

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

RAFAEL SARTIM

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA EVAPORAÇÃO DE GOTAS EM
MEIOS POROSOS: UMA ABORDAGEM BASEADA EM MODELOS
DE ESCALA DE POROS**

**VITÓRIA
2014**

RAFAEL SARTIM

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA EVAPORAÇÃO DE GOTAS EM
MEIOS POROSOS: UMA ABORDAGEM BASEADA EM MODELOS
DE ESCALA DE POROS**

Tese 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 Doutor em Engenharia Ambiental, na área de concentração em Poluição do Ar.

Orientador: Prof. Dr. Neyval Costa Reis Jr.
Co-Orientadora: Dr^a Elisa Valentim Goulart

**VITÓRIA
2014**

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

S249s Sartim, Rafael, 1980-
Simulação numérica da evaporação de gotas em meios
porosos: uma abordagem baseada em modelos de escala de
poros / Rafael Sartim. – 2014.
180 f. : il.

Orientador: Neyval Costa Reis Junior.
Coorientador: Elisa Valentim Goulart.
Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) – Universidade
Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Materiais porosos. 2. Evaporação. 3. Modelo de escala de
poros. I. Reis Junior, Neyval Costa. II. Goulart, Elisa Valentim. III.
Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Tecnológico. IV.
Título.

CDU: 628

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

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA EVAPORAÇÃO DE GOTAS EM
MEIOS POROSOS: UMA ABORDAGEM BASEADA EM MODELOS
DE ESCALA DE POROS**

RAFAEL SARTIM

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Neyval Costa Reis Jr.
Orientador – DEA/CT/UFES

Dr^a. Elisa Valentim Goulart
Co-Orientadora – DEA/CT/UFES

Prof. Dr. Bruno Augusto Mattar Carciofi
Examinador Externo – UFSC

Prof. Dr Edmilson Dias de Freitas
Examinador Externo - USP

Prof. Dr. Davidson Martins Moreira
Examinador Interno - PPGEA/CT/UFES

Prof^a. Dra. Taciana Toledo de A. Albuquerque
Examinador Interno - PPGEA/CT/UFES

*Aos meus pais, Ademir e Madalena,
aos meus irmãos, Marco e Thaisa
a minha esposa, Teca
e à minha amada filha, Helena.*

AGRADECIMENTOS

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

Ao meu orientador, professor Neyval Costa Reis Júnior, pelo ensinamento e por todo o apoio;

À minha co-orientadora, Dra Elisa Valentim Goulart, pela ajuda, dedicação e confiança;

A minha amiga, Professora Taciana, por toda a atenção, dedicação e principalmente pela motivação e amizade prestada em todos os momentos;

A minha amiga Thayná pelo companheirismo, incentivo e ajuda na elaboração do texto;

Aos colegas do laboratório de Poluição do Ar, em especial ao Elson, Rita e Alexandre;

Aos colegas da ArcelorMittal Tubarão pela força e motivação.

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

RESUMO

O estudo sobre o impacto e a evaporação de gotas de líquidos em superfícies porosas, principalmente de líquidos quimicamente perigosos, é um assunto científico e tecnológico de grande interesse ambiental. Esta classe de problemas pode apresentar restrições ao se tratar o problema físico com uma abordagem macroscópica usualmente empregada na secagem de meios poroso, visto que, a região do meio poroso ocupado pelas 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). Diversos trabalhos científicos são encontrados atualmente na literatura reportando o uso dos “modelos de escala de poros” ou “*pore-scale models*”. Esses modelos representam o transporte de massa em nível microscópico incorporando efeitos da aleatoriedade da matriz porosa sobre o transporte de vapor e líquido durante a mudança de fase. O presente estudo apresentou um modelo computacional baseado no modelo de escala de poros desenvolvido para simular a evaporação de gotas em meios porosos. O transporte de líquido dominado pelas forças capilares é implementado no modelo com base na metodologia da teoria de percolação apresentada por Prat (1993). Os efeitos gravitacionais e viscosos foram considerados e implementados, assim como, a presença do filme de líquido e as distribuições de probabilidade uniforme e exponencial. Os resultados obtidos indicam que os efeitos gravitacionais e viscosos apresentam pequena influência no comportamento dos padrões de secagem. De maneira geral, o modelo de escala de poros sem a inclusão de filmes apresentou melhores resultados quando comparado com o modelo com a inclusão de filme de líquido em todas as simulações.

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

ABSTRACT

The study of the impact and evaporation of liquid droplets on porous surfaces, especially for hazardous chemical compounds, is an important research topic for environmental sciences. This class of problems may pose some limitations for the use of conventional modeling techniques used for drying on porous media, since size of the droplets impinged on the porous media is of the order of a few millimeters ($10^{-3} - 10^{-4}$ m) and the pore size is usually of the order of a few micrometers ($10^{-4} - 10^{-5}$ m). This has motivated the development and use of “*pore-scale models*”, which attempt to simulate the transport and evaporation at the pore scale. This work presents a computational model for the drying of liquid droplets embedded on porous media based on a pore-scale model. The model formulation is based on the work originally proposed by Prat (1993). In order to increase the generality of the model, gravitational and viscous effects were also considered, as well as, the formation of liquid film, as proposed by Yiotis *et al.* (2007). The numerical results indicate that the viscous and gravitational effects are not really relevant for this class of problems. In general, the results obtained by the model without the presence of liquid films is in better agreement with experimental data than the results obtained by the model with the presence of liquid films.

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

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1.1 – Distribuições log-normal avaliadas por Segura e Todelo (2005), com tamanho médio das ligações de 150 μm , com limites máximo e mínimo de 300 μm e 50 μm , respectivamente. A curva (a) com de desvio padrão de 10 μm , (b) 30 μm e (c) 80 μm . Fonte: Segura e Todelo (2005)..... 28
- Figura 1.2 – Representação esquemática (a) da formação de um filme de líquido entre a região completamente saturada de líquido e a região seca, e (b) da representação da evaporação em modelos de escala de poros sem representar a formação do filme de líquido (adaptado de PRAT, 2007)..... 29
- Figura 2.1 - Representação esquemática da evaporação da matriz porosa e a formação dos clusters (YIOTIS *et al.*, 2006)..... 34
- Figura 2.2- Distribuição de fase (a) 98%, (b) 95%, (c) 86%, (d) 75%, (e) 67%, (f) 39%, (g) 11%. Nos instantes (a), (b), (c) e (d) os poros vazios estão na cor branca, os cheios de líquido estão nas cores cinza, azul e preto nos instantes. Nos instantes (e), (f) e (g) os poros vazios estão nas cores branca e cinza e os cheios de líquido estão nas cores azul e preto nos instantes. Não há transferência de massa pelas laterais e o fundo. O vapor escapa pelo topo da matriz porosa. Os efeitos capilares são dominantes (METZGER e TSOTSAS, 2008). ... 35
- Figura 2.3- Resultados experimentais da distribuição de fase. Fase líquida em preto e fase gasosa em branco. (a) caso sem efeitos gravitacionais, (b) caso com a gravidade estabilizando a frente de secagem e (c) gravidade desestabilizando a frente de secagem. Superfície superior da matriz porosa esta em cima para os casos (a) e (b) e na parte de baixo para o caso (c). A sequencia de secagem esta das figuras de baixo para cima (Laurindo e Prat, 2006). 36
- Figura 2.4- Diagrama de fase de secagem na ausência dos efeitos dos gradientes térmicos (PLOURDE; PRAT, 2003)..... 37
- Figura 2.5 - Perfis do raios de curvatura do filme normalizado para (a) $Ca_f = 10^{-4}$ e (b) $Ca_f = 1$ em dois instantes diferentes do processo de secagem. Os poros cheios estão na cor preta e na cor azul a região completamente vazia. (YIOTIS *et al.*, 2005..... 39
- Figura 2.6 - Desenho esquemático do filme de líquido presente durante a evaporação em um tubo capilar de seção transversal quadrada (PRAT, 2011). 40

Figura 2.7 - Comportamento da taxa de evaporação durante a secagem em um tubo capilar de seção transversal quadrada obtido no trabalho de Chauvet et al. (2009); d é o comprimento da lateral do tubo, Z_0 é a posição do menisco ao longo do comprimento do tubo, E é o fluxo de evaporação, C_e é a concentração de saturação do vapor na interfase líquido/gás e D é o coeficiente molecular. (PRAT, 2011).	41
Figura 2.8 - Simulação da evolução temporal do formato de uma gota de líquido 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. (REIS <i>et al.</i> , 2000).	42
Figura 2.9 - 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 400 μ m). Regiões claras indicam a presença de líquido e a superfície plana na parte superior da gota representa a interface meio poroso/atmosfera (REIS <i>et al.</i> , 2003).	43
Figura 2.10 - 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 μ m 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 <i>et al.</i> , 2003).	44
Figura 2.11 - Gráfico da taxa de evaporação adimensional vs. Tempo adimensional da evaporação 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 μ m de diâmetro). (REIS <i>et al.</i> , 2003).	44
Figura 2.12 - Representação esquemática da média do volume (REIS, 2000).	46
Figura 2.13 - 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. (Sartim, 2007).	46
Figura 2.14 - Representação esquemática de uma evaporação de gota durante o período de secagem (ROBERTS e GRIFFITHS, 1999).	48
Figura 2.15 - Esquemático das configurações para os três casos estudados por Laurindo e Prat (1996).	53

Figura 2.16 - 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).	54
Figura 2.17 - Curvas de secagem dos experimentos e simulações. S é a concentração do líquido e t o tempo em horas. (PRAT, 2007).	56
Figura 3.1 - 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 <i>et al.</i> , 2001).	60
Figura 3.2 - Representação esquemática dos tipos de poros	61
Figura 3.3 - <i>Clusters</i> principal e desconectados. (Yiotis <i>et al.</i> , 2001) Curvas de secagem dos experimentos e simulações. S é a concentração do líquido e t o tempo em horas. (PRAT, 2007).	63
Figura 3.4 - Modelo 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	65
Figura 3.5 - Representação esquemática dos padrões das fases líquido e gasosa, indicando os poros e suas características durante a secagem. (YIOTIS, 2005)	71
Figura 3.6 - Representação esquemática de uma matriz porosa. (a) Meio poroso composto por partículas esféricas (b) interstício da matriz	72
Figura 3.7 - Representação esquemática dos filmes de líquido ao longo das quinas de uma ligação entre poros. (Yiotis et al., 2005) Representação esquemática dos tipos de poros	73
Figura 3.8 - Representação esquemática do raio de curvatura dos filmes de líquido ao longo das quinas de uma ligação entre poros. (YIOTIS <i>et al.</i> , 2005)	73
Figura 3.9 - Representação esquemática do balanço de massa ao longo do escoamento no filme	77
Figura 3.10 - Compactação das esferas com a formação dos poros. (a) Compactação cúbica ($\vartheta=90^\circ$). (b) Compactação hexagonal ($\vartheta=60^\circ$).	83

Figura 3.11 - Representação esquemática da geometria determinando os poros com partículas perfeitamente esféricas. (a) Compactação cúbica. (b) Compactação hexagonal (LUIKOV, 1966.....	83
Figura 3.12 - 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).	87
Figura 3.13 - Visão lateral da imagem do líquido logo após absorção no substrato e o correspondente perfil de concentração de líquido (REIS et al, 2003.....	88
Figura 3.14 - Definição do fator de espalhamento (R^*) e da profundidade de penetração (H^*). Fonte: Reis (2000).	92
Figura 3.15 - (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 (REIS, 2000).	93
Figura 3.16 – Perfil de concentração de líquido típico de uma gota. Reis <i>et al.</i> (2003).....	95
Figura 4.1 - Evolução temporal das imagens 2D da gota de água dentro do meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de 400 μ m. Simulação no lado esquerdo e dados experimentais no lado direito (REIS <i>et al.</i> , 2003).	101
Figura 4.2 - Evolução temporal do perfil de concentração de líquido da gota de água dentro do meio poroso com 400 μ m de diâmetro das partículas. A curva na cor preta é referente aos dados experimentais (REIS <i>et al.</i> , 2003) e as curvas nas cores vermelha e verde são os resultados das simulações para o caso sem o filme e com o filme respectivamente. O eixo X^* representa a profundidade da gota adimensional e o eixo c^* é a concentração adimensional de líquido	103
Figura 4.3 - Evolução no tempo da concentração de vapor (C_v^*) dentro do meio poroso para a simulação da gota de água sem a presença do filme. Vista do plano central da matriz (101x42x101) mostrando apenas a região de 25 a 75 na largura e -1 a -35 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho.	105

Figura 4.4 – Concentração adimensional de massa de líquido no tempo adimensional para o caso da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de 400µm. (Linha vermelha concentração de líquido da simulação da gota sem o filme, linha verde concentração de líquido da simulação da gota com o filme, linha amarela concentração de líquido do filme da simulação da gota com o filme, linha azul concentração de líquido do cluster da simulação da gota com o filme, linha preta concentração de líquido do resultado experimental e linha preta tracejada a região de fração mássica com 4,9% da massa inicial do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003) 107

Figura 4.5 – Taxa de evaporação adimensional no tempo adimensional para da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de 400µm. (Linha vermelha taxa de evaporação da simulação da gota sem o filme, linha verde taxa de evaporação da simulação da gota com o filme, linha amarela taxa de evaporação do filme da simulação da gota com o filme, linha preta taxa de evaporação do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003)..... 108

Figura 4.6 - Evolução temporal do perfil de concentração de líquido da gota de água dentro do meio poroso com 400 µm de diâmetro das partículas. A curva na cor preta é referente aos dados experimentais (REIS *et al.*, 2003) e as curvas nas cores vermelha e verde são os resultados das simulações para o caso sem o filme e com o filme respectivamente. O eixo x^* representa a profundidade da gota adimensional e o eixo c^* é a concentração adimensional de líquido. 112

Figura 4.7 – Isolinhas do valor de R_f^* do filme dentro do meio poroso para a simulação da gota de água com a presença do filme. Vista do plano central da matriz (142x72x142) mostrando apenas a região de 40 a 100 na largura e -1 a -40 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho. 114

Figura 4.8 - Evolução no tempo da concentração de vapor (C_v^*) dentro do meio poroso para a simulação da gota de água com a presença do filme. Vista do plano central da matriz (142x72x142) mostrando apenas a região de 20 a 120 na largura e -1 a -60 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho e a região onde existe filme esta delimitada em azul 116

Figura 4.9 – Concentração adimensional de massa de líquido no tempo adimensional para o caso da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de 400µm. (Linha vermelha concentração de líquido da simulação da gota sem o filme, linha verde concentração de líquido da simulação da gota com o filme, linha amarela concentração de líquido do filme da simulação da gota com o filme, linha azul concentração de líquido do cluster da simulação da gota com o filme, linha preta concentração de líquido do resultado experimental e linha preta tracejada a região de fração mássica com 4,9% da massa inicial do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003)..... 119

Figura 4.10 – Taxa de evaporação adimensional no tempo adimensional para da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de 400 μ m. (Linha vermelha taxa de evaporação da simulação da gota sem o filme, linha verde taxa de evaporação da simulação da gota com o filme, linha amarela taxa de evaporação do filme da simulação da gota com o filme, linha preta taxa de evaporação do resultado experimental, REIS *et al*, 2003)..... 119

Figura 4.11 - Evolução temporal do perfil de concentração de líquido da gota de água com a presença do filme dentro do meio poroso com 400 μ m de diâmetro das partículas. A curva na cor preta é referente aos dados experimentais (REIS *et al.*, 2003) e as curvas nas cores vermelha, verde e laranja são os resultados das simulações com os valores de β igual a 1,0e5, 3,5e5 e 6,0e5, respectivamente. O eixo x^* representa a profundidade da gota adimensional e o eixo c^* é a concentração adimensional de líquido 121

Figura 4.12 - Evolução temporal da área ocupada pelo filme da gota de água dentro do meio poroso composto por partículas com 400 μ m de diâmetro. A curva na cor azul é referente a simulação com β igual a 1,0e5 e as curvas nas cores verde e laranja são os resultados das simulações com os valores de β igual a 3,5e5 e 6,0e5, respectivamente. Vista do plano central da matriz (142x72x142) mostrando apenas a região de 20 a 120 na largura e -1 a- 60 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho 122

Figura 4.13 – Concentração adimensional de massa de líquido no tempo adimensional para o caso da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de 400 μ m. (A curva na cor vermelha é referente a simulação com β igual a 1,0e5 e as curvas nas cores verde e azul são os resultados das simulações com os valores de β igual a 3,5e5 e 6,0e5, respectivamente. A linha preta é referente ao resultado experimental e linha preta tracejada a região de fração mássica com 4,9% da massa inicial do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003). 124

Figura 4.14 – Taxa de evaporação adimensional no tempo adimensional para da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de 400 μ m. (A curva na cor vermelha é referente a simulação com β igual a 1,0e5 e as curvas nas cores verde e azul são os resultados das simulações com os valores de β igual a 3,5e5 e 6,0e5, respectivamente. A linha preta é referente ao resultado experimental de REIS *et al.*, 2003)..... 125

Figura 4.15 - Evolução temporal do perfil de concentração de líquido da gota de água dentro do meio poroso com 400 μ m de diâmetro das partículas. A curva na cor preta é referente aos dados experimentais (REIS *et al.*, 2003) e as curvas nas cores vermelha e verde são os resultados das simulações para o caso sem o filme e com o filme respectivamente. O eixo x^* representa a profundidade da gota adimensional e o eixo c^* é a concentração adimensional de líquido. 127

Figura 4.16 – Concentração adimensional de massa de líquido no tempo adimensional para o caso da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de 400 μ m. (Linha vermelha concentração de líquido da simulação da gota sem o filme, linha verde concentração de líquido da simulação da gota com o filme, linha amarela concentração de líquido do filme da simulação da gota com o filme, linha azul concentração de líquido do cluster da simulação da gota com o filme, linha preta concentração de líquido do resultado experimental e linha preta tracejada a região de fração mássica com 4,9% da massa inicial do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003)..... 129

Figura 4.17 – Taxa de evaporação adimensional no tempo adimensional para da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de 400 μ m. (Linha vermelha taxa de evaporação da simulação da gota sem o filme, linha verde taxa de evaporação da simulação da gota com o filme, linha amarela taxa de evaporação do filme da simulação da gota com o filme, linha preta taxa de evaporação do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003)..... 130

Figura 4.18 - Evolução temporal das imagens da gota de água dentro do meio poroso com esferas de vidro de 120 μ m de diâmetro. (a) Imagem 2D obtida com uso de NRM e (b) perfil de concentração de líquido (REIS *et al.*, 2003)..... 131

Figura 4.19 - Evolução no tempo das imagens 2D da gota de água dentro do meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de 120 μ m. Simulação no lado direito e dados experimentais no lado esquerdo (REIS *et al.*, 2003)..... 133

Figura 4.20 - Evolução no tempo do perfil de concentração de líquido da gota de água dentro do meio poroso de esferas de vidro com 120 μ m de diâmetro. A curva na cor preta é referente aos dados experimentais (REIS *et al.*, 2003) e as curvas nas cores vermelha e verde são os resultados das simulações para o caso sem o filme e com o filme, respectivamente. O eixo x^* representa a profundidade da gota e o eixo c^* é a concentração adimensional de líquido 136

Figura 4.21 – Isolinhas do valor de R_f^* do filme dentro do meio poroso para a simulação da gota de água com a presença do filme. Vista do plano central da matriz (132x102x132) mostrando apenas a região de 1 a 80 na largura e -1 a -80 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho..... 137

Figura 4.22 - Evolução no tempo da concentração de vapor (C_v^*) dentro do meio poroso para a simulação da gota de água com a presença do filme. Vista do plano central da matriz (132x102x132) mostrando apenas a região de 1 a 90 na largura e -1 a -80 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho e a região onde existe filme está delimitada em azul. 139

Figura 4.23 - Evolução no tempo da concentração de vapor (C_v^*) dentro do meio poroso para a simulação da gota de água sem a presença do filme. Vista do plano central da matriz (132x102x132) mostrando apenas a região de 1 a 90 na largura e -1 a -80 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho 142

Figura 4.24 – Concentração adimensional de massa de líquido no tempo adimensional para o caso da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de 120 μ m. (Linha vermelha concentração de líquido da simulação da gota sem o filme, linha verde concentração de líquido da simulação da gota com o filme e linha preta concentração de líquido do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003)..... 144

Figura 4.25 – Taxa de evaporação adimensional no tempo adimensional para da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de 400 μ m. (Linha vermelha taxa de evaporação da simulação da gota sem o filme, linha verde taxa de evaporação da simulação da gota com o filme e linha preta taxa de evaporação do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003)..... 144

Figura 4.26 - Evolução temporal das imagens da gota de água dentro do meio poroso com partículas de areia de 180 μ m de diâmetro. (a) Imagem 2D obtida com uso de NRM e (b) perfil de concentração de líquido (REIS *et al.*, 2003)..... 143

Figura 4.27 - Evolução temporal das imagens 2D da gota de água dentro do meio poroso de partículas de areia com diâmetro de 180 μ m. Simulação no lado esquerdo e dados experimentais no lado direito (REIS *et al.*, 2003). 148

Figura 4.28 - Evolução temporal do perfil de concentração de líquido da gota de água dentro do meio poroso de partículas de areia com 180 μ m de diâmetro. No gráfico à esquerda, a curva na cor preta é referente aos dados experimentais (REIS *et al.*, 2003) e as curvas nas cores vermelha e verde são os resultados das simulações para o caso sem o filme e com o filme, respectivamente. No gráfico à direita, a curva na cor preta é mesmo resultado experimental (REIS *et al.*, 2003) mostrado no gráfico à esquerda, em amarelo a curva do perfil de concentração de líquido presente no filme e em azul o perfil de concentração do cluster (poros cheios). O eixo X^* representa a profundidade da gota em milímetros e o eixo c^* é a concentração adimensional de líquido..... 150

Figura 4.29– Isolinhas do valor de R_f^* do filme dentro do meio poroso para a simulação da gota de água com a presença do filme. Vista do plano central da matriz (86x60x86) mostrando apenas a região de 1 a 90 na largura e -1 a -90 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho..... 152

Figura 4.30- Evolução temporal da concentração de vapor (C_v^*) dentro do meio poroso para a simulação da gota de água em um meio poroso de partículas de areia. O resultado da simulação com a presença do filme esta a esquerda e a direita o resultado da simulação sem filme. Vista do plano central da matriz (86x60x86) mostrando apenas a região de 1 a 90 na largura e -1 a -90 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho e a região onde existe filme está delimitada em azul. 3.14 - Definição do Fator de espalhamento (R^*) e da profundidade de penetração (H^*). Fonte: Reis (2000). 154

Figura 4.31 – Concentração adimensional de massa de líquido no tempo adimensional para o caso da gota de água em meio poroso de partículas de areia. (Linha verde taxa de evaporação da simulação da gota com o filme e linha preta resultado experimental, REIS *et al.*, 2003). 156

Figura 4.32 – Taxa de evaporação adimensional no tempo adimensional para o caso da gota de água em meio poroso de partículas de areia com 180 μm de diâmetro. (Linha verde taxa de evaporação da simulação da gota com o filme e linha preta resultado experimental, REIS *et al.*, 2003). 157

Figura 4.33 - Evolução no tempo das imagens da gota de DEM dentro do meio poroso de esferas de vidro com 120 μm de diâmetro. (a) Imagem 2D obtida com uso de NRM e (b) perfil de concentração de líquido (REIS *et al.*, 2003) e simulação lado direito. 158

Figura 4.34 - Evolução temporal das imagens 2D da gota de DEM dentro do meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de 120 μm . Simulação no lado esquerdo e dados experimentais no lado direito (REIS *et al.*, 2006). 159

Figura 4.35 - Evolução temporal do perfil de concentração de líquido da gota de DEM dentro do meio poroso com 120 μm de diâmetro das partículas. A curva na cor preta é referente aos dados experimentais (REIS *et al.*, 2006) e as curvas nas cores vermelha e verde são os resultados das simulações para o caso sem o filme e com o filme respectivamente. O eixo x^* representa a profundidade da gota adimensional e o eixo c^* é a concentração adimensional de líquido 162

Figura 4.36 – Evolução temporal da concentração de vapor dentro do meio poroso para a simulação da gota de água em um meio poroso de partículas de areia. O resultado da simulação com a presença do filme esta a esquerda e a direita o resultado da simulação sem filme. Vista do plano central da matriz (125x126x125) mostrando apenas a região de 1 a 90 na largura e -1 a -90 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho e a região onde existe filme está delimitada em azul 164

Figura 4.37 – Concentração adimensional de massa de líquido no tempo adimensional para o caso da gota de DEM em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $120\mu\text{m}$. (Linha vermelha concentração de líquido da simulação da gota sem o filme, linha verde concentração de líquido da simulação da gota com o filme, linha amarela concentração de líquido do filme da simulação da gota com o filme, linha azul concentração de líquido do cluster da simulação da gota com o filme, linha preta concentração de líquido do resultado experimental e linha preta tracejada desvio do valor da concentração de líquido do resultado experimental, REIS *et al.*, 2006). 170

Figura 4.38 – Taxa de evaporação adimensional no tempo adimensional para o caso da gota de DEM em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $120\mu\text{m}$. (Linha vermelha taxa de evaporação da simulação da gota sem o filme, linha verde taxa de evaporação da simulação da gota com o filme, linha amarela taxa de evaporação do filme da simulação da gota com o filme, linha roxa taxa de evaporação do resultado experimental e Lina preta filtro da tendência da linha roxa, REIS *et al.*, 2006)..... 171

LISTA DE TABELAS

TABELA 3.1 - Determinação do raio do poro para cada tipo de arranjo.....	84
TABELA 3.2 - Valores de R^* e H^* obtidos nos experimentos de Reis (2000)	93
TABELA 4.1 – Sumário das configurações experimentais dos quatro configurações estudados	97
TABELA 4.2 – Propriedades físicas dos líquidos utilizados nas simulações para uma temperatura de 18°C (REIS <i>et al.</i> , 2003; REIS <i>et al.</i> , 2006).....	97

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
DEM	Dietil malonato
IPR	Teoria de percolação ou <i>Invasion Percolation Rule</i>
SOR	<i>Successive-Overrelaxation</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras romanas

2D	Bidimensional
3D	Tridimensional
A_0	Área característica da gota antes de cair no solo [m^2]
B	Número de Bond
c	Concentração de líquido expressa em [kg/m]
c_0	Concentração de característica de líquido [kg/m]
c_{sat}	Concentração de saturação de líquido em um meio poroso [kg/m^3]
C^*	Concentração de líquido adimensional
C_∞	Umidade específica do fluxo característico externo
C_a	Número capilar
Ca_F	Número capilar do filme
C	Concentração de vapor no poro [kg/m^3]
C_r	Concentração de vapor na altura de referência acima da superfície [kg/m^3]
C_w	Umidade específica na superfície do meio poroso
C_V^*	Concentração de vapor adimensional
C_V	Concentração de vapor [kg/m^3]
C_{Vsat}	Concentração de saturação de vapor [kg/m^3]
e	Densidade média do fluxo de massa evaporada [$Kg/m^2/s$]
E_e	Fluxo externo [kg/s]
F	Fluxo de vapor entre poros [kg/s]
g	Aceleração da gravidade [m/s^2]
h	Comprimento do lado do arranjo forma pela compactação das partículas do meio poroso [m]
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 [m]
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]
M^*	Fração mássica de líquido
P_g	Pressão do gás
P_l	Pressão do líquido
Per	Perímetro molhado
Q	Fluxo de líquido entre dois poros
r_0	Raio da gota antes do impacto no solo [m]
r_{gota}	Raio da gota após absorção no meio poroso [m]
r	Raio da ligação entre dois poros [m]
\bar{r}	Raio médio dos poros [m]
r_p	Raio do diâmetro do respectivo poro da superfície [m]
R^*	Fator de espalhamento
R	Raio de curvatura do filme ao longo da ligação [m]
R_0	Raio de curvatura do filme na região do menisco [m]
Sc	Número de Schmidt
t	Tempo [s]
T^*	Tempo adimensional
To	Escala de tempo característica do processo
V_F	Velocidade média do escoamento
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_{Liq}	Volume de líquido contido no 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]
x^*	Profundidade da gota adimensional
Z_r	Altura de referência [m]
Z_{0r}	Comprimento de rugosidade [m]

Letras gregas

π	Pi
γ	Tensão superficial [N/m]
τ	Tempo difusivo
ζ^*	Concentração de vapor adimensional desconsiderando a área característica da gota antes de cair no solo
ξ^*	Distância axial adimensional
α	Fator geométrico adimensional
ρ^*	Raio de curvatura do filme adimensional
ρ_l	Densidade do líquido [kg/m ³]
ρ_g	Densidade do gás [kg/m ³]
ε	Porosidade do meio
μ	Viscosidade dinâmica 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	Variação 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 [°]
 Φ Potencial gravitacional

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	26
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	32
2.1 EVAPORAÇÃO DE LÍQUIDOS EM MEIOS POROSOS.....	32
2.1.1 Efeitos da presença do filme de líquido	38
2.2. EVAPORAÇÃO DE GOTAS DE LÍQUIDO EM MEIOS POROSOS	41
2.3. MODELOS DE EVAPORAÇÃO EM MEIOS POROSOS	45
2.3.1. Revisão dos estudos em modelos de evaporação de gotas de líquidos em meios porosos.....	47
2.3.2 Revisão dos estudos precedentes baseados nos modelos de escala de poros para evaporação de matriz de líquidos em meios porosos com base na investigação da presença do filme de líquido	52
3 METODOLOGIA	59
3.1 MODELO DE ESCALA DE POROS	59
3.1.1. Modelagem dos efeitos gravitacionais.....	67
3.1.2 Modelagem dos efeitos viscosos	68
3.1.3 Inclusão da presença do filme de líquido em modelos de escala de poros ...	71
3.2 MEIO POROSO.....	82
3.2.1 Distribuição dimensional dos poros e ligações	84
3.3 AVALIAÇÃO DA PRECISÃO DO MODELO COMPUTACIONAL	85
3.4 PARAMETRIZAÇÃO	89
3.5 GEOMETRIA INICIAL DA GOTA	91
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	96
4.1 CONFIGURAÇÕES SIMULADAS.....	96
4.2 CASO BASE.....	98
4.2.1 Configuração inicial.....	98
4.2.2 Processo de evaporação	99
4.2.2.1 Efeitos gravitacionais	108
4.2.2.2 Efeitos viscosos	109

4.2.2.3	Efeitos da inclusão do filme de líquido	111
4.2.2.4	Efeitos da distribuição do tamanho dos poros e ligações	126
4.3	INFLUÊNCIA DO MEIO POROSO.....	130
4.3.1	Meio poroso composto por esferas de vidro	131
4.3.1.1	Configuração inicial.....	131
4.3.1.2	Processo de evaporação	132
4.3.2	Meio poroso composto por partículas de areia	145
4.3.2.1	Configuração inicial	145
4.3.2.2	Processo de evaporação	143
4.4	COMPARAÇÃO ENTRE GOTAS DE ÁGUA E DEM.....	157
4.4.1	Configuração inicial.....	157
4.4.2	Processo de evaporação	158
5	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	172
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	175

1 INTRODUÇÃO

O estudo sobre o impacto e a evaporação de gotas de líquidos em superfícies porosas, principalmente de líquidos quimicamente perigosos, é um assunto científico e tecnológico de grande interesse. Aplicações dessa tecnologia podem ser encontradas nas indústrias petrolífera, têxtil, alimentícia, cerâmicos, materiais de construção e farmacêutica, assim como em tecnologia de impressão a jato de tinta. Sabe-se ainda que a liberação e evaporação de líquidos nocivos na atmosfera podem representar uma ameaça para o meio ambiente e saúde da população em sua volta.

