. Além de tudo, deve-se considerar a existência dos filmes de líquido presentes nas paredes das ligações, pois esse é um mecanismo de grande importância no transporte de massa principalmente para secagens dominadas por efeitos capilares, conforme alguns autores da literatura, entre outros Prat(2002), Yiotis(2005), Yiotis et al. (2007) e Prat (2007).

6 REFERÊNCIAS

ALLEBORN, N.; RASZILLIER, H. Spreading and sorption of a droplet on a porous substrate. **Chemical Engineering Science**, v. 59, p. 2071–2088, 2004.

BAINES, W. D.; JAMES, D. F. Evaporation of a droplet on a surface. **Ind. Eng. Chem. Res.**, vol. 33, p. 411-416, 1994.

BLUNT, M. J. Flow in porous media – pore-network models and multiphase flow. **Current Opinion in Colloid & Interface Science**, v. 6, p. 197-207, 2001.

CHINN K. S. K. A simple method for predicting chemical agent evaporation. **U. S. Army Dugway Proving Ground**, Report No. DPG-TR-401, 1981.

COOPER W.A.; EDWARDS L.; HARDAWAY F. H. Vapour/liquid hazards associated with persistent liquid droplets on non-porous surfaces. **U.S. Army Aberdeen Proving Ground**, Report No. ARCSL-TR-82092, 1983.

COOPER W.A.; EDWARDS L.; HARDAWAY F. H. The evaporation of two thickened agent simulants from wet and dry concrete. **U.S. Army Aberdeen Proving Ground**, Report No. CRDEC-TR-86033, 1986.

COOPER W.A.; EDWARDS L.; HARDAWAY F. H. The evaporation of a thickened agent simulants from wet and dry sand. **U.S. Army Aberdeen Proving Ground**, Report No. CRDEC-TR-112, 1990.

DE FREITAS, J.B.; PRAT, M. Pore network simulation of evaporation of a binary liquid from a capillary porous medium. **Transport Porous Med**, v. 40, p. 1-25, 2000.

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, p. 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.; ROBERTS, I. D. Droplet evaporation from porous surfaces, model validation from field and wind tunnel experiments for sand and concrete. **Atmospheric Environment**, v. 33, p. 3531-3549, 1999.

JENSEN J.; VAN BUYTENEN, C. J. P.; MEDEMA J. The prediction of chemical challenge levels from contaminated sand and concrete. **Prins Maurits Laboratory TNO**, Hague, Report No. PML-1991-draft, 1991.

LAURINDO, J.B.; PRAT, M. Numerical and experimental network study of evaporation in capillary porous media. Phase Distributions. **Chem. Eng. Sci.**, v. 51, n. 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.**, v. 53, n. 12, p. 2257-2269, 1998.

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.

LUIKOV, A. V. Heat and mass transfer in capillary-porous bodies. **Pergamon Press**, 1966.

MANTLE, M.; REIS, N. C. Jr.; GRIFFITHS, R. F.; GLADDEN, L. F. MRI Studies of The Evaporation of a Single Liquid Droplet. **Magnetic Resonance Imaging**, v.21, n. 3-4, p. 293-297, 2003.

MONAGHAN, J.; MCPHERSON, W. R. A mathematical model for predicting vapour dosages on and downwind of contaminated areas of glassland. DRES, **Alberta**, Project n. 20-20-32, 1971.

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.** v.17, n.12, p. 1763-1776, 2006.

PASQUILL, F. Memorandum on the persistence of, and vapour concentrations from, C. W. Agents when dispersed on the ground. **CBDE**, Porton Down, Porton Report, n. 2515, 1943.

PHILIP, J. R.; DE VRIES, D.A. Moisture movement in porous materials under temperature gradients. **Trans. Am. Geophys.** n. 38, p. 222-232, 1957.

PRAT, M. Percolation model of drying under isothermal conditions in porous media. **Int. J. Mult. Flow**, v. 19, p. 691-704, 1993.

PRAT, M.; BOULEUX, F. Drying of capillary porous media with stabilized front in two-dimensions. **Phys. Rev.**, v. 60, p. 5647-5656, 1999.

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

REIS, N. C. Jr. **Droplet Impingement and Evaporation from Porous Surfaces**. Tese submetida no Environment Technology Centre do Department 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. Investigation of the Evaporation of Embedded Liquid droplets from porous surfaces using magnetic resonance imaging. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 46, p.1279 - 1292, 2003.

REIS, N. C. Jr.; GRIFFITHS, R. F.; SANTOS, J.M. Numerical simulation of the impact of liquid droplets on porous surfaces. **Journal of Computational Physics**, v 198, p. 747 – 770, 2004.

REIS, N. C. Jr.; MANTLE, M.; GRIFFITHS, R. F.; GLADDEN, L. F.; SANTOS, J.M. 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, 2006.

ROBERTS, I. D.; GRIFFITHS, R. F. A Model for the evaporation of droplets from sand. **Atmospheric Environment**, v. 29, p. 1307-1317, 1995.

ROBERTS, I. D. The evaporation of neat/thickened agent simulant droplets from porous surfaces. **Final report on agreement**, n. 2044/013/CDBE, UMIST, 1996.

RUGGIERO, M.A.G.; LOPES, V.L.R, Cálculo numérico, aspectos teóricos e computacionais. 2ª 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.

WESTIN, S. N.; WINTER, S.; KARLSSON, E.; HIN, A.; OESEBURG, F. On modelling of the evaporation of warfare agents on the ground. **J. Hazardous Materials A**, v. 63, p. 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**, v. 24, p. 439-460, 2001.

YIOTIS, A. G.; TSIMPANOIANNIS, I. N.; STUBOS, A. K.; YORTOSOS, Y. C. The effect of liquid films on the drying of porous media, **AiChE J.**, v. 50, p. 2721-2737, 2004.

YIOTIS, A. G.; TSIMPANOIANNIS, I. N.; STUBOS, A. K.; YORTOSOS, Y. C. Pore-network modeling of isothermal drying in porous media. **Transport Porous Media**, v.58, p. 63-86, 2005.

YIOTIS, A. G.; TSIMPANOIANNIS, I. N.; STUBOS, A. K.; YORTOSOS, 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.; TSIMPANOIANNIS, I. N.; STUBOS, A. K.; YORTOSOS, Y. C. Coupling between external and internal mass transfer during drying of a porous medium. **Water Resource, Res.**, 43, W06403, doi: 10.1029/2006WR005558.