Para estas classes de aplicações, existem algumas características importantes a serem investigadas como: o formato da gota após o impacto e a taxa de evaporação durante o processo de secagem. Como exemplo, tem-se o projeto de impressoras usando a tecnologia de jato de tinta, onde os objetivos principais da avaliação estão relacionados à determinação dos parâmetros ótimos para a qualidade e velocidade de impressão. Neste caso, o objetivo principal é a determinação do diâmetro da gota após o impacto e da taxa de evaporação, que estão fortemente ligados à qualidade final da impressão (resolução de impressão) e ao tempo de secagem. Já para aplicações ambientais, como o lançamento de líquidos nocivos na atmosfera durante acidentes ambientais (ruptura de vasos de pressão ou episódios de chuva ácida, por exemplo), o estudo da evaporação de líquidos auxilia a quantificar este impacto. É importante considerar os riscos relacionados à inalação do vapor gerado pela volatilidade do líquido, além dos riscos do contato direto com o líquido contaminante. Assim, para se avaliar o impacto ambiental na área atingida, é necessário prever a concentração de vapores na atmosfera, que além de estar relacionada às condições atmosféricas, está principalmente ligada à taxa de evaporação do líquido no interior da região contaminada.

Os problemas de secagem de líquido em meios porosos existem para uma grande variedade de aplicações sendo considerada em diferentes escalas. Tratando-se da escala da secagem, tipicamente utiliza-se de modelos baseados em uma abordagem macroscópica do problema, considerando o meio poroso como um meio contínuo fictício. Entretanto, a evaporação de gotas em meios porosos é um caso particular de evaporação e esta classe de problemas

pode apresentar restrições ao se tratar o problema físico de forma macroscópica, visto que, a região do meio poroso ocupado pelas 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.

Diversos trabalhos científicos são encontrados atualmente na literatura reportando o uso dos “modelos de escala de poros” ou “*pore-scale models*”. Esses modelos representam o transporte de massa em nível microscópico incorporando efeitos da aleatoriedade da matriz porosa sobre o transporte de vapor e líquido durante a mudança de fase. O meio poroso é representado por meio de uma matriz composta por poros e ligações que variam de diâmetro de acordo com a distribuição estatística que caracteriza sua microestrutura.

Os padrões de transporte de líquido e secagem em meios porosos só começaram a serem explorados a partir do modelo proposto por Prat (PRAT, 1993). Desde então, diversos trabalhos têm sido apresentados empregando esta técnica, incluindo modelos mais avançados que exploram a influência da gravidade (LAURINDO e PRAT, 1996; YIOTIS *et al.*, 2006), efeitos viscosos (YIOTIS *et al.*, 2001; IRAWAN *et al.*, 2006; METZGER e TSOTSAS; 2008), efeitos devido a variação de temperatura (HUININK *et al.* 2002; PLOURD e PRAT, 2003; SURASANI *et al.* 2010), influência da matriz porosa (SOMKIAT *et al.*, 2008; RUI *et al.*, 2014), presença do filme de líquido (YIOTIS *et al.*, 2004; PRAT, 2007; YIOTIS *et al.*, 2012a) e, mais recentemente, a influência do fluxo externo na transferência de massa (MOHAMMAD *et al.*, 2013).

Os padrões característicos de um processo de secagem são fortemente influenciados pelos efeitos gravitacionais e viscosos. Segundo Metzger *et al.* (2007), os efeitos gravitacionais podem ser significativos no comportamento da distribuição de fase. Em princípio, a gravidade pode estabilizar ou desestabilizar a frente de secagem. Estabiliza quando a direção da força da gravidade esta no sentido oposto a superfície superior da matriz porosa (região onde o líquido está exposto ao meio externo) e desestabiliza quando esta no mesmo

sentido. Já os efeitos viscosos sempre estabilizam a frente de secagem em aplicações de secagem lenta, pois as forças viscosas atuam na pressão interna do líquido, influenciando assim seu transporte (PLOURD e PRAT, 2003). Quando os efeitos viscosos são significativos, eles atuam na resistência ao escoamento do líquido restringindo o movimento gerado pelo gradiente de pressão capilar e geram grande influência não somente na distribuição de fase quanto no comportamento da taxa de evaporação.

Grande parte dos estudos realizados com modelos de escalas de poros utiliza distribuições randômicas e uniformes, caracterizando os meios poros através dos valores máximos e mínimos para o diâmetro de poros e/ou ligações (entre outros TSIMPANOIANNIS *et al.*, 1999; YIOTIS *et al.*, 2005 e PRAT, 2007). Estudos experimentais, como Mathews *et al.* (1995) e Lindquist e Venkatarangan (1999), sugerem que a distribuição de probabilidade mais adequada para alguns meios porosos não-consolidados, como areia e esferas de vidro, seja uma distribuição log-normal. Segura e Toledo (2005a e 2005b) avaliaram o efeito dos parâmetros de 3 distribuições de probabilidade log-normal para os diâmetros das ligações entre poros em simulações de evaporação em meios porosos (Figura 1.1). Os resultados obtidos mostram diferenças significativas nas características do meio poroso que afetam o transporte de massa, como tortuosidade e permeabilidade, indicando que estas características devem ser ajustadas para uma adequada caracterização do meio poroso real através do modelo de escala de poros.

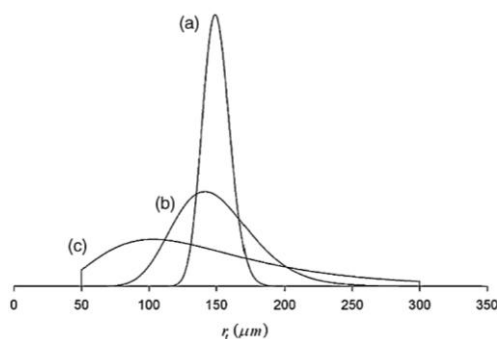


Figura 1.1 – Distribuições log-normal avaliadas por Segura e Todelo (2005), com tamanho médio das ligações de 150 μm , com limites máximo e mínimo de 300 μm e 50 μm , respectivamente. A curva (a) com de desvio padrão de 10 μm , (b) 30 μm e (c) 80 μm . Fonte: Segura e Todelo (2005)

A maioria dos trabalhos existentes na literatura, que reportam o uso de modelos de escala de poros, é baseada em matrizes completamente saturadas de líquido. Dentre os poucos

trabalhos existentes na literatura cujo foco é a evaporação de gotas em meios porosos destaca-se Markicevic e Navaz (2010), que apesar dos resultados relevantes sobre a dinâmica do processo de evaporação, apresentam significativas diferenças em relação a dados experimentais obtidos por Ressonância Magnética Nuclear (REIS *et al.*, 2003).

Um dos principais pontos a serem questionados é a não inclusão da presença do filme de líquido em ambos os trabalhos. Conforme observado por alguns autores, entre outros Yiotis *et al.* (2004) e Prat (2007), os modelos de escala de poros são capazes de prever adequadamente a distribuição de fase no interior do meio poroso, porém os valores preditos nas taxas de evaporação de líquido são consideravelmente inferiores aos valores observados experimentalmente. Este comportamento é relacionado à formação de um filme de líquido sobre as partículas do meio poroso, devido aos efeitos capilares, o qual não é adequadamente previsto pelos modelos de escala de poros usualmente descritos na literatura (Figura 1.2). Segundo Prat (2002), a presença dos filmes de líquido tem influência significativa no processo de secagem, portanto, deve ser incorporado nos modelos de escala de poros. Tal conclusão é corroborada quando se observa os resultados de Yiotis *et al.* (2005), onde mostra que há fortes indícios da existência do filme de líquido para situações cujas características representam números capilares para o escoamento de líquido através do filme (Ca_f) inferiores a 1. Essa é a mesma ordem de grandeza das configurações estudadas nessa tese que representam aplicações típicas de gotas com diâmetros da ordem de milímetros em meios porosos como areia, por exemplo.

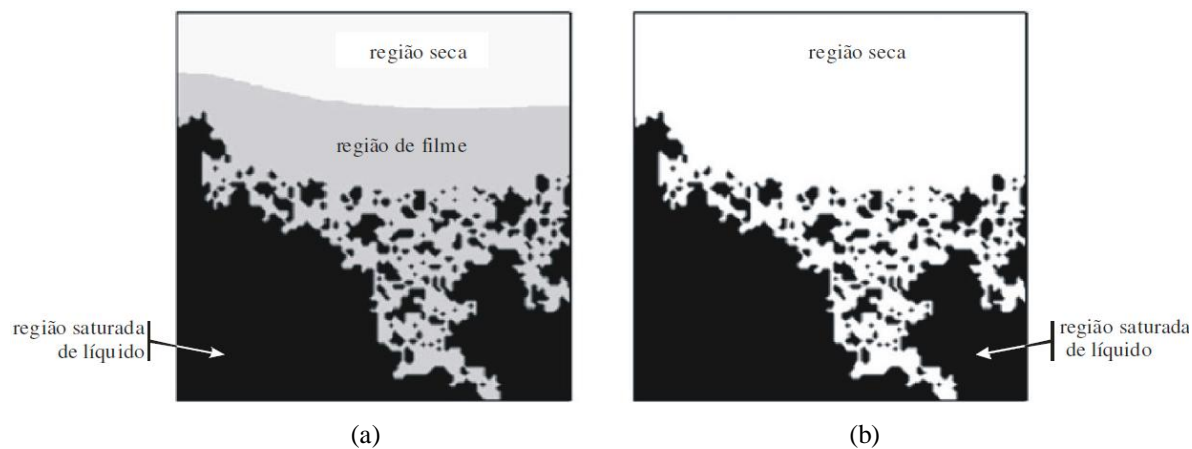


Figura 1.2 – Representação esquemática (a) da formação de um filme de líquido entre a região completamente saturada de líquido e a região seca, e (b) da representação da evaporação em modelos de escala de poros sem representar a formação do filme de líquido (adaptado de PRAT, 2007).

Um dos principais desafios para a inclusão da presença do filme nas simulações envolvendo a evaporação de gotas em meios porosos é a escala de tempo envolvida no processo de evaporação. Os modelos atualmente existentes na literatura científica (YIOTIS *et al.*, 2004; PRAT, 2007) empregam formulações para a existência do filme baseada na hipótese de que o filme se desenvolve de maneira quasi-permanente, ou seja, a escala de tempo do transporte do filme é muito menor do que a escala de tempo do processo de evaporação. Esta hipótese pode não ser diretamente aplicável ao problema de evaporação da gota, onde os processos de transporte de líquido e evaporação acontecem de maneira razoavelmente rápida, principalmente devido às escalas de comprimento envolvidas. Reis *et al.*, 2003 e Reis *et al.*, 2006 reportam escalas de tempo para o processo de evaporação da ordem de minutos. Dessa forma, torna-se importante a investigação da evaporação e transporte de líquido através do filme em regime transiente.

Neste contexto, o objetivo dessa tese é avaliar a precisão do modelo de escala de poros adaptado para casos de evaporação de gotas em meios porosos investigando a influência de efeitos gravitacionais, viscosos, da distribuição dos tamanhos dos poros e suas ligações e a presença do filme de líquido para esta classe de aplicações.

Com base neste objetivo, foram estabelecidos os seguintes objetivos específicos:

- a) Formular um modelo matemático para a determinação dos mecanismos de transporte e evaporação do filme de líquido em um modelo de escala de poros com a hipótese de regime transiente;
- b) Desenvolver um algoritmo numérico baseado no modelo de escala de poros para simular a evaporação de gotas em meios porosos, incluindo os efeitos significativos do processo de evaporação;
- c) Avaliar a precisão do modelo de escala de poros adaptado para os casos de evaporação de uma gota de líquido em diferentes configurações de meios porosos, comparando os resultados com dados experimentais obtidos por meio de Ressonância Magnética Nuclear (REIS *et al.*, 2003 e REIS *et al.*, 2006);

- d) Investigar a influência das forças viscosas e gravitacionais no processo de evaporação de gotas em meios porosos;
- e) Avaliar o efeito da inclusão do filme de líquido sobre a precisão do modelo desenvolvido;
- f) Avaliar como diferentes distribuições de probabilidade, uniforme e exponencial, influenciam na representação do meio poroso e no processo de evaporação de gotas;

Esta tese está dividida em cinco capítulos. Após este material introdutório (Capítulo 1), o Capítulo 2 apresenta uma revisão sobre os principais estudos científicos realizados nesta área de pesquisa. O Capítulo 3 apresenta a metodologia utilizada para a simulação do problema. 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 as conclusões e as recomendações para trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo tem o objetivo de apresentar uma descrição dos aspectos físicos envolvidos no fenômeno da evaporação de gotas de líquido em meios porosos e uma revisão dos principais trabalhos envolvendo o desenvolvimento dos modelos matemáticos relacionados ao tema. O capítulo está dividido em três seções. A Seção 2.1 que apresenta uma breve descrição da evaporação de líquidos em meios porosos abordando as características dos padrões de secagem devido às forças capilares, gravitacionais, viscosas e da presença do filme de líquido. A Seção 2.2 descreve um resumo sobre o processo de absorção da gota a dinâmica do processo de evaporação e remoção do vapor do meio poroso para a atmosfera. Finalmente, a Seção 2.3 apresenta uma descrição dos modelos de evaporação aplicados a gota de líquido em meios porosos e dos modelos baseados na abordagem de escala de poros.

2.1 EVAPORAÇÃO DE LÍQUIDOS EM MEIOS POROSOS

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

O processo de evaporação de líquido em meios porosos envolve vários fenômenos que se aplicam na escala do poro e geram efeitos significativos no comportamento macroscópico da secagem. A mudança de fase na interface gás/líquido no interior dos poros, transporte de massa por difusão e convecção, a presença de filmes e o deslocamento da frente de evaporação sobre efeito combinados de capilaridade, das forças viscosas e gravidade são os de maior impacto para uma grande variedade de aplicações. Uma das maneiras de se observar alguns dos efeitos pode ser feita através do gráfico da taxa de evaporação, que é uma curva estabelecida entre a quantidade de vapor gerado no meio poroso, e o tempo em que isso ocorre (YIOTIS *et al.* 2006).

Conforme descrito na literatura (Le Bray e Prat, 1999; Coussot, 2000; Metzger et al. 2007; Prat, 2011 e Yiotis et al. 2012), para casos onde os efeitos capilares são dominantes, tipicamente nos estágios iniciais da secagem, a taxa de evaporação é maior e apresenta um período praticamente constante, conhecido como *Constant Rate Period* (CRP), onde a evaporação depende quase que inteiramente de parâmetros externos ao meio poroso. Essa taxa de evaporação elevada se deve a baixa concentração de vapor próxima da superfície, uma vez que o vapor gerado é normalmente removido da superfície do meio poroso por um escoamento externo. Esse intervalo é seguido por uma rápida queda da taxa de evaporação, chamado de *Falling Rate Period* (FRP), onde 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. 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.

Os padrões da secagem são observados pelas características da distribuição de fase (YIOTIS *et al.*, 2006). A evaporação do líquido faz com que uma frente de secagem penetre na região líquida, gerando os *capillary fingers*, deixando para trás regiões de líquido desconectadas, ou *cluster* desconectados, com variação de tamanho contínua. Pode-se dizer que no instante inicial, quando a matriz porosa está 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 2.1).

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. Na ausência dos efeitos viscosos e gravitacionais, os efeitos capilares comandam os padrões de secagem devido ao controle do transporte de líquido. A pressão capilar gerada nos meniscos (interface líquido/gás) de cada poro governa o transporte de líquido, que podem ser “bombeados” das regiões de maior para a menor pressão capilar, ocorrendo assim, a chamada “capillary pumping”. A variação da pressão capilar é diretamente influenciada pelas características dos meniscos ao longo da matriz porosa e sua distribuição é conceitualmente aleatória. Durante a evolução da secagem,

sobre o domínio das forças capilares, a fase líquida se divide rapidamente em vários pequenos *clusters* desconectados. Portanto, não há frente de secagem desenvolvida, isto é, não ocorre uma frente de invasão da fase gasosa na fase líquida, assim, a fase gasosa penetra na matriz à regiões distantes da superfície superior de forma que a concentração de líquido na matriz reduza de maneira mais homogênea durante a secagem. Uma percepção desses padrões pode ser observada pelas imagens tridimensionais do caso simulado no trabalho apresentado por Metzger e Tsotsas *et al.* (2008) (Figura 2.2). Nesse trabalho foi simulada a evaporação de uma matriz porosa de 25x25x50, completamente cheia de água no instante inicial, composta por poros cilíndricos com distribuição do raio de 50 ± 1 nm e comprimento de 500 nm. A porosidade da matriz é de 0,094. Nota-se pela estrutura dos *clusters* que não ha frente de secagem desenvolvida e sim a geração de vários *clusters* desconectados nos instantes de concentração de (a) a (d). Somente no período final, (f) e (g), observa-se uma frente de evaporação junto aos *clusters* formados.

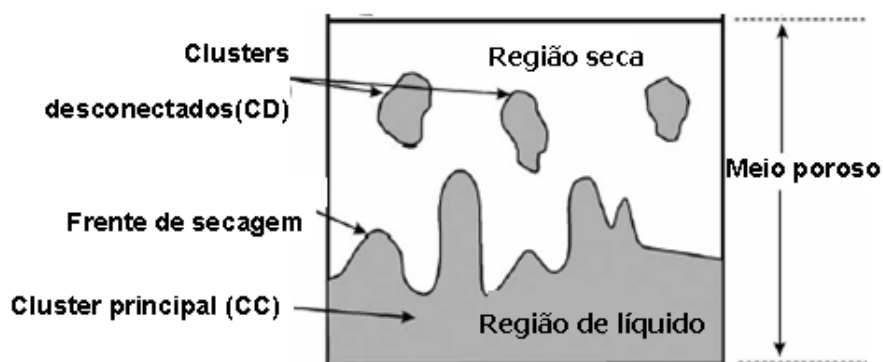


Figura 2.1 - Representação esquemática da evaporação da matriz porosa e a formação dos clusters (YIOTIS *et al.*, 2006).

Os efeitos gravitacionais podem ser significativos no comportamento da distribuição de fase. Em princípio, a gravidade pode estabilizar ou desestabilizar a frente de secagem (METZGER *et al.*, 2007). Estabiliza quando a direção da força da gravidade esta no sentido oposto a superfície superior da matriz porosa e desestabiliza quando esta no mesmo sentido. Tal comportamento, conhecido como invasão da fase gasosa na líquida com gradiente estabilizador (IPGE), é observado nos estudos experimentais apresentados por Laurindo e Prat (1996) (ver Figura 2.3). Observa-se que na ausência da força da gravidade (Figura 2.3

(a)), a evolução da distribuição de fase é dominada pelas forças capilares, diferentemente, quando a gravidade é existente (Figura 2.3 (b)), onde há uma estabilidade maior na formação e distribuição dos poros vazios (região em branco) ao longo do processo de evaporação. Percebe-se que a fase gasosa penetra na líquida de uma forma homogênea. Na situação onde a orientação da força da gravidade é oposta à superfície superior, a invasão do gás torna-se irregular (invasão da fase gasosa na líquida com gradiente desestabilizador (IPGD)). Nota-se que inicialmente a invasão é dominada por um ramal principal seguido de uma invasão descendente vinda pela superfície oposta à superfície aberta. Por fim, nos últimos estágios ocorre uma alta geração de clusters desconectados a partir do cluster principal.

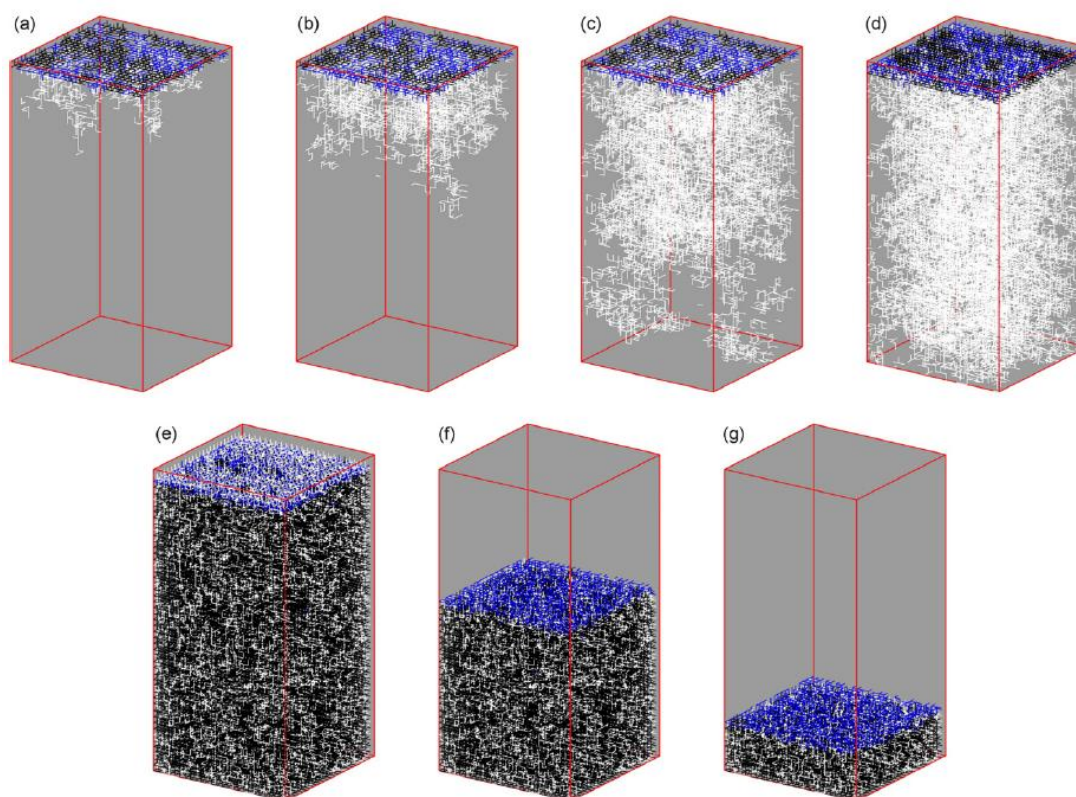


Figura 2.2 – Distribuição de fase (a) 98%, (b) 95%, (c) 86%, (d) 75%, (e) 67%, (f) 39%, (g) 11%. Nos instantes (a), (b), (c) e (d) os poros vazios estão na cor branca, os cheios de líquido estão nas cores cinza, azul e preto nos instantes. Nos instantes (e), (f) e (g) os poros vazios estão nas cores branca e cinza e os cheios de líquido estão nas cores azul e preto nos instantes. Não há transferência de massa pelas laterais e o fundo. O vapor escapa pelo topo da matriz porosa. Os efeitos capilares são dominantes (METZGER e TSOTSAS, 2008).

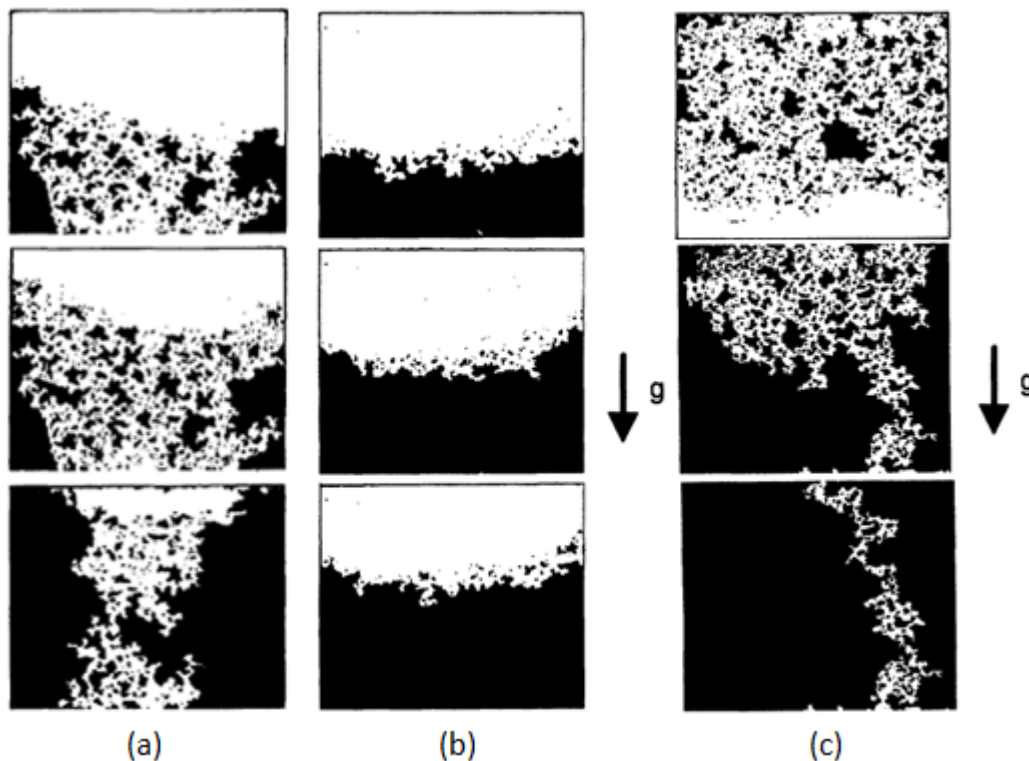


Figura 2.3 – Resultados experimentais da Distribuição de fase. Fase líquida em preto e fase gasosa em branco. (a) caso sem efeitos gravitacionais, (b) caso com a gravidade estabilizando a frente de secagem e (c) gravidade desestabilizando a frente de secagem. Superfície superior da matriz porosa esta em cima para os casos (a) e (b) e na parte de baixo para o caso (c). A sequencia de secagem esta das figuras de baixo para cima (Laurindo e Prat, 2006).

Efeitos viscosos sempre estabilizam a frente de secagem em aplicações de secagem lenta (invasão da fase gasosa na líquida com gradiente estabilizador (IPGE)), pois as forças viscosas, bem como gravitacionais, atuam na pressão interna do líquido, influenciando assim seu transporte (PLOURD e PRAT, 2003). Quando os efeitos viscosos são significativos, eles atuam na resistência ao escoamento do líquido restringindo o movimento gerado pelo gradiente de pressão capilar. Como nos primeiros estágios da secagem a evaporação ocorre nos poros cheios mais próximos à superfície superior e o suprimento de líquido vindo das regiões de maior pressão capilar é insuficiente, gera-se uma frente de secagem que avança para o interior da matriz porosa. Como consequência, a taxa de evaporação reduz drasticamente e na medida em que a secagem prossegue, a frente de secagem se amplia. No período final, os efeitos viscosos normalmente são menos significativos gerando assim mais clusters desconectados. Por isso, os efeitos viscosos também são considerados como estabilizadores da frente de secagem.

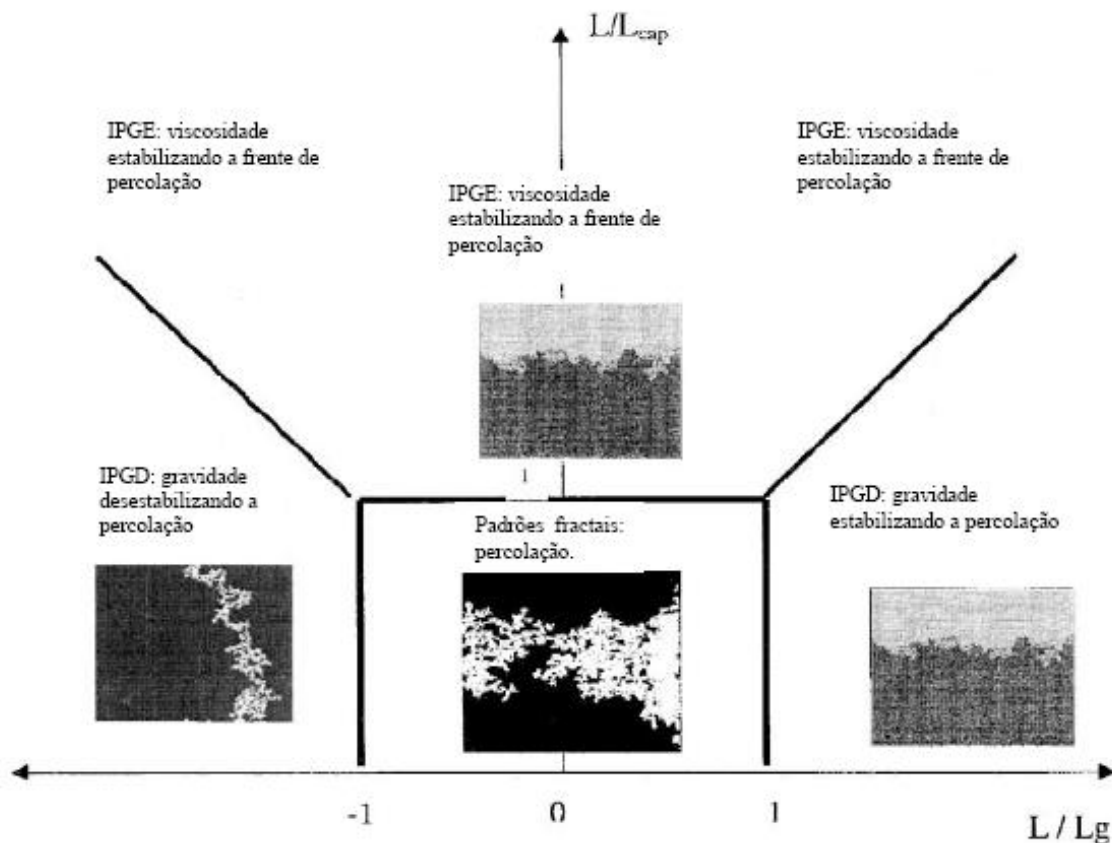


Figura 2.4 - Diagrama de fase de secagem na ausência dos efeitos dos gradientes térmicos (PLOURDE; PRAT, 2003).

Os padrões de secagem são mostrados no diagrama de fase da Figura 2.4. L representa o comprimento característico da região ocupada por líquido dentro do meio poroso. L_g é o comprimento característico da gravidade, 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 e representa a distância na 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 capilares ($Ca^{-1} = 2\gamma \cos \theta / \mu_l \nu$), onde 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 2.4 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 secagem.

2.1.1 Efeitos da presença do filme de líquido

Atualmente, a existência do filme de líquido durante a evaporação de líquidos em meios porosos já é um fato de conhecimento na literatura, vários trabalhos experimentais constatarem sua presença (SHAW, 1987; LAURINDO e PRAT, 1996; LAURINDO e PRAT, 1998; PRAT, 2007; YIOTIS *et al.*, 2012). Em uma série de experimentos, Shaw (1987) mostrou que a frente de secagem em uma matriz composta por partículas esféricas se moveu uma ordem de magnitude mais rápida em comparação a essa mesma matriz cheia de líquido sem nenhuma partícula dentro. O autor atribui esse fato ao fluxo de líquido através do filme que se dispersa pelas das partículas. Menciona ainda que esse é o mecanismo dominante em problemas de secagem em meios porosos. Laurindo e Prat (1998) realizaram um experimento em uma matriz porosa bidimensional e compararam os resultados com uma simulação numérica que não considerou a presença do filme. O resultado mostrou que a taxa de evaporação do experimento foi aproximadamente seis vezes maior do que o resultado computacional. Os autores atribuíram essa diferença a migração de líquido através do filme. O filme de líquido tem um efeito dominante na cinética da evaporação por isso seus efeitos tem grande impacto no comportamento da taxa de evaporação.

Yiotis *et al.* (2005) apresentam um trabalho, que é continuação de Yiotis *et al.* (2004), onde foi proposto uma metodologia para modelar a presença do filme na secagem em meios porosos. Foi simulada a evaporação do líquido hexano em uma matriz porosa de 100x100

poros composta por poros esféricos de mesmo raio $500\ \mu\text{m}$ e ligações de seção transversal quadrada com tamanho distribuído aleatoriamente de 170 a $270\ \mu\text{m}$. A Figura 2.5 mostra os resultados das simulações em dois diferentes números capilares do escoamento de líquido através do filme, Ca_f , 1 e 10^{-4} . Observa-se que para $Ca_f = 10^{-4}$ o filme se estendeu por toda matriz, dos poros cheios até a superfície superior enquanto para $Ca_f = 1$ o filme foi curto, sua extremidade permaneceu próxima aos poros cheios. Os autores citam que para $Ca_f < 1$ a presença do filme de líquido pode ser significativa.

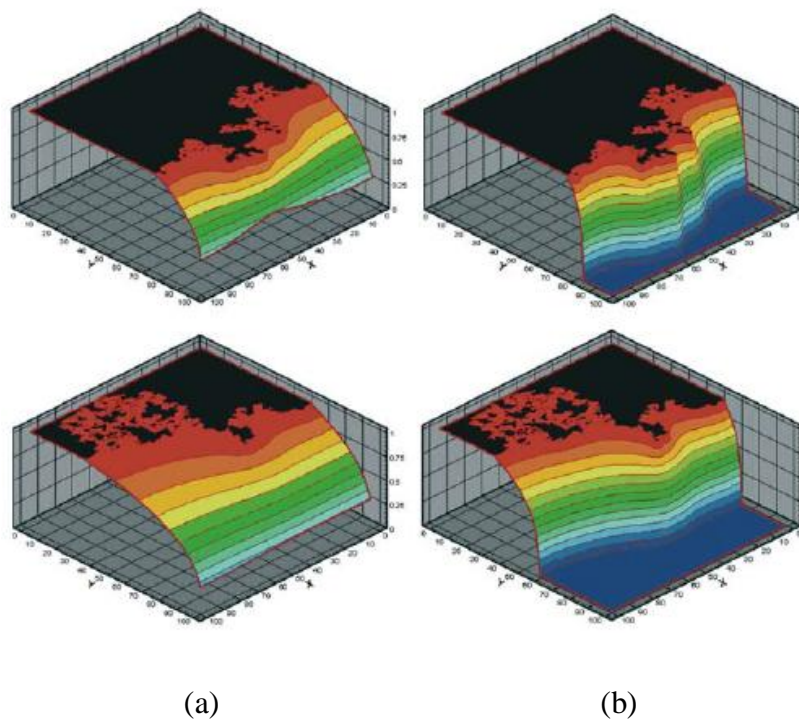


Figura 2.5 – Perfis do raios de curvatura do filme normalizado para (a) $Ca_f = 10^{-4}$ e (b) $Ca_f = 1$ em dois instantes diferentes do processo de secagem. Os poros cheios estão na cor preta e na cor azul a região completamente vazia. (YIOTIS *et al.*, 2005).

Os efeitos do filme são bem ilustrados considerando o caso da evaporação de líquido em um tubo capilar de seção transversal quadrada. O filme está presente nas quatro quinas da seção transversal e gera um transporte de líquido do menisco até a entrada do tubo (ver Figura 2.6). O líquido é transportado através do filme devido a ação do gradiente de pressão ao longo do escoamento gerado

pela variação da curvatura do menisco ao longo do filme. Esse efeito é chamado *capillary pumping*. A evaporação ocorre ao longo da área superficial do filme e, principalmente, em sua extremidade. No período em que a extremidade do filme está situada na entrada do tubo, tal período pode ou não durar o episódio inteiro da secagem, ele fica exposta ao meio externo, logo, a evaporação tende a ser alta e superior a evaporação na região interna. Esse eficiente mecanismo de transporte praticamente não ocorre em tubos com seção transversal circular, pois nestes a formação de filme é muito pequena, logo, o transporte é dominado apenas pela difusão molecular do gás entre o menisco e a entrada do tubo. Isso explica porque a evaporação pode ser várias ordens de magnitude mais rápidas em tubos com quinas em comparação a tubos de seção circular (PRAT, 2011).

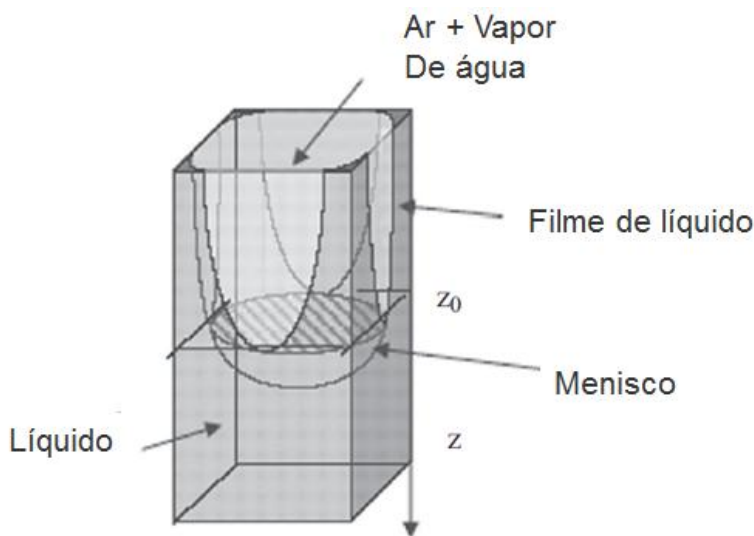


Figura 2.6 – Desenho esquemático do filme de líquido presente durante a evaporação em um tubo capilar de seção transversal quadrada (PRAT, 2011).

O comportamento da cinética de evaporação é bem descrito pela análise do gráfico da taxa de evaporação do experimento realizado no trabalho de Chauvet *et al.* (2009). O ensaio foi realizado em um tubo de 100 mm de comprimento e 1 mm de lateral para o líquido heptano. A Figura 2.7 mostra a taxa de evaporação obtida, nela pode-se observar que a taxa de evaporação não é exatamente constante, mas decresce suavemente durante o estágio inicial (CRP). Nesse período, observou-se que a extremidade do filme manteve-se na entrada do tubo, mas houve uma redução na sua espessura. Devido ao efeito capilar, o

líquido é transportado do menisco para a entrada e por fim evaporado. A redução de espessura deve-se basicamente aos efeitos gravitacionais e essa induz a suave redução na taxa de evaporação na maior parte do CRP. O final desse período, onde os efeitos viscosos no filme de líquido passam a ser significativos, é marcado pelo desprendimento da extremidade do filme da entrada do tubo e conseqüentemente recua para o interior do tubo capilar durante o FRP. O gradiente de concentração de vapor existe somente na região entre a extremidade do filme e a entrada do tubo. Ao longo do filme não há gradiente, pois a concentração de vapor nessa região é muito próxima ou igual ao valor de saturação. Isso mostra que a taxa de evaporação em um tubo de seção transversal quadrada é muito maior do que um tubo de seção transversal circular não pela área exposta do filme ao longo do tubo, mas sim devido ao fluxo de líquido gerado através do filme até sua extremidade. Finalmente, a extremidade do filme desceu significativamente para dentro do tubo.

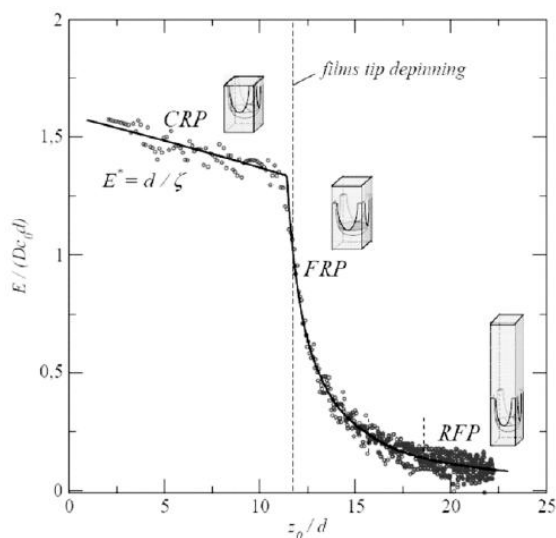


Figura 2.7 – Comportamento da taxa de evaporação durante a secagem em um tubo capilar de seção transversal quadrada obtido no trabalho de Chauvet et al. (2009); d é o comprimento da lateral do tubo, Z_0 é a posição do menisco ao longo do comprimento do tubo, E é o fluxo de evaporação, C_e é a concentração de saturação do vapor na interfase líquido/gás e D é o coeficiente molecular. (PRAT, 2011).

2.2. EVAPORAÇÃO DE GOTAS DE LÍQUIDO EM MEIOS POROSOS

Conforme citado anteriormente, a evaporação de gotas é um caso particular dos problemas de secagem de líquidos em meios porosos. Os principais processos envolvidos são: a absorção da gota pelo solo, processo de evaporação e processo de remoção do vapor do meio poroso para a atmosfera. Quando uma gota colide numa superfície lisa e não permeável, há um grande aumento de pressão no exato ponto de impacto, transformando a quantidade de movimento 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: (i) a transformação da quantidade de movimento axial do líquido para quantidade de movimento radial causando o espalhamento e (ii) a pressão do impacto que força o líquido ao entrar no meio poroso, assim, os efeitos capilares passam a dominar o escoamento, formando a geometria inicial da gota. Como consequência desses dois fenômenos a gota reside no meio poroso num formato similar a uma semi-esfera, no qual a razão de aspecto dependerá das características do meio poroso e do líquido (REIS *et al.*, 2004, MARKICEVIC *et al.* 2009 e MARKICEVIC e NAVAZ, 2009). A Figura 2.8 mostra a sequência do impacto e absorção da gota num meio poroso.

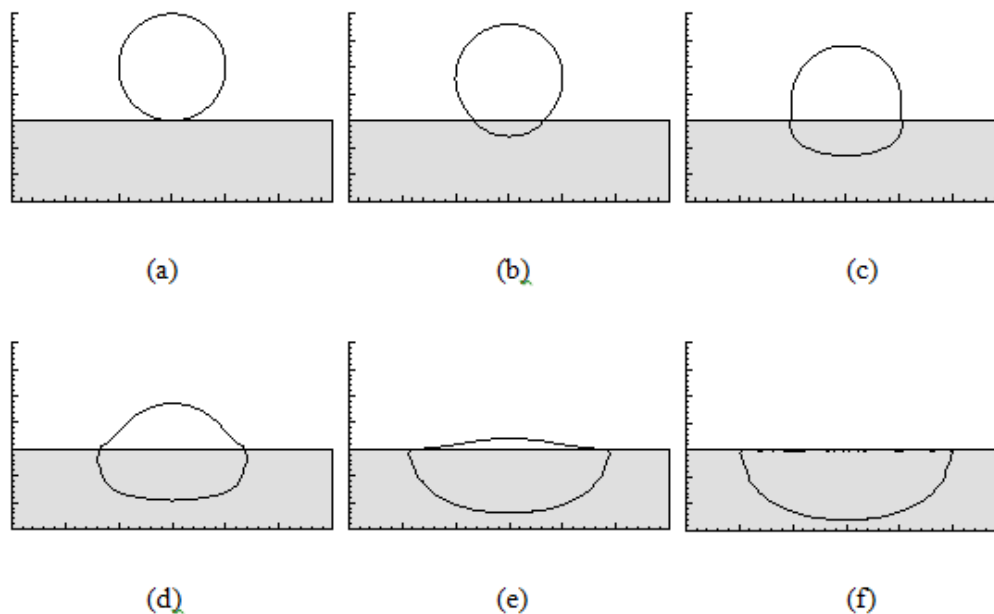


Figura 2.8 – Simulação da evolução temporal do formato de uma gota de líquido durante o impacto em um meio poroso: (a) no momento do impacto, (b) $t = 0,16$ ms, (c) $t = 0,48$ ms, (d) $t = 0,96$ ms, (e) $t = 1,92$ ms e (f) $t = 2,84$ ms. (REIS *et al.*, 2000).

A Figura 2.9 mostra a imagem de uma gota de água logo após a absorção em um meio poroso de esferas de vidro com $400\mu\text{m}$ de diâmetro. A imagem é obtida através da técnica de Ressonância Magnética Nuclear (NMR – *Nuclear Magnetic Resonance*) apresentada no trabalho de Reis *et al.* (2003). Deve-se notar que a superfície superior da gota está descontínua, ou seja, não está plana como se esperava. Essas irregularidades são causadas pelo distúrbio do meio poroso, composto de esferas de vidro, devido ao impacto da gota, que causa pequenas crateras na superfície porosa.

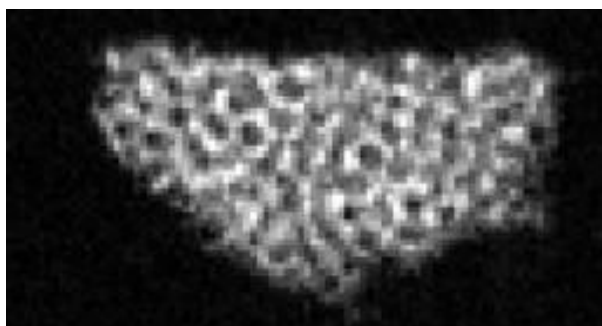


Figura 2.9 - Imagens de uma gota de líquido absorvida por um meio poroso (gota de água de 1,6 mm de diâmetro em um meio poroso de esferas de vidro de $400\mu\text{m}$). Regiões claras indicam a presença de líquido e a superfície plana na parte superior da gota representa a interface meio poroso/atmosfera (REIS *et al.*, 2003).

Após o impacto da gota, o perfil de concentração de líquido no interior do meio poroso é gradualmente alterado pelo processo de evaporação e transporte capilar. A Figura 2.10 mostra a evolução temporal da distribuição de fase, durante o período de secagem. Como se pode observar, a primeira figura do perfil mostra o instante inicial da evaporação. 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 maior concentração de líquido está em um nível muito próximo à superfície, enquanto, a concentração tende a zero ao se aproximar da profundidade final 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. 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.

O comportamento da taxa de evaporação é semelhante ao caso da evaporação de matrizes de líquidos em meio porosos descritos no item 2.1. Pela Figura 2.11, pode-se observar os mesmos períodos característicos no comportamento da secagem (CRP e FRP). Os valores correspondentes a taxa de evaporação e tempo, eixo das ordenadas e abscissas respectivamente, deste gráfico estão adimensionalizados conforme descrição da Seção 3.4.

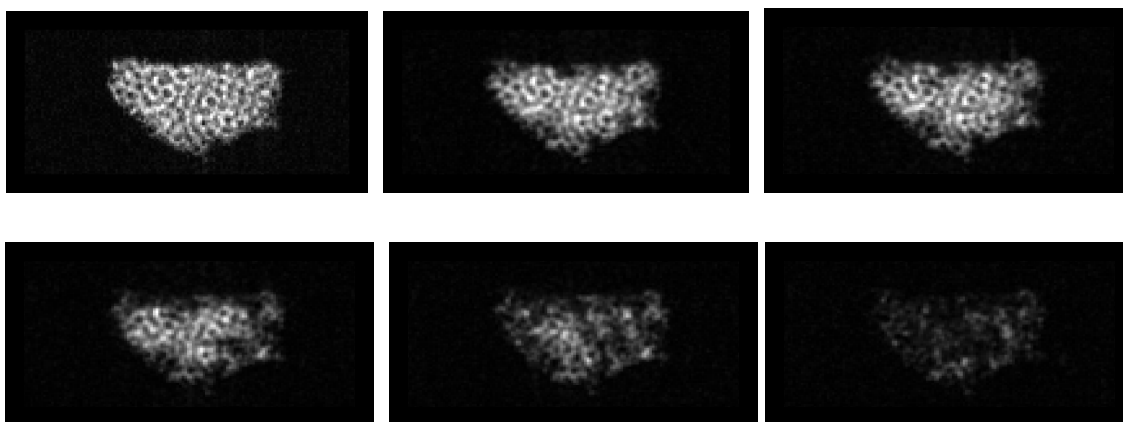


Figura 2.10 - Imagens de uma gota de líquido absorvida num meio poroso (gota de água de 1,6 mm de diâmetro em um meio poroso composto de esferas de vidro com 400 μm de diâmetro). Regiões claras indicam a presença de líquido e a superfície plana na parte superior da gota representa a interface meio poroso/atmosfera (REIS *et al.*, 2003).

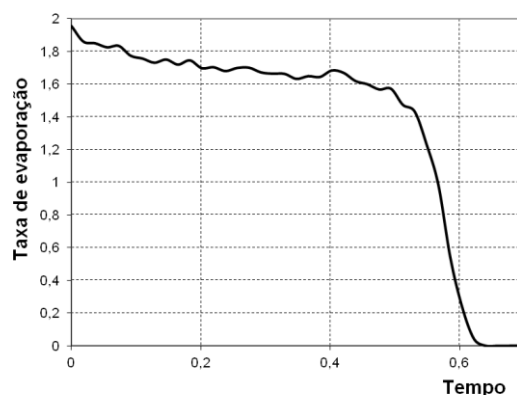


Figura 2.11 – Gráfico da taxa de evaporação adimensional vs. Tempo adimensional da evaporação de uma gota de líquido absorvida num meio poroso (gota de água de 1,6 mm de diâmetro em um meio poroso composto de esferas de vidro com 400 μm de diâmetro). (REIS *et al.*, 2003)

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 em pequena escala, tais como, 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.

2.3. MODELOS DE EVAPORAÇÃO EM MEIOS POROSOS

O número de trabalhos científicos sobre o desenvolvimento de modelos matemáticos para a simulação dos processos de evaporação de líquidos em meios porosos é bastante elevado. Esta seção concentra-se, principalmente, em abordagens diretamente aplicadas ao estudo do problema de evaporação de gotas de líquido em meios porosos e aos trabalhos relacionados aos modelos de escala de poros, por serem estes tópicos mais diretamente ligados ao escopo deste trabalho.

O desenvolvimento de modelos de secagem em meios porosos tem sido objetivo 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 e geometrias. Os modelos de secagem estão divididos em duas abordagens principais: os modelos macroscópicos, que se baseiam na hipótese de que o meio é contínuo, e modelos microscópicos que caracterizam 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*). Além disso, consideram que a matriz é composta por duas fases, fase- α (sólida) e fase- β (fluido), aleatoriamente (Figura 2.12). Esta abordagem baseia-se na existência de um volume representativo, cujas dimensões são suficientemente grandes para que a média das

propriedades no interior deste volume seja macroscopicamente representativas ao meio poroso, incluindo propriedades como porosidade, concentração de líquido, concentração de vapor, temperatura e outros. A dinâmica do processo de evaporação é calculada baseada em quantidades médias de líquido contido nos volumes e nas características do meio poroso.

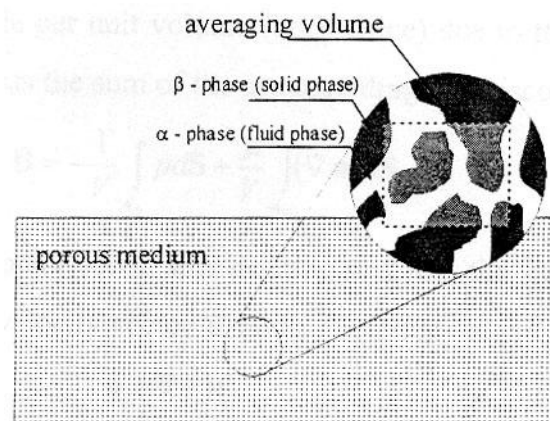
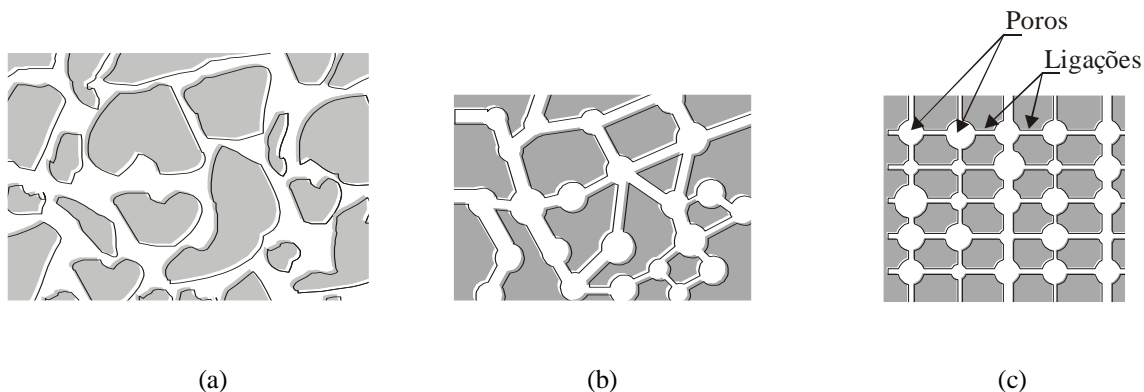


Figura 2.12 - Representação esquemática da média do volume (REIS, 2000).

O modelo de escala de poros (modelo microscópico) se baseia numa representação matricial da estrutura do meio poroso, distinguindo a microestrutura do meio em poros e suas ligações (Figura 2.13). Uma estrutura irregular é obtida ao interligar cada poro com seus vizinhos (Figura 2.13 (b)). Neste caso, considera-se uma matriz tendo a mesma coordenação principal com a estrutura irregular (Figura 2.13 (c)), o que é justificável, pois algumas propriedades essenciais são independentes da coordenação dos poros (na linguagem física, é dito que as várias matrizes obtidas para as várias coordenações principais pertencem à mesma classe universal).



(a)

(b)

(c)

Figura 2.13 - 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. (Sartim, 2007)

As próximas seções descrevem abordagens de modelagem matemática que se enquadram nesta classificação. A Seção 2.3.1 apresenta uma revisão dos principais estudos para a modelagem da evaporação de gotas em meios porosos. A Seção 2.3.2 apresenta uma revisão dos trabalhos científicos envolvendo modelos de escala de poros, com foco principal na investigação dos filmes de líquido no interior do meio poroso.

2.3.1. Revisão dos estudos em modelos de evaporação de gotas de líquido em meios porosos

Os primeiros esforços para a modelagem desta classe de problemas foram reportados na década de 40, com trabalho de Pasquill (1943). Desde então, diversos autores têm representado modelos com diversos níveis de precisão e complexidade.

Roberts e Griffiths (1994) relataram que a maioria dos modelos que simulam a evaporação de líquidos quimicamente perigosos no solo são voltados para o estudo em terrenos cobertos por vegetação ou terreno sem porosidade, e descrevem o processo de evaporação com base em duas abordagens principais: (i) aproximação empírica, em que não se modela diretamente o processo físico que ocorre, mas sim as relações empíricas de dados experimentais obtidos por uma gama de situações aplicáveis; como exemplo, a expressão empírica de Chinn (1981) para uma superfície não-porosa e o modelo empírico de Pasquill (1943); (ii) aproximação teórica, na qual o processo físico é descrito por uma série de equações cujos parâmetros são estimados usando uma combinação de argumentos teóricos e dados experimentais; como exemplo tem-se 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.

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 o diâmetro das gotas após o impacto na superfície, chamado de *Spread Factor*. Nos experimentos, 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 são: temperatura, diâmetro da gota e velocidade do vento.

Com base nos resultados experimentais de Cooper *et al.* (1983, 1986, 1990), Griffiths (1991), desenvolveu um modelo simples (teoria de avanço da 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 à superfície livre. À medida que a evaporação vai progredindo, o líquido da superfície superior da gota vai descendo para o interior do meio poroso enquanto a porção restante mantém sua posição original. O modelo de Griffiths (1991) considera que o transporte do vapor da superfície líquida até a atmosfera passa por duas resistências em série. A primeira é o transporte por difusão molecular do vapor através do meio poroso até a superfície. A segunda é o transporte por difusão molecular do vapor através da subcamada laminar da superfície. A figura 2.14 mostra 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.

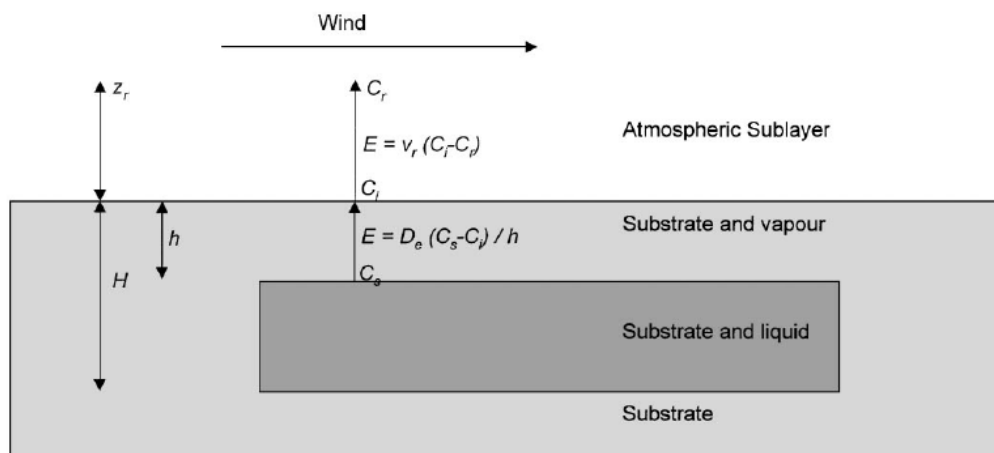


Figura 2.14 - Representação esquemática de uma evaporação de gota durante o período de secagem (ROBERTS e GRIFFITHS, 1999).

O trabalho original de Griffiths (1991) mostrou o surgimento de outros modelos baseados na teoria do avanço da frente de evaporação, tais como Roberts e Griffiths (1995) e Griffiths e Roberts (1999), que têm sido amplamente citados na literatura científica.

Entretanto, a abordagem do avanço de uma frente de evaporação é questionada por alguns autores pelo fato de não considerar o movimento do líquido no interior do meio poroso. Com isso, foi proposta 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 esta abordagem em um modelo macroscópico. O autor propôs um processo de evaporação em meios porosos dividido em três etapas: (i) modelar o imediato alargamento da gota devido ao momento do impacto, onde é usada uma correlação empírica; (ii) promover o alargamento causado por capilaridade expandindo a superfície e modelando a absorção em três dimensões; e (iii) promover a secagem e redistribuição do líquido que são descritas em um processo unidimensional (vertical). O modelo em questão calculou a evaporação do líquido metil salicilato, com raio da gota de 136 μm . Os resultados demonstraram bastante concordância com os dados experimentais, mostrando, assim, grande potencialidade na predição da evaporação com o uso do modelo proposto, ainda que não tenha sido analisada uma gama maior de situações com outros tipos de líquido e outros meios porosos.

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. Porém, abordagens como o modelo de Waestin *et al.*, 1998 que utiliza as equações de difusão para o vapor e para o líquido, não são capazes de incorporar tal redistribuição, visto que este considera uma abordagem unidimensional do problema. Isso leva a uma grande necessidade de se avaliar, com mais detalhe, o fenômeno da evaporação considerando o transporte tanto de vapor quando do próprio líquido no processo.

O problema de evaporação de gotas em meios porosos exhibe características que dificultam a utilização de modelos baseados na hipótese de um meio contínuo. 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.

Nas últimas décadas, diversos trabalhos científicos têm surgido na literatura reportando o uso de modelo de escala de poros que representam melhor os fenômenos microscópicos de transporte, entre outros Prat (1993), Laurindo e Prat (1996), Yotis *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.

Nesse contexto, o estudo de Sartim (2007) apresentou resultados de simulações tridimensionais da evaporação de gota em meios porosos. Os casos simulados foram comparados com os experimentos de Reis *et al.* (2003) e Reis *et al.* (2006). O autor utilizou em sua análise a técnica do modelo de escala de poros e se baseou na metodologia utilizada por Prat (1993) e Yiotis *et al.* (2001), onde considera a distribuição de líquido devida aos efeitos capilares com base na teoria de percolação. O meio poroso foi representado por uma matriz composta por poros esféricos, conectados por ligações cilíndricas, cujos diâmetros e ligações variam conforme distribuição normal entre valores pré-estabelecidos conforme a compactação da forma do meio poroso descrito por Luikov (1966). Efeitos gravitacionais e viscosos, assim como a presença do filme de líquido, não foram considerados nas simulações. O transporte do vapor na região de poros vazios foi calculado numericamente através do balanço da equação de conservação de uma espécie em cada poro no regime

transiente. Foram simuladas três diferentes configurações e comparadas com os resultados experimentais de Reis *et al.* (2003) e Reis *et al.* (2006): em duas configurações, o líquido da gota é a água e o meio poroso é composto esferas de vidro com diâmetro de $120\mu\text{m}$, em uma configuração, e $400\mu\text{m}$ na outra. A outra configuração o líquido é o dietil malonato (DEM) e o meio poroso composto esferas de vidro com diâmetro de $120\mu\text{m}$. A geometria inicial da gota segue a relação dos fatores R^* e H^* num formato seguindo a equação de uma elipse. Como resultado, foi obtido um formato inicial da gota com razoável aproximação em relação ao experimental. Além disso, as simulações apresentaram bons resultados na distribuição de fase do líquido, principalmente nos casos de evaporação da gota de água. Já para o caso da mudança de fase da gota de DEM, a predição da evaporação apresentou resultados satisfatórios.

Em 2010, Markicevic e Navaz (2010) apresentaram resultados de simulações de gotas em meios porosos avaliando seus resultados em relação aos dados experimentais de Reis *et al.* (2003). Os autores apresentaram um modelo baseado no modelo de escala de poros representando o meio por poros esféricos conectados por ligações cilíndricas, cujos diâmetros variam numa distribuição aleatória. Os efeitos da gravidade e a presença do filme de líquido não foram considerados. O modelo apresenta uma formulação em que o menisco pode permanecer estático ou se movimentar avançando na direção do poro adjacente vazio ou recuar. Este movimento é calculado com base no balanço de forças do diferencial de pressão entre a pressão do gás do poro adjacente vazio e a pressão do líquido. Caso o valor seja maior do que a pressão capilar, haverá movimento, caso contrário, permanece estático. O transporte de vapor, por sua vez, é calculado através do balanço da equação de conservação de massa de uma espécie em cada poro, e o campo de pressão da fase líquida é calculado numericamente através do balanço do fluxo de líquido, dada pela equação da teoria de Poiseuille em cada poro. A geometria inicial é baseada nos valores de R^* e H^* , e a absorção da gota é calculadas com a mesma formulação de movimento de menisco, porém, sem considerar a evaporação durante esse momento. A forma final da gota apresenta razoável aproximação entre os casos observados nos experimentos de Reis *et al.* (2003). Em relação aos experimentos, seus resultados numéricos apresentaram boa precisão em relação à taxa de evaporação e à variação da concentração de massa de líquido, no entanto, foram menos precisos no que diz respeito à evolução da distribuição de fase.

2.3.2 Revisão dos estudos precedentes baseados nos modelos de escala de poros para evaporação de matriz de líquidos em meios porosos com base na investigação da presença do filme de líquido.

O primeiro trabalho apresentado na literatura envolvendo o uso de modelo de escala de poros para uma situação de evaporação em meios porosos foi Prat (1993), que propôs um modelo de secagem em meios porosos baseado numa forma modificada da teoria de percolação ou *Invasion Percolation Rule* (IPR). A proposta desse estudo foi apresentar um modelo de secagem em meios porosos que permite simular o processo de evaporação ao nível do poro, diferentemente dos modelos macroscópicos que se baseiam numa abordagem onde o meio poroso é contínuo. Nesse caso, o meio poroso foi representado por uma matriz quadrada e bidimensional, formada por poros com tamanhos variados e conectados por gargantas (dutos que fazem a ligação entre os poros) também com tamanhos variados. A matriz considerada era de 50 x 50 poros. Inicialmente, os poros estão totalmente cheios de líquidos. Nos primeiros momentos, a evaporação ocorre apenas pelo lado exposto para o meio externo, que é o lado superior, pois os demais são considerados isolados. Foram adicionados, ainda, ao modelo os efeitos de capilaridade, gravidade, evaporação microscópica da interface gás/líquido e difusão do vapor na fase gás. Os resultados das simulações comparados com dados experimentais mostraram que o modelo representa bem as características essenciais de evaporação.

Mais recentemente, diversos trabalhos foram apresentados na literatura empregando esta técnica (IPR), proposta inicialmente por Prat (1993), 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 2.15 (a)), outro com um campo gravitacional estável (Figura 2.15 (b)) e o último com o campo gravitacional instável (Figura 2.15 (c)).

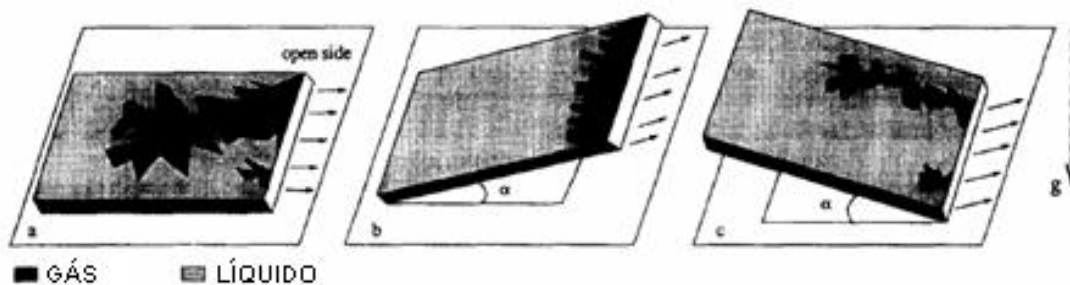


Figura 2.15 - Esquemático das configurações para os três casos estudados por Laurindo e Prat (1996).

A matriz porosa é formada por um quadrado de 140 x 140 poros, totalizando assim, 39000 dutos que fazem a ligação entre os poros. O líquido utilizado foi o hexano. Neste modelo, 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. Foram identificadas limitações dos casos simulados que estimularam o surgimento de 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 (LAURINDO e PRAT, 1996). Neste estudo, o foco foi avaliar a precisão do modelo com relação à taxa de evaporação. Foi obtido um ótimo resultado na comparação com dados experimentais para a distribuição de fase. No entanto, as taxas de evaporação foram apenas qualitativamente comparáveis aos experimentos, pois os resultados destas simulações foram menores do que as taxas medidas nos experimentos. Os autores atribuem este comportamento ao fato de existir um fluxo de uma fina camada de líquido (filme de líquido) nas quinas dos dutos de ligação (Figura 2.16). Esse fluxo é gerado devido a efeitos capilares secundários, pois, ocorre após a invasão de vapor num duto, que se origina na interface líquido/gás. Isso leva a uma baixa resistência no transporte interno se comparado apenas com a difusão de vapor. Logo, o transporte é mais acelerado levando a um aumento na taxa de evaporação.

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, e sugere que, 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 à negligência da existência do fluxo do filme de líquido nas simulações (Figura 2.16).

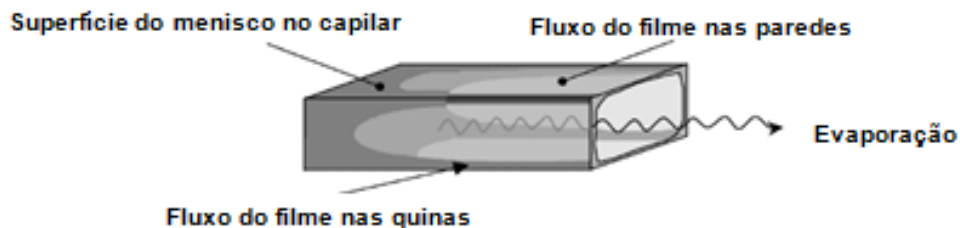


Figura 2.16 - Representação esquemática do filme de líquido nos cantos e ao longo das paredes de uma ligação entre dois poros, sendo que, a ligação acabou de ser invadida pelo gás (PRAT, 2002).

Yiotis *et al.* (2004) apresentam uma primeira formulação matemática para incorporar o filme de líquido em um caso bidimensional de evaporação de líquido em meios porosos. Para o caso em questão, é realizado um balanço de massa entre o fluxo de líquido e a evaporação ao longo do filme, que resulta em uma equação para o transporte de líquido através do filme. A mesma análise é realizada para o transporte de vapor, porém, neste caso, a equação de transporte de uma espécie apresenta um termo fonte proveniente da evaporação que ocorre na superfície do filme. Dessa forma, existe um vínculo entre os transportes de filme e de vapor. Portanto, na matriz porosa, a região de poros vazios é subdividida em duas regiões: uma que apresenta o filme de líquido e o vapor e outra onde existe somente vapor. A grande dificuldade de se equacionar o transporte de líquido e vapor nessas duas regiões é encontrar a extremidade do filme que fica na interface entre ambas. Assim, a principal contribuição dessa formulação é que ela simplifica as equações de transporte mediante algumas hipóteses, como, por exemplo, a hipótese de que o filme e o vapor se desenvolvem em um regime quase-permanente. Além do mais, a concentração de vapor na região do filme é considerada saturada. Isso permite rearranjar as equações através de uma manipulação matemática, e assim encontrar uma única equação que satisfaça ambas as regiões. Como conclusão, para o caso estudado, os autores enfatizam que o filme é o mecanismo de transporte dominante e tem influência significativa na taxa de evaporação, acelerando a secagem, principalmente em casos onde o número capilar do escoamento do líquido através do filme é baixo, inferior a 1.

Em 2006, os autores de Yiotis *et al.* (2006) estudaram os regimes característicos de secagem, o *CRP* e *FRP*, mencionados no item 2.1. O modelo proposto simulou a evaporação de líquido numa matriz 3D considerando efeitos capilares na interface líquido/gás e negligenciando a presença do filme de líquido. O trabalho teve como objetivo avaliar a influência dos efeitos da transferência de massa do vapor que sai da matriz porosa por meio de um fluxo de ar sobre a superfície. Também foi avaliada a influência dos efeitos gravitacionais no comportamento da taxa de evaporação. Uma das conclusões é com relação ao tempo de duração da *CRP*. Para que a *CRP* dure por um longo período é necessário que ocorra um transporte de líquido entre os poros cheios no interior da matriz com a superfície. (mesmo após a frente de evaporação ter avançado para dentro da matriz porosa). Dessa forma, a superfície da matriz pode se manter saturada suficientemente para manter a taxa de evaporação constante. Os autores mencionam que este transporte de líquido ocorre devido a um fluxo viscoso através do *cluster* principal ou do fluxo dos filmes de líquido que pode existir.

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 devido à presença do filme de líquido. Os resultados mostraram que o mecanismo de transporte que mantém a superfície com concentração de líquido devido à conectividade existente com a frente de evaporação, mencionado no trabalho anterior, de 2006, é caracterizado pelos filmes de líquido. Os autores concluíram 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. De acordo com este trabalho, 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 2.17 mostra o resultado da comparação de duas simulações com dados experimentais, uma considerando a existência dos filmes e a outra não. A metodologia utilizada para a inclusão da presença do filme é semelhante ao modelo proposto por Yiotis *et al.*, (2004), inclusive a hipótese de que o filme e o vapor se

desenvolvam em regime permanente. Como podem ser observados, ao considerar a influência do filme no transporte, os resultados são muito mais próximos aos dados experimentais, mostrando assim, a importância desse fenômeno no processo de secagem. Entretanto, sua inserção no modelo 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.

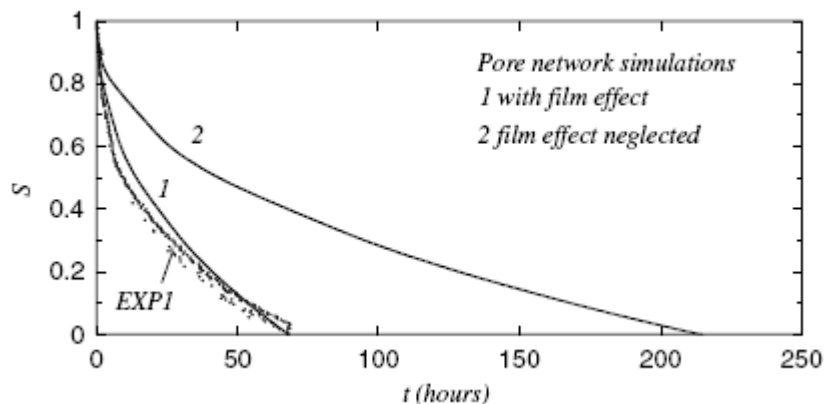


Figura 2.17 - Curvas de secagem dos experimentos e simulações. S é a concentração do líquido e t o tempo em horas. (PRAT, 2007).

Em 2009, Chauvet *et al.* (2009) apresentaram uma avaliação experimental e numérica do comportamento da evaporação de líquido em um tubo de seção transversal quadrada. O trabalho mostrou que a evaporação em um tubo possui as mesmas características nos três períodos caracterizados (CRP, FRP e RRP) em comparação a evaporação em matriz líquida em meios porosos.

Chauvet *et al.* (2010) estudaram a evaporação do líquido hexano em três condições: uma com o tubo de seção transversal circular, outra com tubo de seção transversal quadrada posicionado na horizontal, para que os efeitos da gravidade possam ser desprezíveis e, por fim, um tubo com seção transversal quadrada posicionado na vertical, onde a atuação da gravidade é significativa. É observado que o filme de líquido não é gerado no caso do tubo de seção circular, logo, seu tempo de secagem é superior em comparação com os outros dois casos onde há presença do filme. No caso do tubo na posição horizontal, a taxa de evaporação é constante em todo o período de secagem devido ao fato do filme se estender desde a região de interface líquido/gás (região do menisco) até entrada do tubo. Entre os

três casos estudados, esse é o que apresentou um tempo de secagem menor. O caso em que o tubo está posicionado verticalmente, na primeira fase da evaporação, a taxa de evaporação é comparável ao caso do tubo horizontal, porém, na segunda etapa do processo de secagem a ponta do filme começa a descer, se despreendendo da entrada do tubo, e, com isso, a taxa de evaporação diminui suavemente. Tal fato ocorre devido a uma progressiva redução de espessura do filme sob a ação da gravidade e efeitos viscosos. Para dar maior suporte aos resultados experimentais foi realizada uma simulação numérica do processo. Os autores sugeriram que a influência de pequenos detalhes na geometria do tubo no processo de evaporação fosse explorada.

Prat (2011) apresentou uma revisão sobre os recentes estudos relacionados aos modelos de escala de poros, com foco especial na modelagem incluindo os efeitos do filme de líquido e molhabilidade. Em suas conclusões, o autor destaca que os atuais modelos consideram somente matrizes porosas simples e reforça a necessidade de se desenvolver modelos que considerem uma situação mais realística. É citado, ainda, que os modelos futuros devem considerar a matriz porosa com base em imagens da microestrutura obtidas por meio de técnicas mais precisas, como a tomografia computadorizada. Além disso, o autor evidencia a necessidade de avanços na modelagem do filme de líquido, explorando-a numa variedade maior de meios porosos. Por fim, menciona a necessidade de que os modelos permitam incluir em suas condições iniciais uma variação maior na distribuição do tamanho dos poros.

Em 2012, Yiotis *et al.* (2012a) apresentaram um modelo unidimensional incluindo os efeitos gravitacionais no filme de líquido. A formulação matemática é a mesma descrita em Yiotis *et al.* (2004) acrescentando os termos relacionados a força da gravidade. Os autores sugerem que tais efeitos sejam significativos e os resultados apresentados foram bons do ponto de vista qualitativo em comparação a modelos bidimensionais já validados.

Yiotis *et al.* (2012b) apresenta uma série de experimentos em meios porosos composto por esferas de vidros com diâmetro médios variando de 100 a 850 μm . O líquido utilizado foi o n-pentano e n-hexano. Foi observada a presença do filme de líquido nos experimentos e seu comportamento estudado através da identificação de sua extensão. Observou-se que o

comprimento do filme causa grande influencia nos padrões de secagem, e com isso, provocam grandes alterações nos períodos de secagem *CRP* e *RFP*. No estudo observa-se ainda que a extensão filme é dependente das forças gravitacionais e viscosas, além das características da transferência de massa da matriz porosa para o meio externo. Também foi desenvolvido um modelo para o meio poroso composto de esferas, com base no apresentado em Yiotis *et al.* (2002a), considerando a existência do raio de arredondamento do filme (*degree of roundedness*) cuja influência é esperada conforme cita os autores. Os resultados tanto qualitativos quanto quantitativos apresentaram boa concordância com predições teóricas e os experimentos.

Com base na revisão dos trabalhos científicos apresentados nesta seção, é possível concluir que os esforços mais recentes de modelagem envolvendo modelos de escala de poros estão muito direcionados à inclusão da presença do filme. Neste contexto, a utilização de modelos de escala de poros para o estudo da evaporação de gotas de líquido requer a inclusão de tais avanços, principalmente pela ordem de grandeza dos números capilares referentes aos escoamento do líquido através do filme ($Ca_f = 10^{-1}$).

3 METODOLOGIA

Este capítulo apresenta a metodologia utilizada para a elaboração deste trabalho, a qual está subdividida em 3 Seções. Primeiramente, a Seção 3.1 descreve em detalhes o modelo de escala de poros mostrando todo equacionamento matemático para a modelagem do problema físico onde a presença do filme de líquido é considerada. A Seção 3.2, relata sobre a representação do meio poroso, descrevendo as características do meio e da geometria inicial da gota e enfatiza a influencia da distribuição de probabilidade da variação dos diâmetros dos poros e das áreas da seção transversal das ligações. Por fim, os dados experimentais apresentados nos trabalhos de Reis *et al.* (2003) e Reis *et al.* (2006), que serão objeto de comparação para a avaliação da precisão do modelo, estão descritos na Seção 3.3., assim como, a maneira como será feita a comparação entre os resultados.

3.1 MODELO DE ESCALA DE POROS

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. Os poros atuam como reservatórios 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.

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 hidráulicos gera diferentes pressões capilares (Equação 3.1) ao longo da região saturada de líquido. Desta forma, estes gradientes de pressão geram redistribuição de líquido, movendo-se dos poros de maior pressão capilar (menor diâmetro de ligação) para os poros de menor pressão capilar (maior diâmetro de ligação). Este comportamento faz com que poros com maiores ligações esvaziem primeiro, em uma clara analogia ao fenômeno de percolação.

Portanto, o modelo de escala de poros se baseia na ideia de que apenas um poro é invadido por vez. A escolha do poro que vai ser invadido está relacionada com a pressão capilar nos meniscos formado nas ligações entre poros. Quando um poro cheio de líquido está em contato com outro que não possui líquido é criada uma diferença de pressão interfacial ou a pressão capilar do menisco. A pressão capilar é dada por (Luikov, 1966):

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

γ é o coeficiente de tensão superficial do líquido e r é o raio das ligações (ligação cilíndrica). A Figura 3.1 mostra uma representação esquemática da evolução da secagem de dois poros. Como se pode observar, inicialmente os dois poros estão cheios (Figura 3.1 (a)), das interfaces líquido/gás dos poros, a que possuir menor barreira capilar é então invadida pelo gás (Figura 3.1 (b)). Na etapa seguinte, o mesmo procedimento ocorre com o outro poro (Figura 3.1 (c) e (d)).

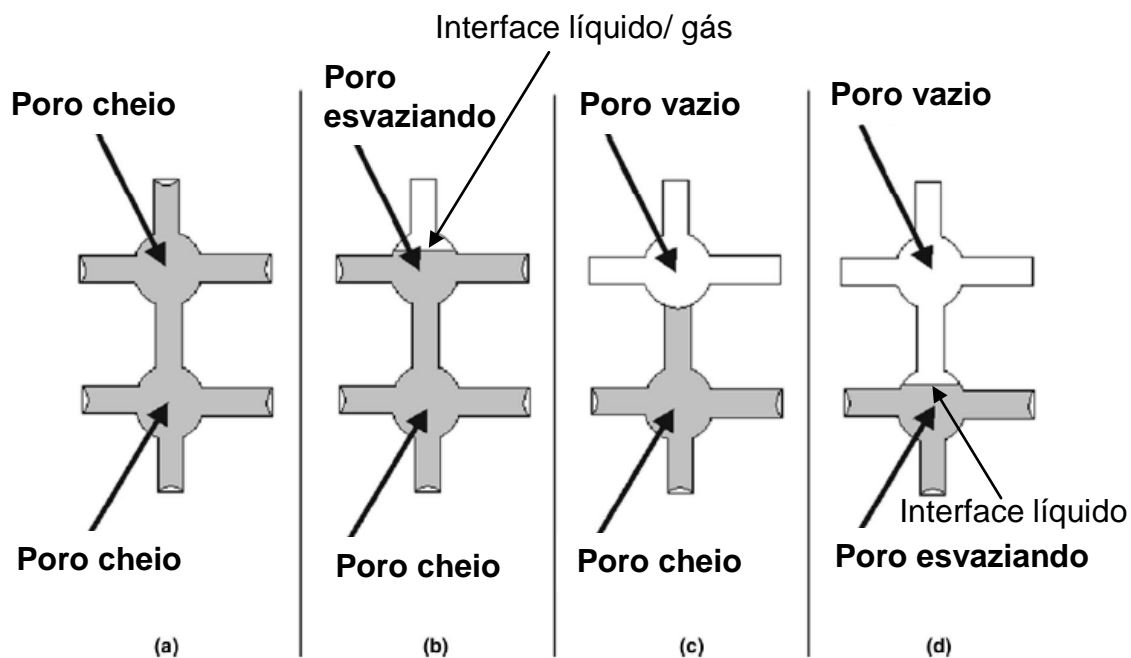


Figura 3.1 - Evolução da evaporação de dois poros cheios de líquido. (a) Inicialmente os poros estão completamente cheios. (b) Quando a diferença de pressão da garganta superior excede sua resistência capilar, a interface retrocede e o poro é penetrado pela fase gasosa. A mesma transição ocorre em (c) e (d) (YIOTIS *et al.*, 2001).

Durante a evaporação distingue-se a matriz em cinco diferentes tipos de poros (Figura 3.2): o tipo (0) é vazio com todas as ligações vazias, o tipo (1), é o poro vazio, mas pelo menos uma ligação que 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.

Nas simulações envolvendo modelos de escala de poros o diâmetro dos poros e das ligações varia dentro de uma faixa de variação estabelecidas para caracterizar o meio poroso em estudo.

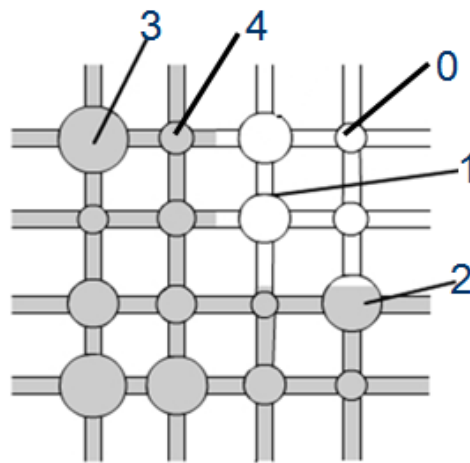


Figura 3.2- Representação esquemática dos tipos de poros.

Conforme citado anteriormente, apesar da clara analogia com a teoria de percolação, o fenômeno de evaporação apresenta uma diferença significativa: o gás (vapor) é gerado no interior da matriz porosa. Assim, para determinar o padrão de escoamento é necessário prever a taxa de mudança de fase líquido/gás no interior do meio poroso. Essa taxa de evaporação é determinada pela transferência de massa na fase gasosa, e é governada por difusão expressa por (YIOTIS *et al.*, 2001):

$$F_{ij} = DA_{ij} \frac{C_i - C_j}{l} \quad (3.2)$$

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, A_{ij} é a área da seção

transversal da ligação entre os poro i e j , C_i é a concentração de líquido no poro tipo (4) ou (2) e C_j é a concentração do poro adjacente que deve ser do tipo(1) (Figura 3.2).

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 (YIOTIS *et al.*, 2001):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u}\nabla C = D\nabla^2 C \quad (3.3)$$

Onde \mathbf{u} é a velocidade do gás por advecção, que nesse caso pode ser desconsiderada.

O transporte de vapor nos poros é calculado utilizando-se o por meio de um balanço de massa em cada poro onde a equação diferencial (Equação 3.3) é integrada sobre a área da seção transversal da ligação de cada poro. O resultado é a equação discretizada (Equação 3.4) que contem valores da concentração para todos os poros, formando assim, um sistema linear de equações.

$$V_i \frac{\Delta C_i}{\Delta t} = \sum_j \left[DA_{ij} \frac{C_i - C_j}{l} \right] \quad (3.4)$$

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

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

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 de vapor em um poro do tipo cheio (Tipo 2, 3 ou 4) é considerada saturada;

- b) Os poros presentes na superfície superior tem um fluxo em direção ao meio externo dado pela equação 3.5;
- c) Nas extremidades da matriz porosa, exceto a extremidade superior, não é considerado fluxo.

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

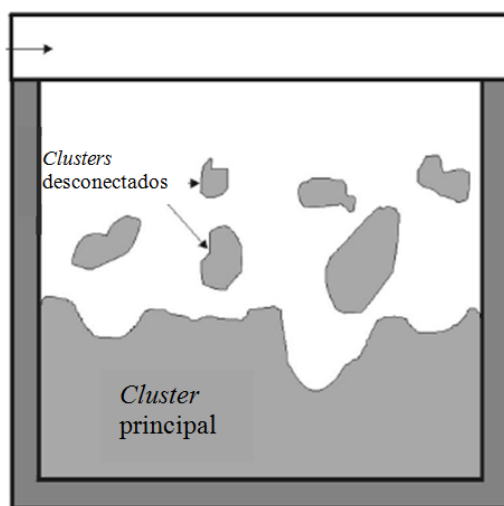


Figura 3.3: *Clusters* principal e desconectados. (Yiotis *et al.*, 2001)

O cálculo da taxa de evaporação para cada *cluster* é efetuado através do somatório dos fluxos (equação 3.2) que ocorre no menisco de todas as ligações (entre um poro cheio e vazio) na superfície do *cluster*. A taxa de evaporação de toda a matriz será função da quantidade de *cluster*, quanto maior o número de poros que fazem fronteira com poros vazios maior será a taxa de evaporação da matriz. Assim com o aparecimento de *clusters*, o cálculo da taxa de evaporação passa a ser individual para cada *cluster*.

Durante a sequência de operações do algoritmo é necessário que, a cada instante de tempo, se conheça a localização dos poros que compõem cada *cluster*, uma vez que cada *cluster* evapora de maneira independente. Assim, em cada passo de tempo, deve-se saber qual o poro a ser invadido em cada *cluster*, isto é, qual o poro de maior área de ligação em cada *cluster*.

Após a determinação da taxa de evaporação de cada *cluster*, deve-se calcular o passo de tempo (Δt) característico. Para cada *cluster*, o poro a ser invadido é identificado e o tempo para esvazia-lo é calculado mediante sua massa de líquido com a taxa de evaporação do *cluster*. Caso existam mais de um *cluster*, é selecionado o menor o tempo entre os tempos para esvaziar o poro identificado em cada *cluster*. Evidentemente, o tempo escolhido é suficiente apenas para que um poro esvazie enquanto os demais poros identificados nos demais *clusters* apenas perderam uma quantidade de líquido referente a esse tempo. Nesse caso, um poro será totalmente esvaziado e passara a ser do tipo 1 e alguns poros serão evaporados parcialmente formando um poro do tipo 2.

O transporte do vapor 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:

$$E_e = v_r \pi \cdot r_p^2 (C_i - C_r) \quad (3.5)$$

Onde v_r é a velocidade externa do gás, também chamada de velocidade característica do transporte de vapor ou coeficiente de transferência de massa para o meio externo, C_i é a concentração do gás (vapor do líquido) na interface substrato/atmosfera, C_r é a concentração do gás na altura de referência acima da superfície Z_r usualmente, considerada como igual a zero e r_p é o raio do diâmetro do respectivo poro da superfície.

O fluxo, E_e , é calculado somente para os poros da superfície do meio poroso. Uma consideração neste modelo quanto a representação física da matriz porosa são os poros da superfície superior. Considera-se apenas metade deles. É como se houvesse um “corte” no centro dos poros da superfície e somente a metade inferior fosse adotada. A geometria é semelhante a figura de um cálice (ver Figura 3.4). Assim, a quantidade de líquido contido nesses poros, inicialmente, é equivalente a metade de seu volume, logo, não há ligação para a superfície acima. A área exposta para a superfície externa é a área da seção transversal central do poro. Dessa forma, a área de líquido exposta ao fluxo atmosférico nos instantes iniciais da evaporação é igual a área saturada multiplicada pela porosidade do meio. Este procedimento foi adotado para fazer o acoplamento entre a abordagem microscópica empregada pelo modelo de escala de poros e a abordagem macroscópica empregada na formulação dos valores de v_r . O valor de v_r considerado neste trabalho é o mesmo apresentado nos experimentos de Reis *et al.* (2003) e Reis *et al.* (2006).

A Figura 3.4 mostra um modelo esquemático representando as aplicações das equações que governam o transporte de vapor. Em cinza são mostrados os poros cheios e os vazios em branco. As setas indicam o transporte de vapor.

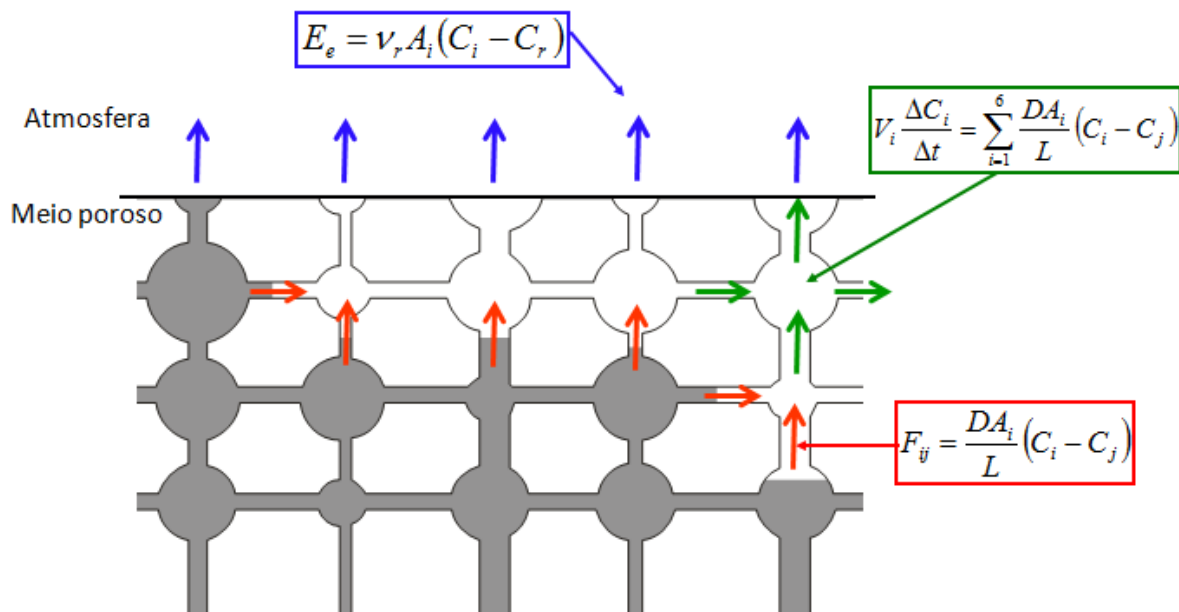


Figura 3.4 – Modelo esquemático representando as equações aplicadas aos fluxos de evaporação de líquido, ao balanço do transporte de vapor nos poros vazios e ao fluxo de vapor para a atmosfera.

A seguir é mostrada a sequência das operações do algoritmo de solução desenvolvido nessa tese. O procedimento computacional foi implementado na linguagem de programação FORTRAN e concluído com aproximadamente 25 mil linhas:

1. Definir 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 têm 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 cluster, qual possui a menor pressão capilar. Com isso, cada cluster haverá um poro sujeito a ser invadido pelo gás;
7. Calcular a taxa de evaporação de cada poro que esta no contorno externo de cada cluster. Somam-se essas taxas, e então, obtém-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 3.3 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. Atualizar o volume de líquido contido em cada poro;
14. Avançar para o próximo passo de tempo;
15. Retornar para o passo 5.

3.1.1 Modelagem dos efeitos gravitacionais

Os efeitos gravitacionais afetam a pressão do líquido da gota e como consequência alteram os padrões de secagem do ponto de vista da distribuição de fase. A força da gravidade é implementada no modelo por meio da relação básica pressão-altura típica em estudos da estática dos fluidos onde a pressão do líquido é dada por (FOX *et al.*, 2010)

$$P(y) = -(\rho_l - \rho_g)gy \quad (3.6)$$

Onde y é o sentido da profundidade da gota, P a pressão do líquido e g a aceleração da gravidade. O potencial gravitacional, Φ , é então introduzido e calculado para cada poro (Wilkinson, 1984):

$$\Phi(r_{ij}, y) = -2\gamma / r_{ij} + (\rho_l - \rho_g)gy \quad (3.7)$$

A ligação que apresentar o maior potencial será invadida seguindo a mesma sequência no processo de invasão da fase gasosa na fase líquida conforme a teoria de percolação.

A inclusão dos efeitos gravitacionais na sequência de operações do algoritmo é razoavelmente simples, apenas o passo 6 é alterado. A equação 3.7 é inserida.

3.1.2 Modelagem dos efeitos viscosos

Os efeitos viscosos impactam no campo de pressão do líquido assim como os efeitos gravitacionais, porém o cálculo do campo de pressão não é resolvido analiticamente, mas sim por solução numérica. A metodologia é simplificada de modo a ser independente das equações governantes de transporte (equação de Navier-Stokes) para o transporte do líquido. A formulação é baseada no balanço de massa em cada poro cheio de líquido por meio do somatório do fluxo de líquido através das ligações. A formulação para o fluxo entre poros considera um escoamento laminar através de um duto de seção transversal circular dada pela lei de Poiseuille

$$Q_{ij} = \left(\frac{P_{li} - P_{lj}}{l} \right) \frac{\pi r_{ij}^4}{8\mu} \quad (3.8)$$

Q_{ij} é o fluxo volumétrico de líquido entre dois poros, P_{li} é a pressão de líquido no poro em questão e P_{lj} é a pressão de líquido no poro adjacente. Como no modelo computacional a seção transversal da ligação é quadrada, utiliza-se o conceito de diâmetro hidráulico, D_h , definido como (FOX *et al.*, 2010)

$$D_h = \frac{4A_{ij}}{Per} \quad (3.9)$$

A_{ij} é a área da seção transversal e Per o perímetro molhado, ou seja, o comprimento de parede em contato com o fluido escoando na seção transversal, assim, $r_{ij} = D_h/2$. No balanço de massa em cada poro cheio o somatório dos fluxos é zero

$$\sum_j Q_{ij} = 0 \quad (3.10)$$

Para os casos onde os efeitos da viscosidade são significativos, a distribuição de fase é determinada por um procedimento diferente ao descrito na Seção 3.1. A determinação do

poro a ser invadido pelo gás depende não somente da pressão capilar, mas também da diferença de pressão entre os dois poros adjacentes. O procedimento para a determinação do poro a ser invadido inicia-se identificando toda a interface líquido/gás dos clusters. Em seguida, calcula-se a diferença entre a pressão de líquido do poro cheio com a pressão do gás do poro vazio adjacente. Duas situações podem ocorrer: (i) se a diferença entre a pressão do poro cheio com o poro vazio for superior a pressão capilar existente no menisco formado na ligação entre eles ou (ii) se a diferença de pressão for menor do que a pressão capilar. No caso (i), o poro é invadido. É importante destacar que essa sequência ocorre em todos os poros existentes no contorno da gota, portanto, mais do que um poro pode ser invadido no mesmo *cluster*. Calcula-se a taxa de evaporação em todas as interfaces líquido/gás e resolve-se o campo de pressão de líquido nos poros cheios. Essa solução é realizada resolvendo-se o sistema linear de equações, determinado pelo balanço de massa (equação 3.8 e equação 3.10), por meio do método numérico SOR (*Successive-Overrelaxation*). O tempo para esvaziar cada poro invadido é calculado de acordo com a equação 3.11

$$\frac{\sum_j Q_{ij}}{\rho_l V_{Liq_i}} = \Delta t_i \quad (3.11)$$

Onde V_{Liq_i} é o volume de líquido contido no poro i , ρ_l a densidade do líquido e Δt_i o tempo necessário para a secagem de cada poro identificado para ser invadido. Finalmente, escolhe-se o poro a ser esvaziado (o poro que possui o menor Δt_i) e atualiza-se o volume de líquido nos demais poros identificados para serem invadidos. Nessa condição, o poro escolhido é considerado vazio (tipo 1) e os demais a serem invadidos são considerados parcialmente cheio (tipo 2). Definido o passo de tempo a sequência de operações é novamente reiniciada e assim sucessivamente.

Caso a situação (ii) ocorra, se o diferencial de pressão entre poro cheio de líquido e o poro vazio for inferior a pressão capilar, o modelo determina que a ligação a ser invadida seja a de menor pressão capilar (ligação de maior área). Assim, a sequência de operações se equivale a sequência do modelo com forças viscosas não inclusas.

Com a inclusão dos efeitos viscoso o algoritmo numérico tem a seguinte sequência:

1. Definir 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 têm concentração igual a zero enquanto os poros cheios a concentração é igual a concentração de saturação do vapor);
5. Identificar todos os *clusters*;
6. Calcular o fluxo em todas as ligações de cada poro cheio de líquido;
7. Identificar a ligação em que o diferencial de pressão entre poros adjacentes excede o valor da pressão capilar. Caso o diferencial de pressão não exceda, então, o poro com a ligação de menor pressão capilar é identificado;
8. Calcular a taxa de evaporação de cada poro que está no contorno externo de cada cluster;
9. O campo de pressão de líquido é resolvido pelas equações 3.8 e 3.10;
10. Calcular o tempo necessário de se esvaziar cada poro identificado no passo 7;
11. Escolher o menor dos tempos calculados no passo 10 e selecionar o poro em questão;
12. Calcular a concentração de vapor em todos os poros através do balanço de massa descrito pela equação 3.3 referentes a evolução temporal definida no passo 9;
13. O poro identificado no passo 11 torna-se vazio (tipo 1). Os demais poros identificados no passo 7 se tornam parcialmente cheios;

14. A distribuição de líquido e gás no substrato é atualizada, identificando os poros tipo 4 e 0;
15. Atualizar o volume de líquido contido em cada poro considerando a taxa de evaporação dele e o líquido que escoou dele para os poros adjacentes;
16. Avançar para o próximo passo de tempo;
17. Retornar para o passo 5.

3.1.3 Inclusão da presença do filme de líquido em modelos de escala de poros

Conforme citado anteriormente, durante o período de secagem a matriz porosa é caracterizada em três diferentes regiões: a região de poros cheios de líquido (poros do tipo 2, 3 ou 4), a região em que os poros estão totalmente ocupados por gás (poros do tipo 0 e 1) e a região onde os poros estão ocupados por gás (poros do tipo 0 e 1) e contém filme de líquido. A Figura 3.5 mostra um desenho esquemático representando as três diferentes regiões. Os poros cheios de líquido estão representados como poros L e os poros vazios e os vazios com filme são representados como G e F, respectivamente.

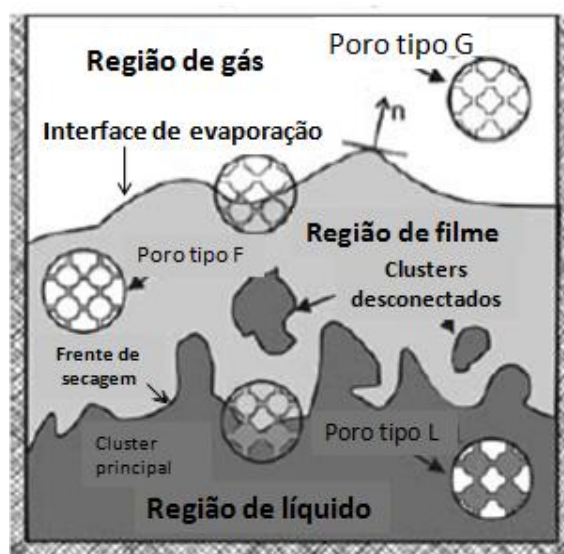


Figura 3.5- Representação esquemática dos padrões das fases líquido e gasosa, indicando os poros e suas características durante a secagem. (YIOTIS, 2005).

Usualmente, os modelos mais típicos de matriz porosa consideram ligações cilíndricas, entre outros (YIOTIS *et al.*, 2001; MARKICEVIC e NAVAZ, 2010). Uma observação mais detalhada nos interstícios de uma matriz porosa composta por partículas esféricas mostra que há fortes indícios de que a ligação formada entre poros possui quatro quinas. A Figura 3.6 mostra uma representação esquemática do meio poroso. Na Figura 3.6(a) tem-se a matriz porosa composta por esferas e na Figura 3.6(b) mostra os interstícios dessa matriz. Como se pode notar, a geometria da ligação entre poros possui quatro quinas. Com base nessa análise, a seção transversal para o modelo é simplificada para uma seção transversal quadrada.

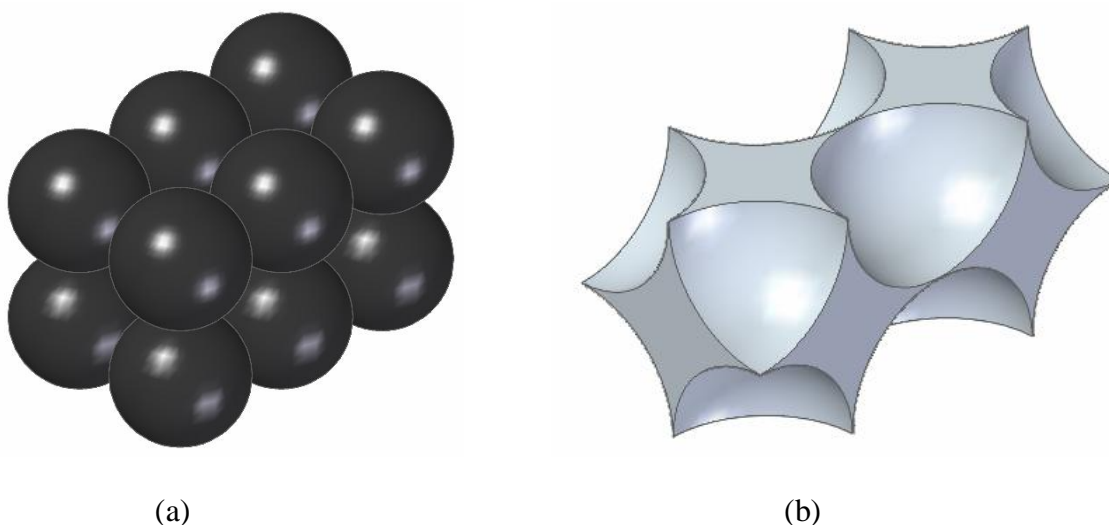


Figura 3.6 – Representação esquemática de uma matriz porosa. (a) Meio poroso composto por partículas esféricas (b) interstício da matriz.

Um esquema da ligação entre poros pode ser observado na Figura 3.7. O fluxo de filme pode ser visto saindo da região da interface líquido/gás, e à medida que escoar na direção x sua espessura diminui. Essa espessura pode ser parametrizada através do raio de curvatura do filme, R , que é uma função do tempo e distância em x . A Figura 3.8 mostra uma vista frontal da seção transversal da ligação entre poros, também representado por um tubo capilar, em que é possível visualizar o raio de curvatura do filme R .

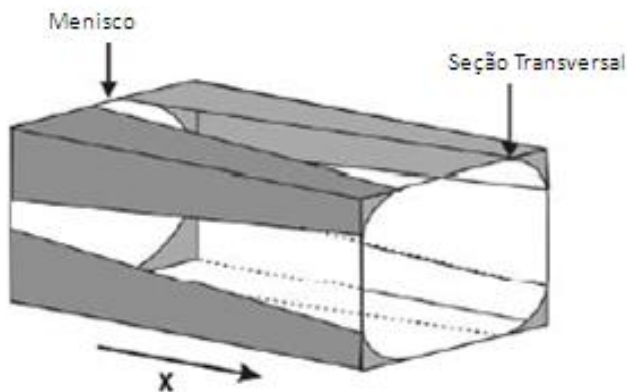


Figura 3.7- Representação esquemática dos filmes de líquido ao longo das quinas de uma ligação entre poros. (Yiotis et al., 2005).

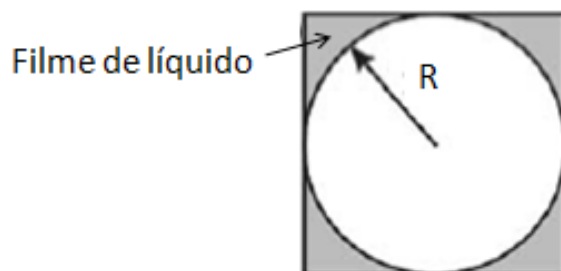


Figura 3.8 - Representação esquemática do raio de curvatura dos filmes de líquido ao longo das quinas de uma ligação entre poros. (YIOTIS *et al.*, 2005).

Assume-se que todos os quatro filmes presentes nas quinas da ligação têm a mesma espessura em qualquer seção transversal e que há um equilíbrio da pressão capilar na interface entre o filme/gás, logo, para a pressão capilar na interface do filme tem-se.

$$P_c = \gamma / R \quad (3.12)$$

Evidentemente, ao longo do escoamento do filme no eixo x a pressão do líquido, P_l , varia, mas, a pressão do gás, P_g , equivalente a pressão atmosférica mantém-se praticamente constante (YIOTIS *et al.*, 2001), dessa forma pode ser considerada nula.

$$P_c = P_g - P_l = \gamma / R \quad (3.13)$$

$$P_l = -\gamma / R \quad (3.14)$$

Assim, P_l é inversamente proporcional a $-R$. Visto que, o escoamento de líquido através do filme ocorre conforme o gradiente de pressão, da maior para a menor pressão, então, à medida que o líquido avança ao longo do escoamento, a espessura do filme diminui (Dong e Chatzis, 1995).

Ransohoff e Radke (1988) estudaram o escoamento do filme de líquido gerado em quinas em tubos capilares. Eles apresentaram uma formulação onde introduziram uma constante adimensional β , que se referente a resistência ao escoamento do líquido em quinas e dependente da geometria, tensão na superficial e ângulo de contato. Com base no gradiente de pressão a velocidade média do escoamento é dada por:

$$V_F = \frac{R^2}{\beta\mu} \left(\frac{-dP}{dx} \right) \quad (3.15)$$

Portanto, a vazão é expressa por:

$$Q_x = V_F A_F \quad (3.16)$$

A equação para a área do líquido em uma seção transversal é (Dong e Chatzis, 1995):

$$A_F = 4R^2 \left[\frac{\cos \theta \cos(\pi/4 + \theta)}{\text{sen}(\pi/4)} - (\pi/4 - \theta) \right] \quad (3.17)$$

Se o ângulo de contato (θ) é considerado nulo, logo, tem-se que:

$$A_F = (4 - \pi)R^2 \quad (3.18)$$

Substituindo as equações 3.15 e 3.18 na 3.16 obtém-se:

$$Q_x = -\frac{(4 - \pi)R^4}{\beta\mu} \frac{\partial P}{\partial x} \quad (3.19)$$

Da derivação parcial da equação 3.14, tem-se:

$$\frac{\partial P}{\partial x} = -\frac{\partial(\gamma/R)}{\partial x} \quad (3.20)$$

Substituindo a equação 3.20 na 3.19:

$$Q_x = \frac{(4-\pi)R^4\gamma}{\beta\mu} \frac{\partial(1/R)}{\partial x} \quad (3.21)$$

Considerando $\frac{\partial(1/R)}{\partial x} = -\frac{1}{R^2} \frac{\partial R}{\partial x}$, a equação 3.21 pode ser rearranjada, e por fim obtém-se a vazão volumétrica do líquido através do filme:

$$Q_x = -\frac{(4-\pi)R^2\gamma}{\beta\mu} \frac{\partial R}{\partial x} \quad (3.22)$$

Os valores de β não são tão simplesmente determinados. Os poucos estudos apresentados até o momento na literatura, que exploram a aplicação da formulação através de β , priorizam o caso de escoamento em um tubo capilar. Tipicamente valores de 10^2 a 10^5 são encontrados, dependendo principalmente do raio de arredondamento (*degree of roundedness*) (RANSOHOFF e RADKE, 1988; ZHOU *et al.*, 1997 e CHEN *et al.*; 2006). Mas, dependendo da geometria os valores podem variar de 6 a infinito (WEISLOGEL e SETH, 1998). Conforme cita Zhou *et al.* (1997), β é muito difícil de ser estimado para casos com desvios na geometria, como é o caso de meios porosos em empacotamento de esferas de vidro. Yiotis *et al.* (2012b) ainda acrescenta que os valores de β tem grande variação em função da espessura do filme. Dessa forma, os valores de β serão considerados constantes empíricas e ajustados para cada caso estudado.

Para o escoamento numa distância entre x e $dx+x$, a variação da vazão volumétrica pode ocorrer dependente da concentração de líquido, que está diretamente relacionada à espessura do filme. Logo, segundo Dong e Chatzis (1995), pode-se estabelecer a seguinte relação:

$$\frac{\partial Q_x}{\partial x} = -\frac{\partial A_F}{\partial t} \quad \text{ou} \quad \frac{\partial Q_x}{\partial x} = -(4-\pi) \frac{\partial R^2}{\partial t} \quad (3.23)$$

Para o caso onde existe evaporação de líquido através da superfície do filme, considera-se o balanço de massa do líquido, conforme mostra a Figura 3.9, que é dado por:

$$(4 - \pi) \frac{\partial R^2}{\partial t} = - \frac{\partial Q_x}{\partial x} - Q_{ev} \quad (3.24)$$

A taxa de evaporação, Q_{ev} , é obtida pela simples forma da equação de difusão semelhante a equação 3.2 e é expressa por:

$$Q_{ev} = A_{ev} D \frac{\Delta C}{l} \quad (3.25)$$

O termo A_{ev} representa a área da interfase filme/gás por onde o líquido é evaporado (perímetro da curvatura do filme pelo comprimento da ligação), e ΔC o diferencial entre a concentração na superfície do filme (equivalente a concentração de saturação) e a concentração de gás (C). Conforme Yiotis *et al.* (2004):

$$Q_{ev} = 2\pi R l D \frac{C_{sat} - C}{R_0} \quad (3.26)$$

O termo C_{sat} é a concentração de saturação de vapor no meio poroso e R_0 o raio de curvatura do filme próximo ao menisco que é equivalente ao valor médio da metade da lateral das ligações. A equação 3.26 é válida para uma ligação de seção transversal quadrada com comprimento l .

Nota-se que a unidade da equação 3.24 é $[m^2/s]$, enquanto que a equação 3.26 é dada em $[kg/s]$. Nesse caso, para igualar as unidades, divide-se a equação 3.23 pela densidade do

líquido, ρ_l , e pelo comprimento de ligação. Substituindo $R^2 \frac{\partial R}{\partial x} = \frac{1}{3} \frac{\partial R^3}{\partial x}$ na equação 3.22 e rearranjando a equação 3.24, tem-se:

$$(4 - \pi) \frac{\partial R^2}{\partial t} = \left[\frac{(4 - \pi)\gamma}{3\beta\mu} \right] \frac{\partial^2 R^3}{\partial x} - Q_{ev} \quad (3.27)$$

E para um tubo capilar, a equação 3.27 é dada por:

$$(4 - \pi) \frac{\partial R^2}{\partial t} = \left[\frac{(4 - \pi)\gamma}{3\beta\mu} \right] \frac{\partial^2 R^3}{\partial x} - \frac{2\pi R D}{\rho_l R_0} (C_{sat} - C) \quad (3.28)$$

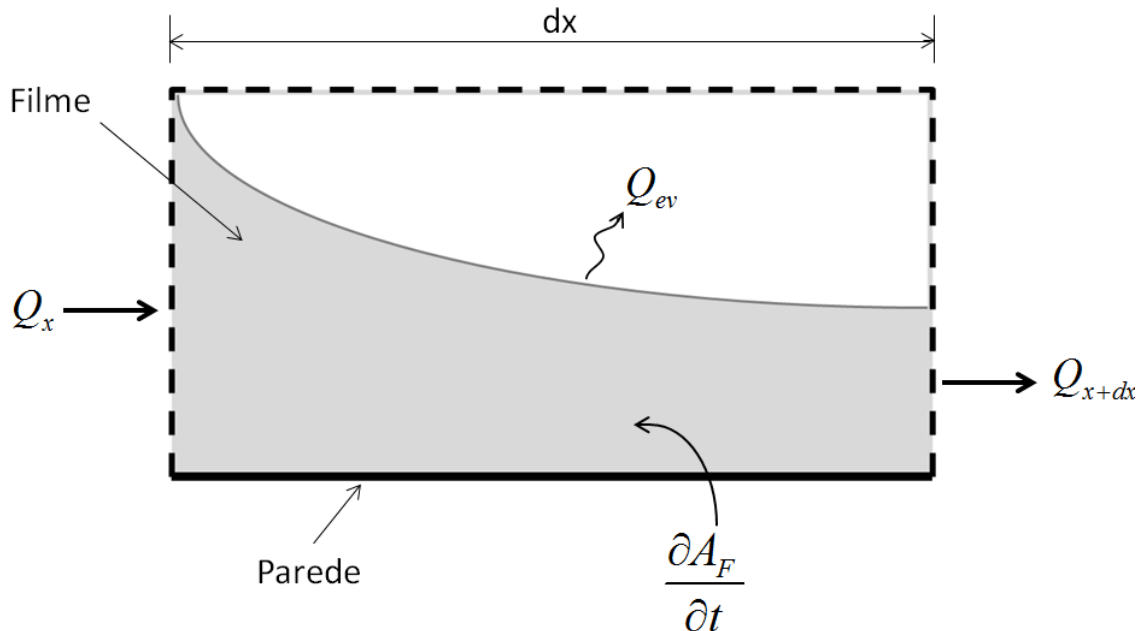


Figura 3.9 - Representação esquemática do balanço de massa ao longo do escoamento no filme.

A transferência de massa na fase gasosa é governada apenas por difusão, o que é geralmente válido em problemas de evaporação (LAURINDO e PRAT, 1996, 1998 e Prat, 2005). Devido ao gradiente de concentração entre a fase líquida e gasosa, o líquido que compõe a gota evapora na interface líquido/gás, e esse vapor somado ao vapor gerado pela evaporação do filme, na região de filme, é transportado via difusão para a superfície do meio poroso e liberado para a atmosfera. Dessa forma, o balanço de massa na região de fase gasosa, onde os poros estão vazios, é definido conforme equação 3.3 somada ao termo fonte Q_{ev} . Conforme equação 3.26, Q_{ev} está na unidade de kg/s , então, para obter na unidade em kg/m^3s (unidade da equação 3.3), divide-se esta equação pelo volume da ligação que é composto pelo comprimento de ligação e as laterais da ligação (lxR_0xR_0) (YIOTIS *et al*, 2005).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + 2 \frac{\pi R D}{R_o^3} (C_{sat} - C) \quad (3.29)$$

Com base nas equações descritas acima, é necessária a solução transiente e de forma acoplada das equações 3.28 e 3.29. Enquanto a equação 3.28 é usada para determinar o raio

de curvatura do filme no domínio de estudo, a equação 3.29 é usada para determinar a concentração de vapor no meio poroso. É importante notar que existe um forte acoplamento das duas equações, visto que a solução de 3.28 depende da concentração de vapor (C) e 3.29 depende do raio de curvatura do filme (R).

A matriz de líquido esta inicialmente cheia, ou seja, todos os poros estão cheios de líquido no instante inicial. Conforme descrito no Capítulo 2, a secagem é modelada de acordo com a formulação da teoria de percolação (PRAT, 1993), onde um poro é esvaziado de cada vez em um espaço de tempo (*time step*) variável ao longo do processo e dependente da taxa de evaporação de todos os poros nos quais está ocorrendo a evaporação. O tempo necessário para o líquido percorrer o espaço entre dois poros através do fluxo capilar no filme é inferior ao tempo de secagem de um único poro. O mesmo fato acontece com o transporte de vapor. O fluxo por difusão faz com que o vapor percorra a distância entre dois poros também em um intervalo de tempo menor do que a secagem de um poro. Yiotis *et al.* (2005) cita que o desenvolvimento do regime permanente é consistente ao analisar outros problemas onde a difusão também é dominante (por exemplo Witten e Sanders 1981; Peitggen e Saupe, 1988;) Com base nessa análise, tanto os trabalhos de Yiotis (2005) quanto de Prat *et al.* (2007) fundamentam a hipótese de que a espessura do filme de líquido e a concentração de vapor atingem seu regime permanente antes mesmo que um poro se esvazie. Dessa forma, as Equações 3.28 e 3.29 podem ser resolvidas simplificadaamente retirando-se o termo transiente.

A Equação 3.29 sugere que a concentração de vapor tem um decaimento exponencial, em que o maior valor (concentração de saturação) refere-se a um poro cheio. Essa queda ocorre numa região pequena, de ordem de grandeza de poucos raios de curvatura do filme. A evaporação fica restrita a pequenas regiões em consequência dessa redução exponencial na concentração. Devido à geometria confinada do meio poroso, o vapor satura rapidamente em toda matriz limitando a evaporação a apenas as extremidades do filme, por onde o fluxo de líquido é suprido. (YIOTIS *et al.*, 2003). Assim, é levantada outra hipótese de que a evaporação ocorre principalmente próxima à extremidade do filme e que na região do filme a concentração de vapor está saturada. Desta forma, os termos de fonte devidos à evaporação na região do filme são excluídos das equações 3.28 e 3.29.

Trabalhos anteriores, como Yiotis *et al.* (2004), Yiotis *et al.* (2007), Prat (2004) e Yiotis *et al.* (2012) utilizam estas hipóteses para simplificar de maneira significativa a solução do problema.

A principal limitação para a utilização destas hipóteses, neste caso, advém do fato de que existe uma grande área não ocupada por líquido ou filme nos instantes iniciais das simulações. Em situações com Ca_f muito menor do que 1 a extensão do filme pode ser da ordem de milímetros, ocupando uma região significativamente maior do que o volume ocupado pela gota. Com a remoção dos termos transientes das equações as regiões ocupadas pelo filme e pelo vapor chegam a sua extensão final durante o intervalo de tempo da evaporação de um único poro, que é da ordem de milissegundos.

Ao mesmo tempo a taxa de remoção de vapor na superfície do meio poroso, aumentada pelos processos de transporte turbulento, pode fazer com que a concentração de vapor seja inferior a de saturação na região próxima à superfície. Desta forma, as equações 3.28 e 3.29 serão integralmente resolvidas.

As condições de contorno para as equações 3.28 e 3.29 consideram na interface líquido/gás o raio de curvatura do filme $R = R_0$ (R_0 é o valor médio da metade da lateral da área das ligações) e para a concentração de vapor $C = C_{sat}$. Nas laterais da matriz porosa não há fluxo de filme nem de vapor. Na superfície o fluxo é prescrito, semelhante a equação 3.5 para o transporte de vapor e para a evaporação do filme para o meio externo é utilizado a equação 3.30

$$E_{f\infty} = A_f V_r \frac{(C_{sat} - C_\infty)}{R_0} \quad (3.30)$$

Logo, para a unidade $[m^2/s]$ da equação 3.28, tem-se:

$$E_{f\infty} = \frac{(4 - \pi)R^2 V_r}{\rho_l R_0} (C_{sat} - C_\infty) \quad (3.31)$$

Essa evaporação é acrescentada no balanço de massa via termo fonte, logo, é incorporada em Q_{ev} na equação 3.28.

Como a área do tamanho da seção das ligações não influencia no transporte do filme, a equação 3.28 é resolvida, para todos os poros do tipo vazio, apenas com base na influência dos poros vizinhos. Dessa forma, optou-se por utilizar o método das diferenças finitas. As equações são discretizadas e o sistema linear de equações gerado é resolvido pelo método numérico SOR (*Successive-Overrelaxation*).

Por fim, é calculado o número capilar para o escoamento através do filme, Ca_f , com base na equação 3.32(YIOTIS *et al.* 2005)

$$Ca_f = \frac{2\pi DC_{sat}\mu\beta}{(4-\pi)\rho_l R_0 \gamma} \quad (3.32)$$

O algoritmo de solução tem algumas sequências de operação modificadas com a inclusão da presença do filme de líquido. Dessa forma, para o caso em que o filme é considerado, o algoritmo tem a seguinte sequência:

- 1 Definir 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 têm 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 cluster, qual possui a menor pressão capilar. Com isso, cada cluster terá um poro sujeito a ser invadido pelo gás;
- 7 Calcular o fluxo de líquido que sai de cada poro migrando para o filme;
- 8 Calcular a taxa de evaporação do filme. Em toda a região de filme é calculada a taxa de evaporação na superfície do líquido.
- 9 Calcular a taxa de evaporação de cada poro que está no contorno externo de cada cluster e somam-se essas taxas com o fluxo de líquido (calculado no item 7) que sai do cluster para o filme, e então, obtém-se a taxa de perda de líquido cada cluster;
- 10 Calcular o tempo necessário de se esvaziar cada poro identificado no passo 6;
- 11 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;
- 12 Calcular a concentração de vapor em todos os poros através do balanço de massa descrito pela equação 3.28 referentes a evolução temporal definida no passo 11;
- 13 Calcular o raio de curvatura do filme (R) em todos os poros pela equação 3.27 referente a evolução temporal no passo 11;
- 14 O poro identificado no passo 9 torna-se vazio (tipo 1). Os demais poros identificados no passo 6 se tornam parcialmente cheios (tipo 2), isto é, ainda não foram invadidos completamente pelo gás;
- 15 A distribuição de líquido e gás no substrato é atualizada (identificando tipo 4 e 0);
- 16 Atualizar o volume de líquido contido em cada poro;
- 17 Avançar para o próximo passo de tempo;
- 18 Retornar para o passo 5.

3.2 MEIO POROSO

Conforme citado anteriormente, a distribuição de tamanho de poros e suas ligações devem ser ajustadas de maneira a representar de forma mais adequada o meio poroso em estudo. Uma vez que os dados experimentais utilizados para a validação do modelo neste trabalho, foram obtidos para meios porosos não consolidados, como areia e esfera de vidro, os parâmetros geométricos para representar o meio poroso será baseado em um modelo ideal composto de partículas esféricas. As partículas esféricas podem estar compactadas de formas diferentes. Os tipos de compactação gerarão diferentes tamanhos e formas dos poros entre as esferas. As Figuras 3.10 e 3.11 mostram uma representação esquemática dos tipos de compactação das esferas de um meio poroso. O ângulo (\mathcal{G}) entre as partículas podem variar entre o limite de 60° a 90° . O primeiro caso corresponde ao menos compactado (compactação cúbica, Figura 3.10(a)) e o segundo caso o mais compactado (compactação hexagonal, Figura 3.10 (b)). A porosidade média do substrato não depende do tamanho da partícula, mas sim do tipo de compactação que é determinado por \mathcal{G} .

Para o primeiro caso, compactação cúbica ($\mathcal{G}=90^\circ$), a porosidade média é igual a 47,64%. Todo poro tem a forma de um octaedro com as faces esféricas e côncavas (Figura 3.10 (a)). O poro é formado pelo espaço formado entre oito partículas adjacentes. 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 3.910(a). O raio é então estimado em 41% do raio da partícula do meio poroso.

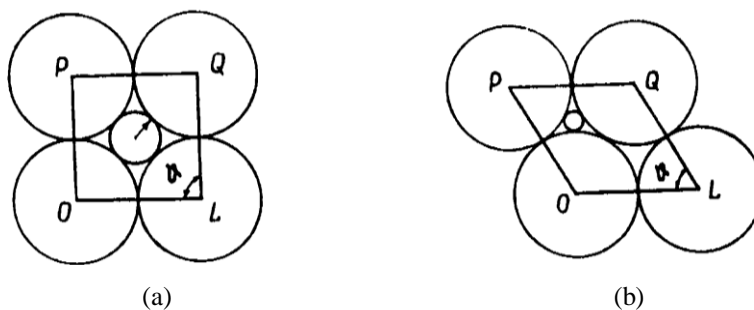


Figura 3.10 - Compactação das esferas com a formação dos poros. (a) Compactação cúbica ($\mathcal{G}=90^\circ$). (b) Compactação hexagonal ($\mathcal{G}=60^\circ$).

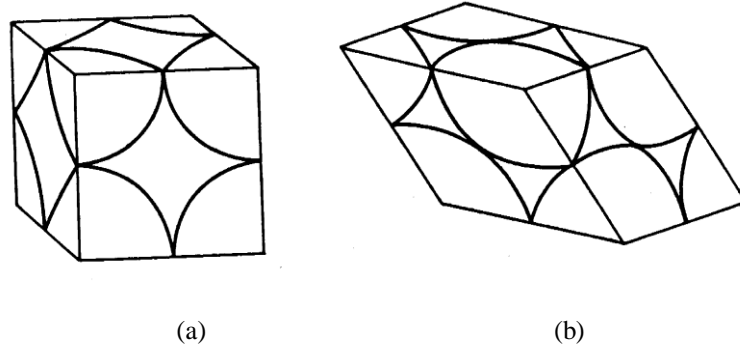


Figura 3.11 - Representação esquemática da geometria determinando os poros com partículas perfeitamente esféricas. (a) Compactação cúbica. (b) Compactação hexagonal (LUIKOV, 1966).

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 liga dois poros adjacentes é de 15,5% do raio da partícula (Figura 3.11 (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). Dessa forma, a aresta da seção quadrada das ligações entre os poros estão em um intervalo de 15,5 e 41% do raio da partícula. Logo:

$$0,155\text{Raio da partícula} \leq \text{lateral} \leq 0,41\text{Raio da partícula} \quad (3.33)$$

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.

$$\begin{aligned} V_{\text{poro}} &= \text{Porosidade} \cdot V_{\text{arranjo}} \\ \frac{4}{3} \pi r_p^3 &= \text{Porosidade} \cdot V_{\text{arranjo}} \end{aligned} \quad (3.34)$$

Baseado no volume do arranjo apresentado na Tabela 3.1 é possível estimar o raio aproximado dos poros em cada um dos tipos de empacotamento (cúbico, tetrahédrico e romboédrico). Assim os raios dos poros estão em um intervalo de 25,4 a 96,9% do Raio da partícula, logo:

$$0,254\text{Raio da partícula} \leq r_p \leq 0,969\text{Raio da partícula} \quad (3.35)$$

TABELA 3.1 - DETERMINAÇÃO DO RAI DO PORO PARA CADA TIPO DE ARRANJO

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

Onde h é o comprimento do lado do arranjo.

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_o , 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_o .

3.2.1 Distribuição dimensional dos poros e ligações

Grande parte dos estudos realizados com modelos de escalas de poros utiliza distribuições aleatórias e uniformes, caracterizando os meios porosos através dos valores máximos e mínimos para o diâmetro de poros e/ou ligações (entre outros TSIMPANOIANNIS *et al.*, 1999; YIOTIS *et al.*, 2005 e PRAT, 2007). Estudos experimentais, como Mathews *et al.* (1995) e Lindquist e Venkatarangan (1999), sugerem que a distribuição de probabilidade mais adequada para alguns meios porosos não-consolidados, como areia e esferas de vidro, seja uma distribuição lognormal. Em 2006, Moreira e Rajagopal (2006) apresentaram resultados de simulações utilizando uma matriz porosa tridimensional onde compararam a distribuição uniforme, linear e exponencial dos tamanhos dos poros e ligações. Como resultado, a distribuição que apresentou o melhor ajuste na curva porosométrica foi a

distribuição exponencial para as ligações e diâmetros dos poros. Com base nesses resultados, adota-se para a distribuição das ligações a seguinte equação exponencial:

$$lateral = R_{\min} + (R_{\max} - R_{\min}) \exp(-\lambda * aleatorio) \quad (3.36)$$

Onde R_{\max} e R_{\min} são os valores máximos e mínimos da lateral da seção transversal quadrada, $R_{\min} = 0,155 * Raio da partícula$ e $R_{\max} = 0,41 * Raio da partícula$. O valor de λ é constante e ajustado conforme as características do meio poroso. Baixos valores de λ geram distribuições com valores da lateral mais próximo do valor de R_{\max} e altos valores de λ , geram distribuições com valores da lateral mais próximo do valor de R_{\min} .

Para a distribuição dos diâmetros dos poros tem-se.

$$r_p = R_{poromin} + (R_{poromax} - R_{poromin}) \exp(-\lambda * aleatorio) \quad (3.37)$$

Onde $R_{poromin} = 0,254 * Raio da partícula$ e $R_{poromax} = 0,969 * Raio da partícula$ (ver equação 3.35).

3.3 AVALIAÇÃO DA PRECISÃO DO MODELO COMPUTACIONAL

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 do meio poroso.

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 bidimensional foi feita com a finalidade de escanear o volume. Essa imagem representava uma vista integral do

topo da gota. Baseado nesta imagem, uma fatia de 1,5 mm e 45° foi selecionada para se obter as imagem 2D (Figura 3.12).

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 de massa de líquido. A saída de dados dessa imagem nos proporciona a concentração de líquido dentro da matriz porosa no eixo inferior (eixo Y) em kg/m.

A Figura 3.13 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.

Com relação à precisão das imagens obtidas através da técnica NMR, é importante destacar que existe uma significativa perda de sinal de imagem durante os experimentos. Essa perda de sinal é devido ao fenômeno de relaxação que ocorre no procedimento da NMR (maiores detalhes podem ser obtidos em Reis, 2000). Nos estágios iniciais do processo de secagem, a perda de sinal pode chegar até 2,0 % para a geração dos gráficos do perfil de concentração 1D e 9,5% para o caso das imagens 2D. Nos estágios finais da secagem a perda de sinal chega a 7,9 % para o perfil 1D e 33% para a imagem 2D.

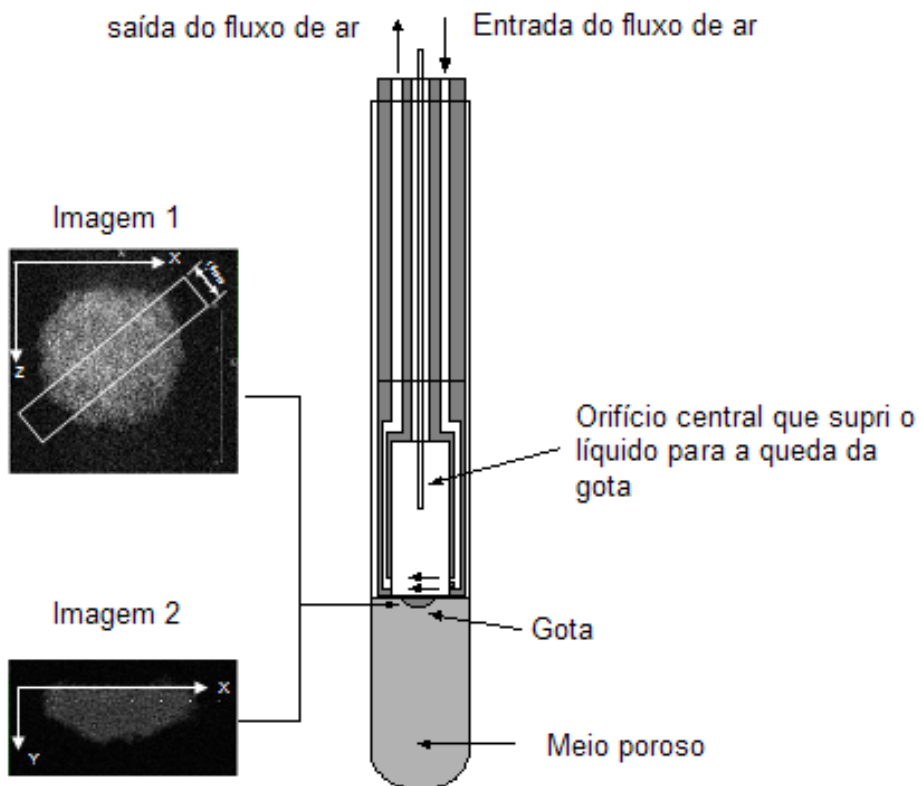


Figura 3.12 - Representação do tubo de ensaio contendo a matriz porosa e exemplos de imagens obtidas; imagem 1, vista superior (XZ) com representação esquemática da fatia de 1.5 mm que é utilizada para se obter a imagem lateral. Imagem 2, vista lateral (XY) da gota dentro do substrato. Os pontos claros representam a parte do substrato ocupado por líquido e os pontos escuros a partícula do meio poroso (REIS *et al.*, 2003).

Para determinar a concentração mínima detectável pela NMR, o material poroso do tubo de ensaio foi pesado antes da gota ser depositada e após a secagem, a fim de que se houvesse qualquer líquido residual detectado após a secagem, iria aparecer como um aumento no peso da amostra. As medições indicaram uma massa residual média equivalente a 4,6 % da massa inicial da gota para os dados obtidos na geração dos perfis de concentração 1D enquanto que para as imagens 2D o valor da concentração mínima detectável foi maior, com a massa residual entorno de 11 %. Isso mostra que o uso de imagens NMR para estudar o transporte de líquidos em regiões não saturadas é limitado.

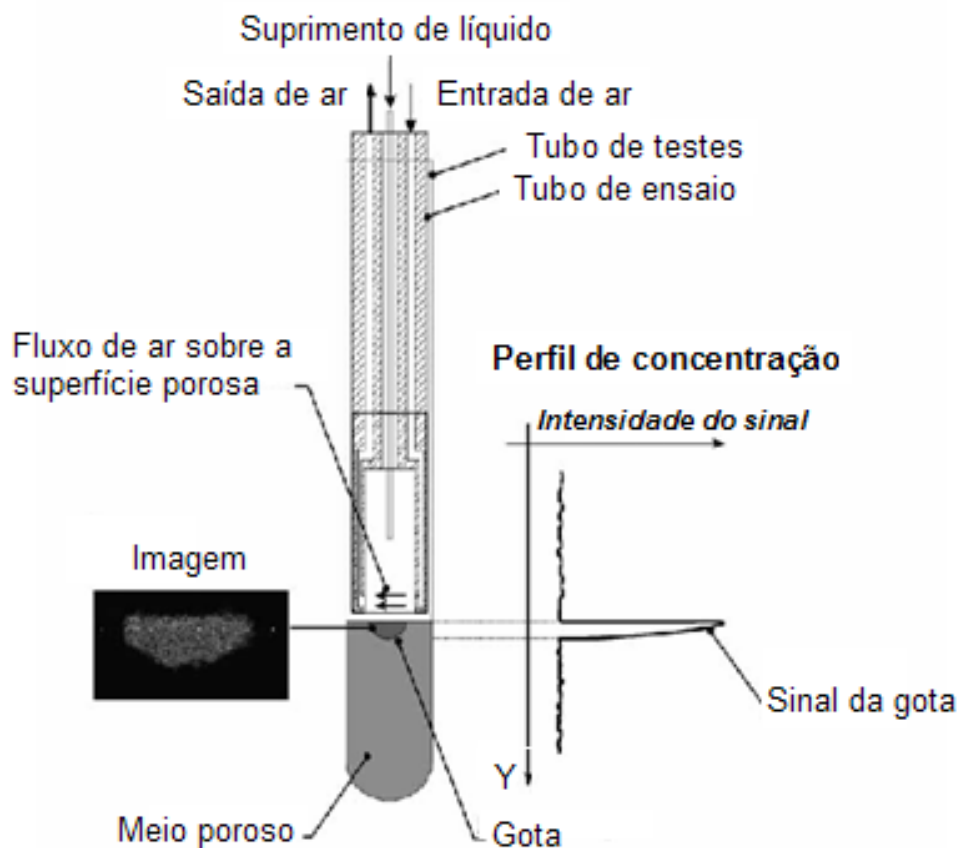


Figura 3.13 – Visão lateral da imagem do líquido logo após absorção no substrato e o correspondente perfil de concentração de líquido (REIS *et al.*, 2003).

Para avaliar a precisão do modelo, os resultados obtidos através das simulações numéricas serão comparados com os resultados experimentais (Reis *et al.*, 2003; Reis *et al.*, 2006) de três modos.

O primeiro modo será a comparação dos resultados das simulações com os dados obtidos em imagens 2D via técnica de ressonância magnética nuclear realizada nos experimentos. A análise será somente qualitativa onde a avaliação baseia-se na observação da variação do formato da gota ao longo do período de evaporação.

O segundo modo de comparação será através do gráfico dos perfis de concentração de líquido. A comparação será quantitativa de forma a analisar a diferença entre os valores de concentração experimentais e numéricos. Como a distribuição dos diâmetros dos poros e

das ligações tem variações conforme as probabilidades de distribuição estudadas haverá valores diferentes para cada simulação.

Em terceiro, serão comparados de forma tanto qualitativa quanto quantitativa entre às curvas dos gráficos das taxas de evaporação.

Além do mais, serão apresentados os gráficos da concentração de vapor na matriz porosa e da concentração de líquido na região do filme para corroborar na análise da precisão do modelo.

3.4 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. A parametrização mostrada neste item é semelhante à apresentada nos trabalhos de Reis *et al.* (2003) e Reis *et al.* (2006). Com o objetivo de permitir uma parametrização dos resultados, os dados são apresentados no próximo Capítulo em sua forma adimensional.

Para se estimar a escala de tempo são necessários o valor da massa da gota e da taxa de evaporação. O primeiro é conhecido, porém a taxa de evaporação não (antes de ser calculada). Então, para se obter uma ordem de grandeza considera-se a taxa da evaporação de uma superfície de líquido livre, não imersa em meio poroso. O fluxo de massa (F_0) dessa taxa, é determinado nos experimentos com base na velocidade externa do gás (v_r) e na concentração de vapor na superfície do líquido, de maneira análoga a equação 3.5. A área da superfície livre é semelhante a área característica da gota antes de tocar o solo (A_0), sendo ($A_0 = \pi r_0^2$). Os valores da taxa de evaporação, $F_0 A_0$, em cada caso estudado são extraídos de Reis *et al.* (2003).

Dessa forma, a escala de massa e tempo normalizadas pela massa da gota e taxa de evaporação são dadas por:

$$M^* = \frac{m}{M_0} \quad T^* = \frac{t}{T_0} \quad (3.38)$$

Onde T^* é a fração mássica, m é a massa de líquido, M_0 é a massa inicial de líquido, T^* é o tempo adimensional, t é o tempo em segundos e T_0 é a escala de tempo característica do processo:

$$T_0 = \frac{M_0}{F_0 A_0} \quad (3.39)$$

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 líquido de uma forma adimensional. O perfil é expresso em kg/m porque representa a concentração de líquido em uma camada da matriz dividida pela distância entre camadas. A idéia seria representar a concentração de saturação de líquido no meio poroso para kg/m usando a A_0 . A concentração de líquido pode então ser adimensionalizada da seguinte forma:

$$C^* = \frac{c}{c_0} \quad (3.40)$$

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

Adicionalmente, para analisar de maneira mais adequada a dinâmica de formação do filme, define-se a variável raio de curvatura adimensional do filme, dado por:

$$R_f^* = \frac{R}{R_0} \quad (3.41)$$

Onde R é o raio de curvatura do filme e R_0 é o raio médio das ligações do meio poroso, que representa o raio médio de curvatura dos meniscos nas interfaces gás/líquido.

As concentrações de vapor são mostradas em sua forma adimensional como:

$$C_v^* = \frac{C_v}{C_{v,sat}} \quad (3.42)$$

onde C_v^* é a concentração adimensional de vapor, C_v é a concentração de vapor em cada poro [kg/m^3] e $C_{v,sat}$ é a concentração de saturação de vapor no gás nas condições de pressão e temperatura do experimento [kg/m^3].

3.5 Geometria inicial da gota

Como observado na Figura 3.15(b), o formato da gota no instante inicial do processo de secagem 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 o espalhamento durante a absorção se da através da razão chamada de fator de espalhamento (*spread factor*) do por R^* e H^* , sendo:

$$R^* = \frac{r_{gota}}{r_0} \quad (3.43)$$

$$H^* = \frac{h_{gota}}{r_0} \quad (3.44)$$

Onde h_{gota} é a profundidade que a gota atinge após absorção. A Figura 3.14 mostra um desenho esquemático dessas relações no formato da gota.

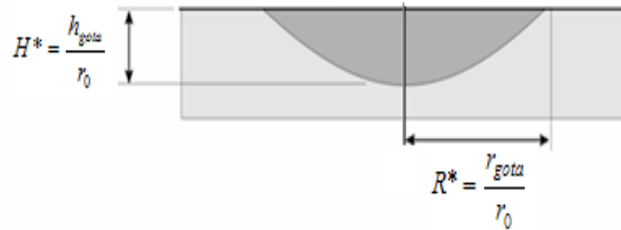


Figura 3.14 - Definição do Fator de espalhamento (R^*) e da profundidade de penetração (H^*). Fonte: Reis (2000).

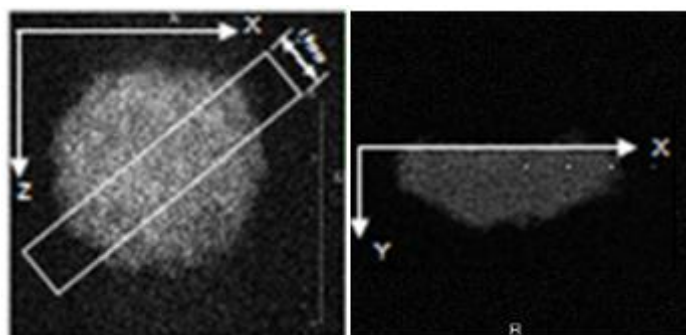
Portanto, as dimensões iniciais da gota inseridas no modelo, para cada meio poroso, são determinadas com base em R^* e H^* . Esses valores foram obtidos dos experimentos de Reis *et al.* (2003) e Reis *et al.* (2006) e são mostrados na Tabela 2.2. Nota-se que os valores R^* e H^* são a média de três experimentos repetidos para em todos os casos exceto Água / esferas de vidro 400 μm onde houve um só experimento.

A geometria inicial da gota considerada no modelo numérico segue a geometria do experimento de Reis *et al.* (2003). Para isso, há uma análise detalhada da geometria inicial da gota experimental, pois seu formato inicial não é uma geometria simples de ser definida. Observando-se a imagem 2D da Figura 3.15(b), nota-se que o formato da gota é irregular, pois não é formada uma curvatura perfeita ao longo de seu contorno. A da Figura 3.15(a) mostra uma vista superior da gota imersa no meio poroso. O mesmo formato irregular é visto quando se observa o perímetro da área superficial. É de se esperar que sejam

observadas irregularidades no formato, uma vez que a gota está imersa nos interstícios dos poros, que também não são regulares, devido às características do empacotamento do meio poroso.

TABELA 2.2 – Valores de R^* e H^* obtidos nos experimentos de Reis *et al.* (2003) e Reis *et al.* (2006)

	Numero de experimentos	R^*	H^*
Água / esferas de vidro 400 μm	1	1,53	1,73
Água / esferas de vidro 120 μm	3	$1,74 \pm 0,01$	$1,40 \pm 0,09$
Água / partículas de areia 180 μm	3	$2,10 \pm 0,10$	$1,10 \pm 0,09$
DEM / esferas de vidro 120 μm	3	$1,75 \pm 0,13$	$1,40 \pm 0,17$



(a)

(b)

Figura 3.15 - (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 (REIS *et al.*, 2003).

Para que o formato da gota no modelo seja o mais realista ao caso experimental, inicialmente determina-se um valor para a distância entre poros e a distribuição do diâmetro dos poros de modo a garantir que a porosidade da matriz porosa tenha o mesmo valor da porosidade medida nos experimentos.

Em seguida, define-se o diâmetro e profundidade da gota com base nos valores de R^* e H^* . Utiliza-se das equações 3.33 e 3.34 ao valor do raio da gota antes do impacto (r_0) em cada caso a ser simulado.

Como a geometria é similar a uma semi-elipsoide, é delimitada a curva de uma elipse pela equação 3.45 baseada no diâmetro e profundidade da gota.

$$\frac{x^2}{r_{gota}^2} + \frac{y^2}{h_{gota}^2} = 1 \quad (3.45)$$

Essa curva é uma referência e os poros dentro de seu perímetro são considerados cheios de líquido. A partir de então, realiza-se uma comparação visual em relação a imagem 2D. Em cada camada de poros, a quantidade de poros cheios dentro do perímetro da curva elíptica é aumentada ou diminuída para que, visualmente, o contorno da gota do modelo seja similar ao experimental.

Após a determinação da quantidade de poros cheios em cada camada do meio poroso, compara-se a concentração de massa de líquido destes poros com o perfil de concentração de líquido experimental. A Figura 3.16 mostra um perfil típico de concentração de líquido de uma gota obtido no experimento a ser estudado no caso base (Capítulo 4). No eixo y , tem-se a profundidade ao longo da matriz porosa e em x a concentração de líquido em kg/m , ambos estão na forma adimensional. Basicamente, a concentração em cada camada da matriz porosa do modelo matemático é obtida pela razão entre a soma das massas de líquido de todos os poros cheios pela distância entre as camadas de poros. Para que a concentração de líquido no modelo seja equivalente ao experimental, a distribuição do diâmetro dos poros é ajustada alterando-se a porosidade local de cada camada. Assim, modifica-se a concentração de líquido de cada camada. Em resumo, a concentração de líquido de cada linha é calculada e se o valor não corresponder ao valor experimental a distribuição dos diâmetros dos poros em cada camada é ajustada. O ajuste é realizado variando-se os valores da variável λ .

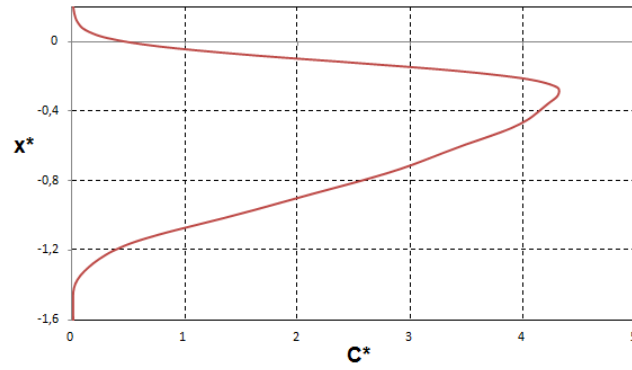


Figura 3.16 – Perfil de concentração de líquido típico de uma gota. Reis *et al.* (2003)

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos pelo modelo computacional desenvolvido. A avaliação dos resultados é baseada na comparação com os experimentos de Reis *et al.* (2003) e Reis *et al.* (2006). Inicialmente, a Seção 4.1 descreve as quatro diferentes configurações simuladas. A primeira configuração, escolhida como o caso base (Seção 4.2), simula a evaporação de uma gota de água totalmente imersa em um meio poroso composto por esferas de vidro com $400\mu\text{m}$ de diâmetro. A Seção 4.3 analisa a influência das características do meio poroso, apresentando resultados de simulações com a mesma gota do caso base em meios porosos compostos por esferas de vidro de diâmetro $120\mu\text{m}$ e partículas de areia com diâmetro de $180\mu\text{m}$. A Seção 4.4, apresenta os resultados da simulação da evaporação de uma gota de outro líquido, dietil malonato (DEM), em um meio poroso composto por esferas de vidro com $120\mu\text{m}$ de diâmetro.

4.1. CONFIGURAÇÕES SIMULADAS

A Tabela 4.1 apresenta os parâmetros experimentais que são utilizados nas simulações, indicando o tipo de líquido, configuração do meio poroso, característica do fluxo atmosférico representado pelo ν_r , número capilar para o escoamento através do filme, Ca_f , e demais parâmetros característicos usados para normalizar os resultados (r_0 , M_0 e T_0).

As propriedades dos líquidos simulados, água e DEM, são consideradas nas mesmas condições em relação aos experimentos (a temperatura de 18°C). Tais valores são apresentados por Reis (2000) e exibidos na Tabela 4.2.

Os resultados foram processados em um computador Intel Core(TM) i7 950 @ 3,07GHz 3,06 GHzA com 6,0 GB de memória instalada (RAM). O tempo de processamento de cada simulação foi: 24 horas para o caso base, 15 dias para a configuração da gota de água em um meio poroso de esferas de vidro com $120\mu\text{m}$ de diâmetro, 30 horas para a configuração da gota de água em um meio poroso de partículas de areia e 70 horas para a configuração da gota de DEM em um meio poroso de esferas de vidro com $120\mu\text{m}$ de diâmetro.

TABELA 4.1 – Sumário das configurações experimentais dos quatro configurações estudados.

	Configuração 1	Configuração 2	Configuração 3	Configuração 4
Líquido	Água	Água	Água	Dietil malonato
Substrato	Esfera de vidro 400 μ m	Partículas de areia 180 μ m	Esfera de vidro 120 μ m	Esfera de vidro 120 μ m
Porosidade	0,41	0,41	0,41	0,41
Ca_f	0,3	0,1	0,6	0,7
r_0 [mm]	1.66	1.66	1.66	1.15
M_0 [μ g]	19,2	19,2	19,2	6,65
T_0 [min]	304,4	304,4	304,4	3082
ν_r [m/s]	0.0079	0.0079	0.0079	0.0079

TABELA 4.2 – Propriedades físicas dos líquidos utilizados nas simulações para uma temperatura de 18°C (REIS *et al.*, 2003; REIS *et al.*, 2006).

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
Pressão de vapor	2063.08	16.68
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

4.2. CASO BASE

Nesta seção, são apresentados os resultados obtidos nas simulações para o caso da evaporação de uma gota de água imersa em um meio poroso composto por esferas de vidro com 400 μ m de diâmetro e ν_r igual a 0,0079 m/s.

4.2.1. Configuração inicial

A configuração inicial da gota é determinada conforme o procedimento descrito na Seção 3.5. Inicialmente, a distribuição dos diâmetros dos poros na matriz porosa é dada pela equação 3.37. O valor de λ e da distância entre poros foram definidos de modo a garantir que o valor da porosidade da matriz seja igual ao experimental, 0,41. Os valores definidos para λ e a distância entre poros são 10 e 0,25mm, respectivamente. A porosidade da matriz é de 0,41. O raio da gota inicial do modelo numérico é 2,53 mm.

O tamanho total da matriz porosa utilizada para a simulação do problema é definido de forma que a borda da matriz (contornos laterais e inferior) não influenciem os resultados. Dessa forma, foram realizadas várias simulações com tamanhos diferentes da matriz, e os resultados foram comparados. O tamanho da matriz é selecionado com base no comportamento da curva de saturação de líquido, gráfico $M^* \times T^*$. O resultado dessas simulações é apresentado no Apêndice A. Para a presente configuração, as dimensões 142x72x142 são definidas para a matriz porosa (o tamanho da matriz corresponde ao número de poros em cada direção) para o caso da gota com o filme de líquido. Para a gota sem o filme as dimensões são: 101x48x101.

O valor da constante λ , utilizada para a distribuição dos valores da lateral das ligações (equação 3.36), é ajustado com base nas características do meio poroso. Deste modo, para determinação de seu valor, várias simulações foram realizadas variando-se o valor de λ e observando a diferença no comportamento da curva de concentração de líquido. O resultado cuja curva mais se aproxima à curva do resultado experimental é considerado o mais adequado. A comparação entre as simulações é apresentada na Seção 4.2.2.4. Com base nas simulações em questão, escolheu-se o valor de 10 para λ .

Da mesma maneira que o valor de λ é determinado, obtém-se o valor de β . Conforme escrito na Seção 3.1.3, β é o fator de resistência ao escoamento do filme ao longo do meio poroso. Seu valor é diretamente dependente das características do meio poroso. Assim, variou-se o valor desse parâmetro nas simulações e observou-se os resultados da curva M^* x T^* . O resultado mais próximo ao experimental, para as características do meio poroso do presente caso, foi de $\beta = 3,5 \cdot 10^5$. A Seção 4.2.2.3 mostra os resultados dessa análise.

4.2.2 Processo de evaporação

Nesta Seção são descritos os resultados referentes às simulações realizadas nos estudo do caso base. Inicialmente são apresentados os resultados da simulação para o caso sem considerar a inclusão do filme. As Seções 4.2.2.1 e 4.2.2.2 descrevem os resultados referentes à inclusão dos efeitos gravitacionais e viscosos, respectivamente. A Seção 4.2.2.3 mostra os resultados da inclusão da presença do filme de líquido e a Seção 4.2.2.4 apresenta os resultados referentes aos efeitos da distribuição dos tamanhos dos poros e ligações.

A Figura 4.1 mostra a evolução temporal do formato da gota no interior do meio poroso, de maneira a permitir uma comparação entre as imagens 2D dos experimentos e a simulação. Analogamente às imagens obtidas experimentalmente, os resultados numéricos deste item representam uma somatória da concentração de líquido nos poros em uma fatia de 1,5 mm da gota.

No decorrer da evaporação, pode-se constatar que a concentração de líquido em todo contorno é gradualmente reduzida, o que é evidenciado pelo escurecimento das bordas da região saturada, evidenciando que a evaporação acontece em todo contorno da gota, não apenas na região próxima à superfície.

As imagens experimentais e numéricas apresentam um avanço de frentes de evaporação de formato significativamente irregular durante o processo de secagem, gerando padrões característicos chamados de *capillary fingers*, caracterizados pela existência de vários *clusters* desconectados. Tal fato pode ser notado mais claramente nas imagens da Figura 4.1 com M^* inferior a 0,550.

Apesar do surgimento dos *capillary 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, o que também é notado nos resultados numéricos.

É importante destacar que, a partir de $M^* = 0,465$, os níveis de concentração de líquido nas imagens dos experimentos são significativamente menores que nos resultados obtidos pelo modelo. Conforme citado por Reis *et al.* (2003) e descrito na Seção 3.3, as imagens obtidas por NMR apresentam uma sensível perda de sinal para baixas concentrações de líquido. As concentrações mínimas detectáveis nas imagens 2D não correspondem com as mínimas detectáveis nos perfis de concentração. Desta forma, os autores recomendam que sejam realizadas análises para os estágios posteriores da secagem por meio dos perfis de concentração de massa de líquido. Enquanto as imagens 2D permitem uma análise mais qualitativa do processo de evaporação, os perfis de concentração de líquido podem permitir também uma análise também quantitativa.

A Figura 4.2 mostra os perfis de concentração de líquido dos resultados experimentais e numérico. Como pode ser observado, no instante inicial pelos resultados experimentais, há uma pequena concentração acima da superfície superior ($X^* = 0,0$). Essa quantidade de líquido existe devido às irregularidades da disposição do meio poroso. Já no perfil de concentração do resultado numérico, essa concentração acima de $X^* = 0,0$ não existe, pois o meio poroso é considerado nivelado na superfície superior.

Nota-se que a concentração próxima à superfície superior tem valor máximo entorno de $C^* = 4,3$, o que indica que há aproximadamente 4,3 vezes mais massa de líquido nessa região do que haveria em uma região completamente saturada cujo raio é r_0 . A concentração tende à zero na profundidade $X^* = -1,4$, semelhante a profundidade onde não se observa a presença de líquido imagens 2D.

$M^* = 1,000$  $M^* = 0,895$  $M^* = 0,800$  $M^* = 0,705$  $M^* = 0,550$ 

Figura 4.1 - Evolução temporal das imagens 2D da gota de água dentro do meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $400\mu\text{m}$. Simulação no lado esquerdo e dados experimentais no lado direito (REIS *et al*, 2003).

$M^* = 0,465$



$M^* = 0,380$



$M^* = 0,260$



Figura 4.1 – (continuação)

Nos resultados experimentais pode-se observar que as concentrações próximas à superfície decaem mais rapidamente, alterando o formato do perfil de concentração. Pode-se observar que o ponto de maior concentração de líquido situa-se em $X^* = -0,3$ nos instantes iniciais da evaporação, passando para aproximadamente $X^* = 0,6$ a partir de $M^* < 0,465$. Este comportamento não é bem capturado pelo modelo. Apesar de uma gradual redução da profundidade do ponto de concentração máxima, esta redução parece ocorrer de maneira mais lenta nos resultados do modelo.

Com o decorrer do tempo, não há variação significativa no formato do perfil de concentração, havendo uma redução quase que uniforme em toda profundidade da gota no experimento. 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. Os gráficos da simulação também mostram que no restante do processo as alterações no formato dos perfis são pouco significantes, sugerindo uma secagem mais uniforme, como a obtida experimentalmente.

De maneira geral, existe uma boa concordância entre as imagens e perfis obtidos experimentalmente e pelo modelo numérico, principalmente se for levada em consideração a natureza aleatória do meio poroso.

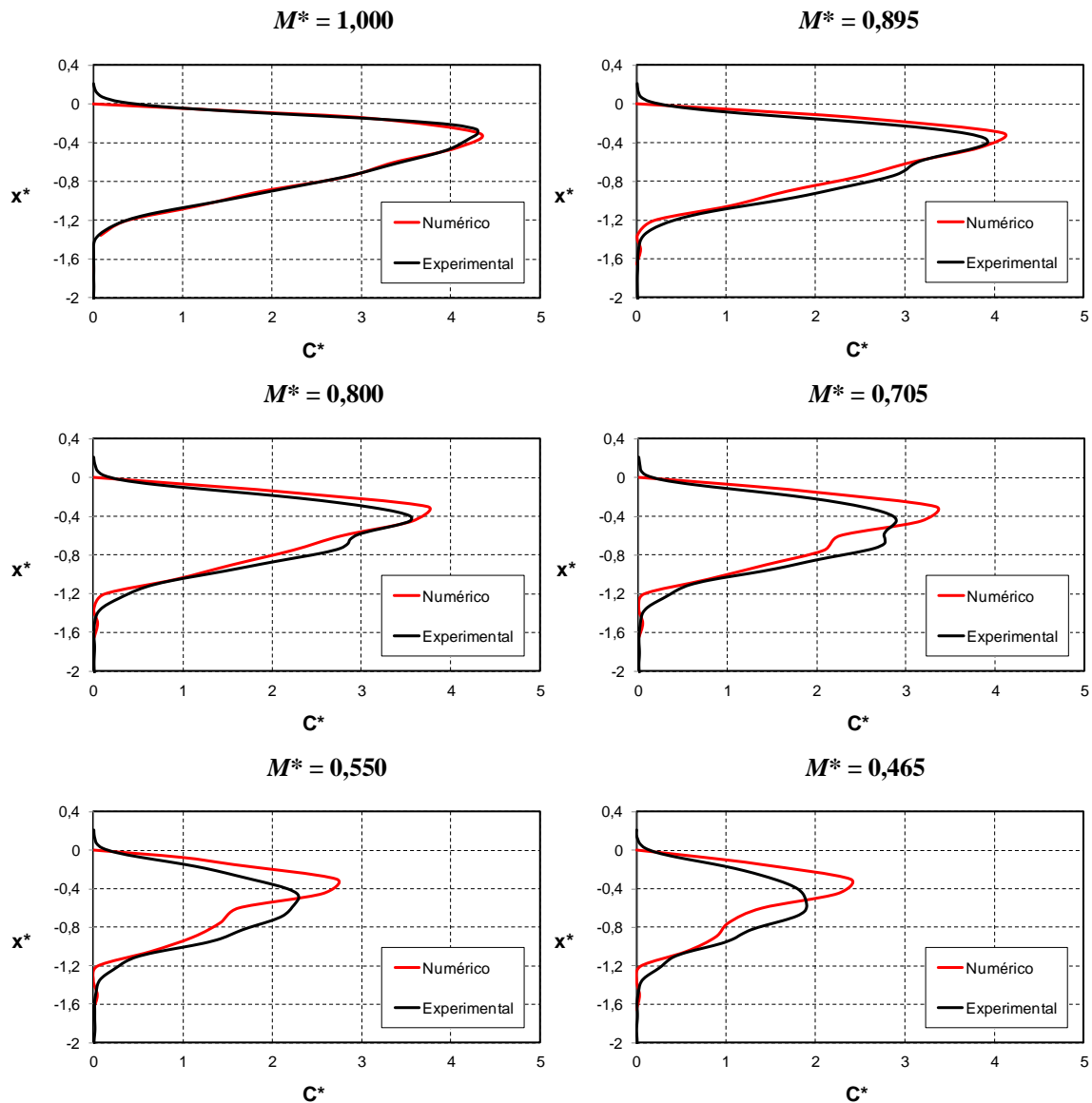


Figura 4.2 - Evolução temporal do perfil de concentração de líquido da gota de água dentro do meio poroso com 400 μm de diâmetro das partículas. A curva na cor preta é referente aos dados experimentais (REIS *et al.*, 2003) e as curvas nas cores vermelha e verde são os resultados das simulações para o caso sem o filme e com o filme respectivamente. O eixo X^* representa a profundidade da gota adimensional e o eixo C^* é a concentração adimensional de líquido.

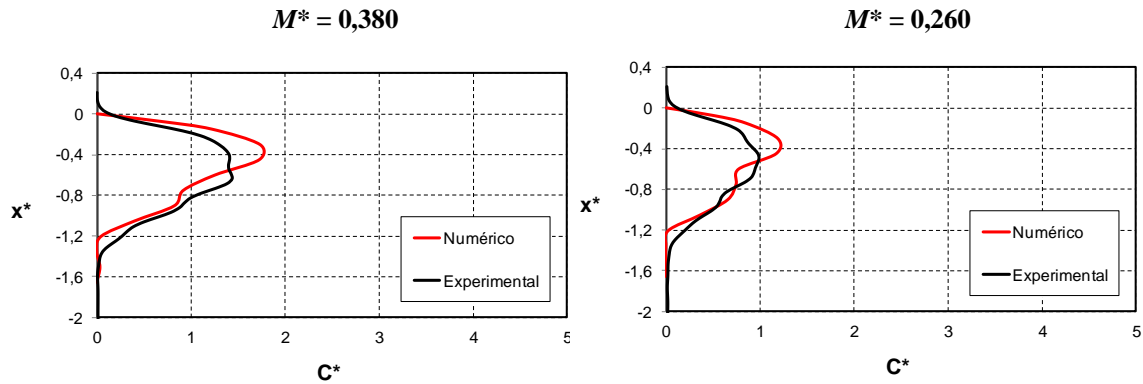


Figura 4.2 - Continuação.

A evolução temporal da concentração de vapor (C_v^*) é mostrada na Figura 4.3. O gráfico apresenta a região da matriz de -1 a -35 na profundidade e 25 a 75 na lateral. Em vermelho são mostrados os poros cheios de líquido. Os resultados estão no plano central da matriz.

Nos primeiros instantes ($M^* = 0,895$), o vapor se dispersa rápido criando um gradiente de concentrações próximo ao contorno da gota. A região de concentração saturada de vapor situa-se bem próxima à região saturada de líquido. A partir de $M^* = 0,705$, os *clusters* desconectados começam a aparecer e observa-se um gradiente de concentração próximo a superfície superior. Nos instantes finais, os poros cheios estão mais desconectados e distantes da superfície superior, logo, nota-se um gradiente de concentração em toda superfície. Esse gradiente é maior em relação as demais regiões, pois a remoção do vapor para o meio externo é maior do que o transporte difusivo do vapor no interior do meio poroso.

A Figura 4.4 apresenta a curva de evolução no tempo da massa de líquido no meio poroso. Estes valores são obtidos a partir da integração dos perfis de concentração (Figura 4.2) na direção vertical. A massa de líquido e o tempo estão na forma adimensional. A linha vermelha representa o resultado da simulação da gota sem a presença de filme e alinha na cor preta, a curva do experimento. Os autores (REIS *et al.*, 2003) relatam que ao final do experimento observou que ainda havia líquido na matriz, uma quantidade entorno de 4,9% do valor da massa inicial. Assim, para evidenciar a região no gráfico com fração mássica de 4,9% da massa inicial é traçada uma curva da cor preta tracejada.

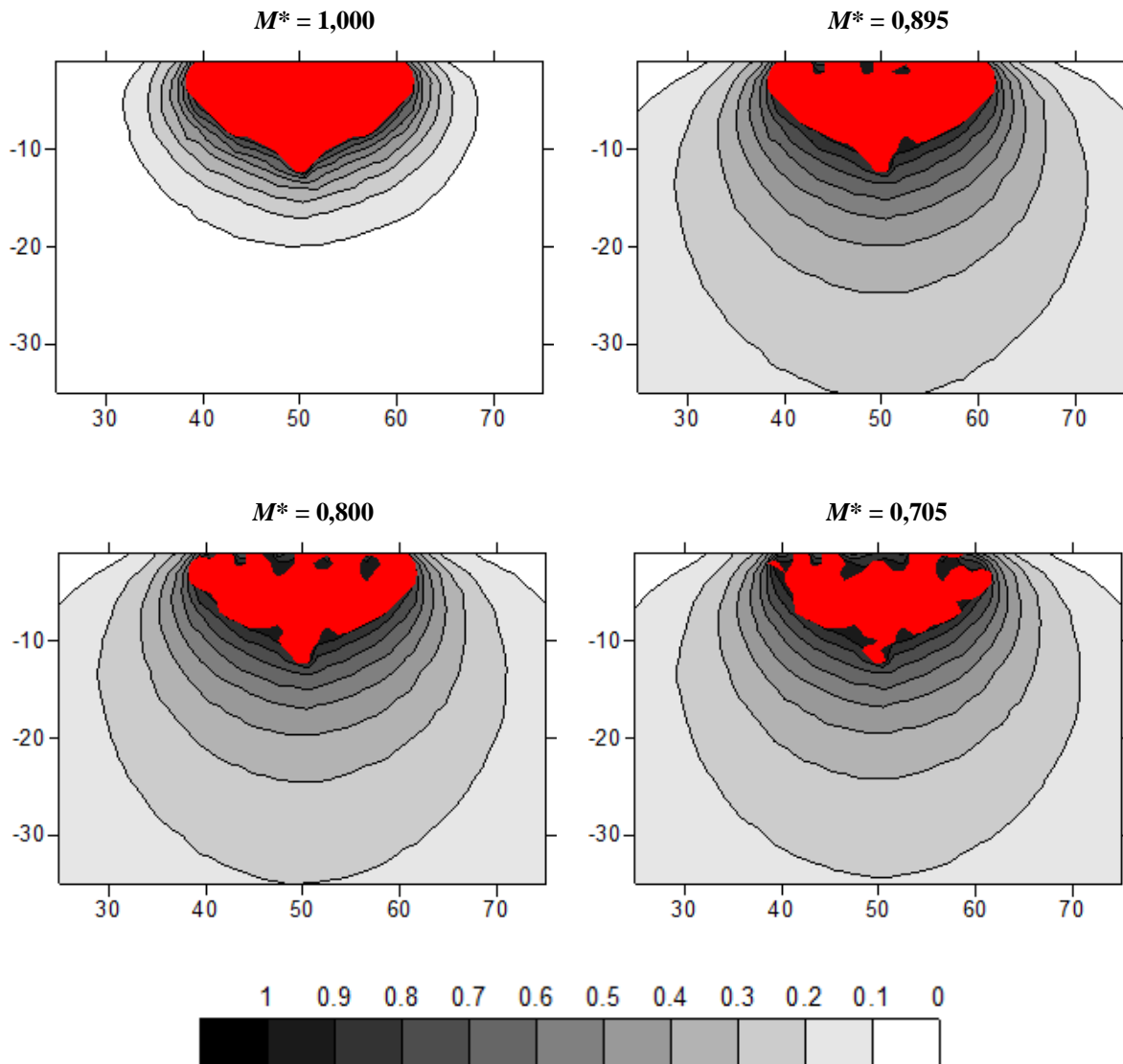


Figura 4.3 - Evolução no tempo da concentração de vapor (C_v^*) dentro do meio poroso para a simulação da gota de água sem a presença do filme. Vista do plano central da matriz (101x42x101) mostrando apenas a região de 25 a 75 na largura e -1 a -35 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho.

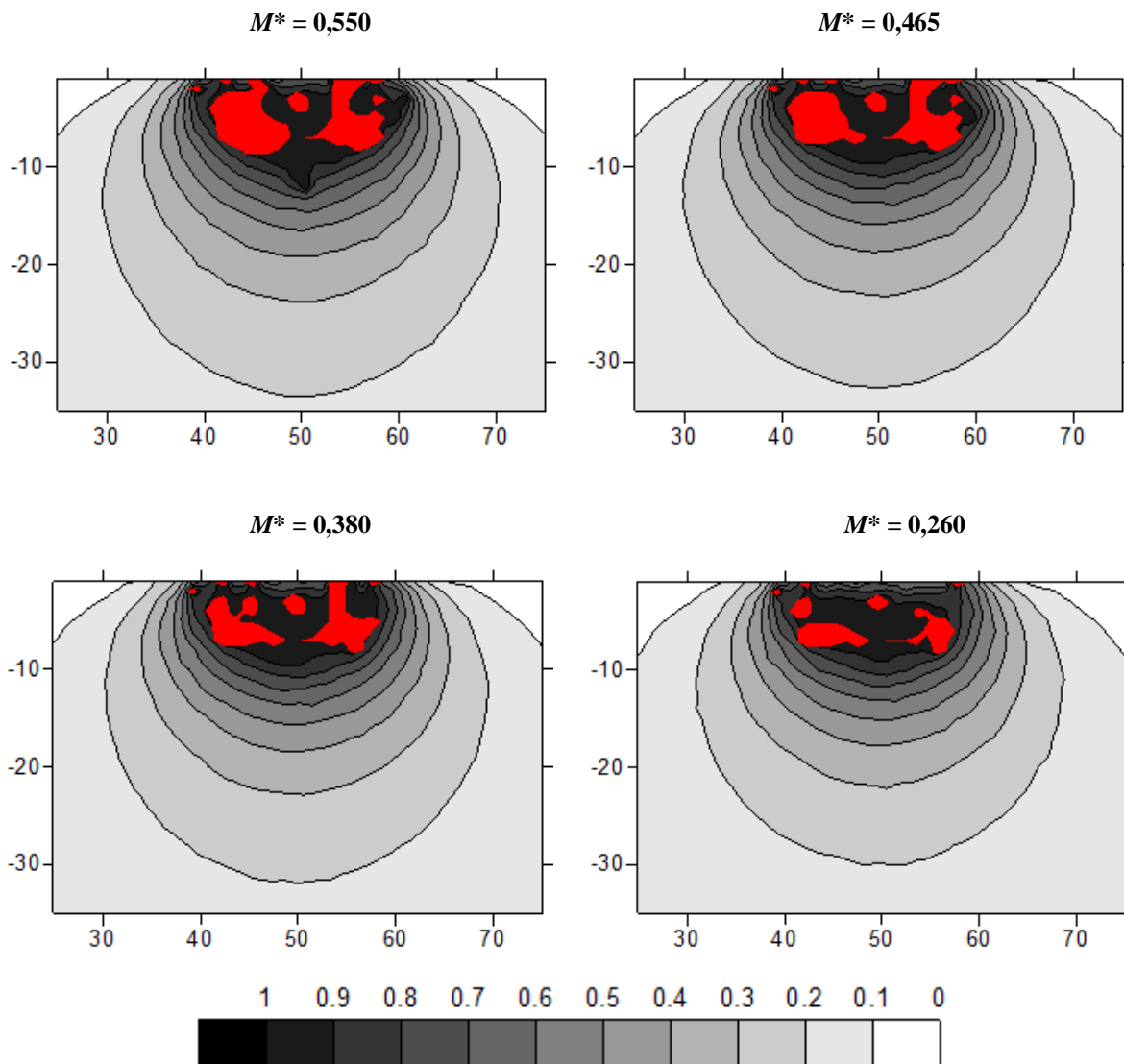


Figura 4.3 – (continuação)

O comportamento da curva numérica da Figura 4.4 segue próxima à curva experimental (linha preta) por quase todo o período (até $T^* = 4,5$). A partir de então, a curva passa a apresentar uma evolução mais suave e mais próxima à curva experimental preta tracejada. Nos instantes finais, a curva permanece suave até o momento em que a curva preta apresenta concentração zero. Nesse mesmo instante, a curva numérica apresenta uma concentração de 5% do valor da massa inicial o que coincide com a curva experimental preta tracejada. Esse resultado mostra que o resultado experimental esta em boa

concordância com os dados experimentais, pois no período final a curva preta tracejada mostra-se mais realista a aplicação.

Os resultados do comportamento das taxas de evaporação são apresentados na Figura 4.5. As variáveis estão na forma adimensional. Em vermelho, tem-se a taxa de evaporação para o caso da gota sem filme e em preto a curva experimental que é derivada da curva preta da Figura 4.4.

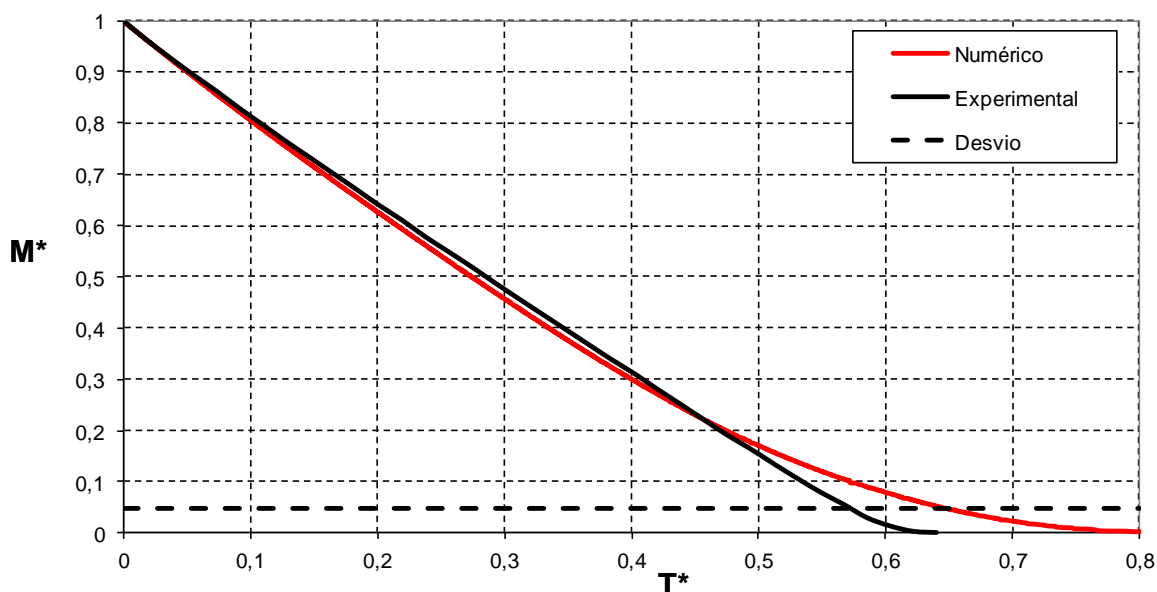


Figura 4.4 – Concentração adimensional de massa de líquido no tempo adimensional para o caso da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $400\mu\text{m}$. (Linha vermelha concentração de líquido da simulação da gota sem o filme, linha verde concentração de líquido da simulação da gota com o filme, linha amarela concentração de líquido do filme da simulação da gota com o filme, linha azul concentração de líquido do cluster da simulação da gota com o filme, linha preta concentração de líquido do resultado experimental e linha preta tracejada a região de fração mássica com 4,9% da massa inicial do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003).

Observando o comportamento da curva experimental nota-se a presença dos três períodos característicos CRP e FRP. Conforme descreve a literatura (Seção 2.1). Durante quase todo o episódio de secagem, a taxa de evaporação experimental é praticamente constante, durando até $T^* = 0,5$. Em comparação, o resultado da simulação também se mostra razoavelmente constante nesse período, porém com um pequeno decaimento. Após $T^* = 0,35$, a taxa de evaporação obtida numericamente apresenta uma redução mais

considerável, porém mais gradual do que o FRP obtido experimentalmente. De fato, a partir de $T^* = 0,5$ a menor taxa de evaporação da simulação, faz com que a massa de líquido remanescente no meio poroso seja superior ao valor experimental (Figura 4.4). É importante enfatizar que a curva experimental da taxa de evaporação deve ser analisada com precaução a partir de $T^* = 0,55$, visto que, o valor de massa detectado torna-se muito próximo ao limite de detecção e a queda de sinal devido à relaxação (Seção 3.3) pode influenciar significativamente o valor da taxa de evaporação estimada.

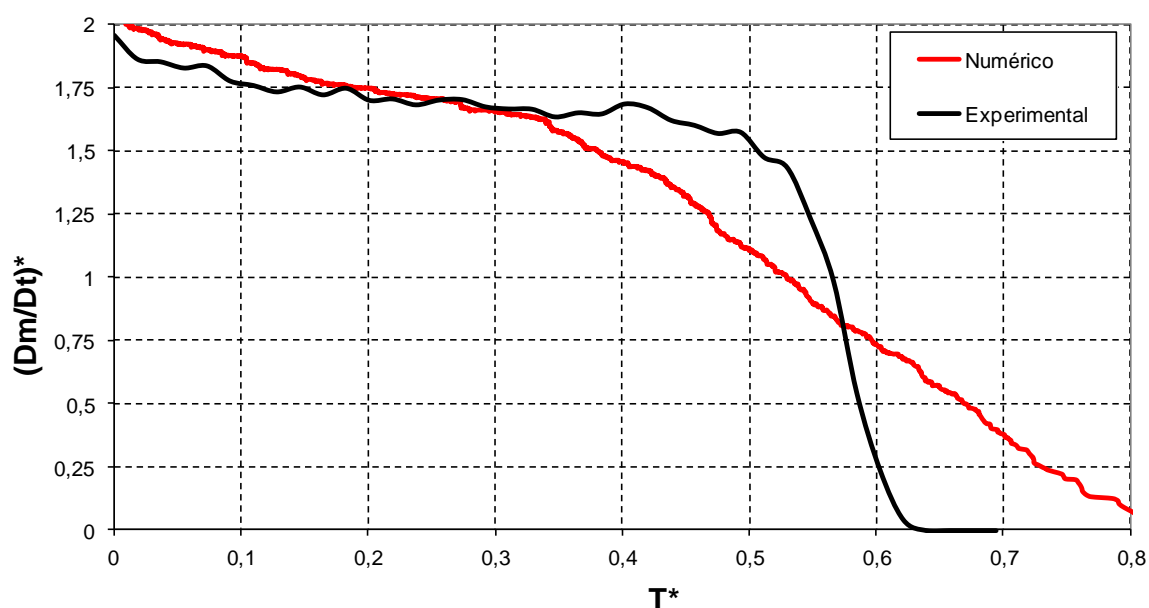


Figura 4.5 – Taxa de evaporação adimensional no tempo adimensional para da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $400\mu\text{m}$. (Linha vermelha taxa de evaporação da simulação da gota sem o filme, linha verde taxa de evaporação da simulação da gota com o filme, linha amarela taxa de evaporação do filme da simulação da gota com o filme, linha preta taxa de evaporação do resultado experimental, REIS *et al*, 2003).

4.2.2.1 Efeitos gravitacionais

Os efeitos gravitacionais foram implementados no algoritmo de acordo com o método descrito na Seção 3.1.1. A distribuição de fase é regida conforme metodologia baseada na teoria de percolação proposta por Prat (1993). O poro cheio de líquido a ser invadido pelo gás é identificado por ser o que apresenta a menor pressão capilar em seu menisco (equação 3.1). Quando os efeitos da força da gravidade são considerados, a identificação do poro a

ser invadido é realizada pela equação 3.8, assim, o poro que apresentar maior valor do potencial gravitacional, Φ , será invadido.

Os resultados da simulação mostram valores insignificativos para o termo, $(\rho_l - \rho_g)gy$, da equação 3.8. Dessa forma, os poros com maior Φ são os que apresentam a menor pressão capilar. Isso mostra que para esta configuração as forças gravitacionais não são significativas.

A análise teórica referente ao comprimento característico da gravidade mostra em qual padrão de secagem a aplicação da configuração em questão se encontra. L_g pode ser obtido por (LAURINDO e PRAT, 1996):

$$L_g = \frac{\gamma}{d_p g \rho_l} \quad (4.1)$$

O resultado da relação L/L_g é da ordem de 10^{-1} , o que mostra, de acordo com a Figura 2.4, que os efeitos gravitacionais são insignificativos. Esse resultado corrobora com os resultados numéricos e fundamentam a hipótese de que a força gravitacional pode ser negligenciada para essa aplicação.

4.2.2.2 Efeitos viscosos

A inclusão dos efeitos viscosos no algoritmo inicia-se com o cálculo da pressão hidráulica em cada poro cheio. Posteriormente determinam-se os poros a serem invadidos (Seção 3.1.1.5). Para um poro ser invadido, o diferencial entre a pressão do líquido do poro cheio em questão com a pressão do gás do poro vazio adjacente, tem que ser maior do que o valor da pressão capilar calculada pela equação 3.1. Caso em nenhuma ligação entre poro cheio e vazio o diferencial de pressão exceda a pressão capilar, prevalece a teoria de percolação e o poro com menisco de menor pressão capilar será invadido. Isso mostra que as forças viscosas não são atuantes.

Na simulação, em nenhum momento do período de secagem o diferencial de pressão entre um poro cheio e um vazio superou o valor da pressão capilar no menisco existente na ligação entre eles. Assim, a determinação dos poros a serem invadidos prosseguiu conforme a teoria de invasão de percolação, ou seja, semelhante a um caso em que a rotina dos efeitos viscosos não é incluída. Esses resultados indicam que os efeitos viscosos não influenciam no padrão de secagem para esta configuração.

Uma outra análise referente aos efeitos viscosos pode ser realizada por meio da análise do comprimento característico viscoso. Conforme descrito em Wilkinson (1984) a variação de pressão viscosa através de um poro típico de diâmetro igual a d_p é dada por:

$$\Delta P_{visc} \approx \frac{\mu_l v d_p}{k} \quad (4.2)$$

Onde μ_l é a viscosidade do líquido, k é a permeabilidade absoluta e v é a velocidade de Darcy. Comparando-se com uma variação de pressão interfacial

$$\Delta P_{int} \approx \frac{\gamma}{d_p} \quad (4.3)$$

Visto que o número capilar é uma relação entre forças viscosas sobre forças capilares, existem situações onde Ca é finito e próximo de 1, logo, tais forças possuem valores da mesma ou próximas ordens. Dessa forma, pode-se considerar $\Delta P_{int} \approx \Delta P_{visc}$ (WILKINSON, 1984) e nesse caso o comprimento característico é chamado de comprimento viscoso, L_{cap} , (LAURINDO e PRAT, 1996)

$$\Delta P_{visc} \approx \frac{\mu_l v L_{cap}}{k} \approx \Delta P_{int} \approx \frac{\gamma}{d_p} \quad (4.4)$$

$$L_{cap} \approx \frac{\gamma k}{\mu_l v d_p} \quad (4.5)$$

Segundo a equação de Carman-Kozeny, para um meio poroso a permeabilidade absoluta pode ser equacionada por:

$$k = \frac{d_p^2 \varepsilon^3}{180(1 - \varepsilon)^2} \quad (4.6)$$

ε é a porosidade do meio. A partir das equações 4.5 e 4.6 temos

$$L_{cap} = \frac{\gamma d_p \varepsilon^3}{\mu_l \nu 180 (1 - \varepsilon)^2} \quad (4.7)$$

A velocidade de Darcy, ou seja, a velocidade do movimento do líquido no meio poroso pode ser aproximada em uma situação onde seu valor seja máximo. Nos instantes iniciais do processo de secagem, o líquido exposto na superfície tem uma velocidade característica de remoção do vapor para o meio externo. Esse fluxo de vapor pode ser utilizado como base para se obter um valor aproximado da velocidade de Darcy. Dessa forma:

$$\nu = \frac{v_r C}{\rho_l} \quad (4.8)$$

Dessa forma, a relação L/L_{cap} obtida é da ordem de 10^{-5} . Com base no diagrama da Figura 2.4, observa-se que os padrões de secagem característicos para a configuração em questão não sofrem influência das forças viscosas. Portanto, em acordo com as simulações computacionais, os resultados apontam que a hipótese de que os efeitos viscosos não precisam ser considerados é válida para o problema em estudo.

4.2.2.3 Efeitos da inclusão do filme de líquido

A Figura 4.6 mostra os perfis de concentração de líquido dos resultados experimentais e numéricos. As simulações são para o caso do modelo considerando a presença do filme de líquido e considerando ambos com distribuição exponencial para os tamanhos dos poros e ligações. O caso com filme tem o valor da variável β estabelecido de $3,5 \cdot 10^5$. No período inicial da secagem ($M^* = 1,0$, $M^* = 0,895$ e $M^* = 0,705$), nota-se que o perfil de concentração para o caso da gota com o filme sofre uma redução mais acentuada na

região superior em comparação às curvas dos outros casos no gráfico e o filme é responsável pela migração de líquido para as regiões mais profundas do meio poroso.

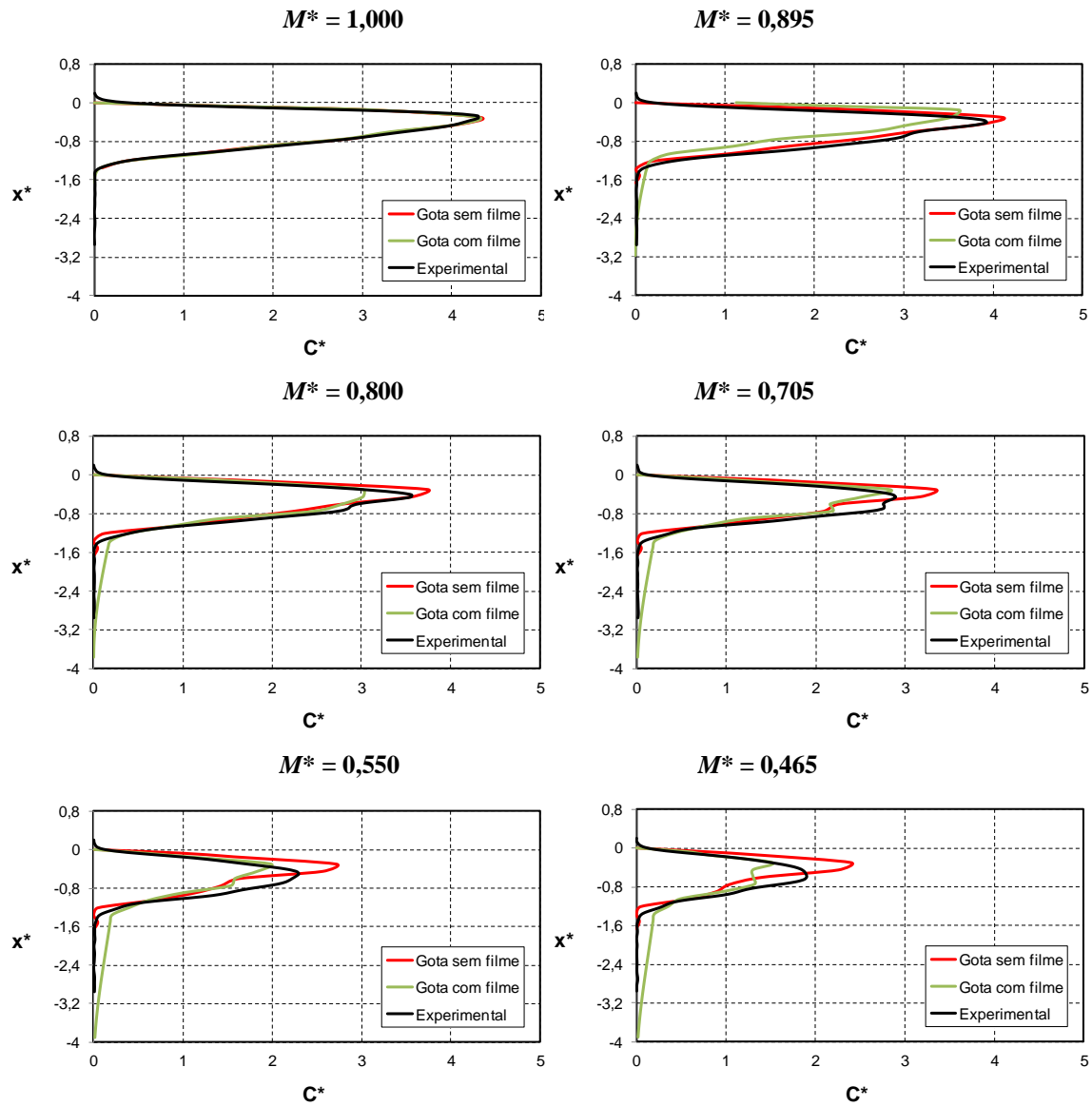


Figura 4.6 - Evolução temporal do perfil de concentração de líquido da gota de água dentro do meio poroso com 400 μm de diâmetro das partículas. A curva na cor preta é referente aos dados experimentais (REIS *et al.*, 2003) e as curvas nas cores vermelha e verde são os resultados das simulações para o caso sem o filme e com o filme respectivamente. O eixo x^* representa a profundidade da gota adimensional e o eixo c^* é a concentração adimensional de líquido.

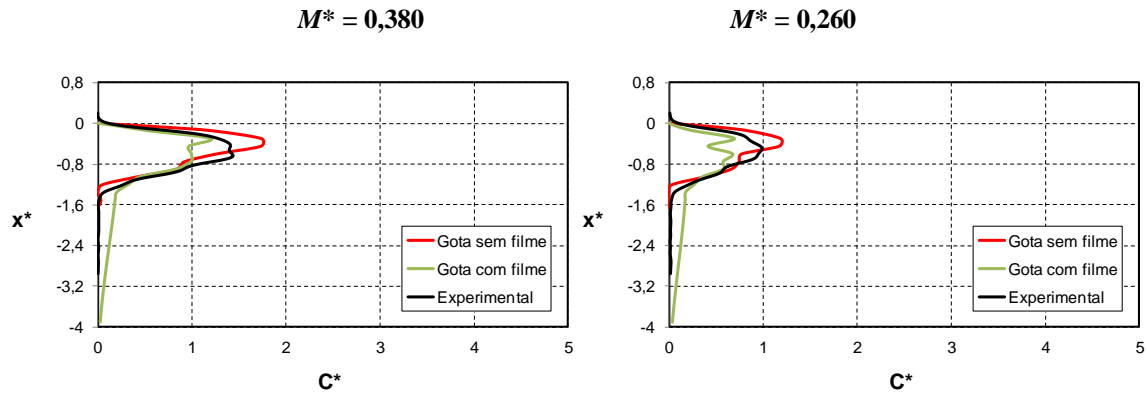


Figura 4.6 – (continuação)

A redução da concentração próxima à superfície parece ser melhor representada pela simulação com presença do filme do que pela simulação sem filme. Entretanto, a simulação com filme superestima a migração de líquido para as regiões mais profundas do meio poroso em comparação ao resultado experimental. As concentrações abaixo de $X^* = 1,5$ são claramente superestimadas. Este comportamento faz com que as concentrações mais próximas da superfície sejam subestimadas

A evolução temporal da massa de líquido presente no filme para a situação onde é realizada a simulação considerando a presença do filme é evidenciada na Figura 4.7. A massa de líquido no filme é mostrada pela espessura do filme relacionada ao raio de curvatura R_f^* . O gráfico mostra os resultados obtidos no plano central da matriz. Em vermelho são mostrados os poros cheios de líquido. Nesse caso a matriz tem as dimensões $142 \times 72 \times 142$ e para melhor visualização da imagem, na Figura são mostrados apenas os intervalos de -1 a -40 na profundidade e 40 a 100 na largura da matriz.

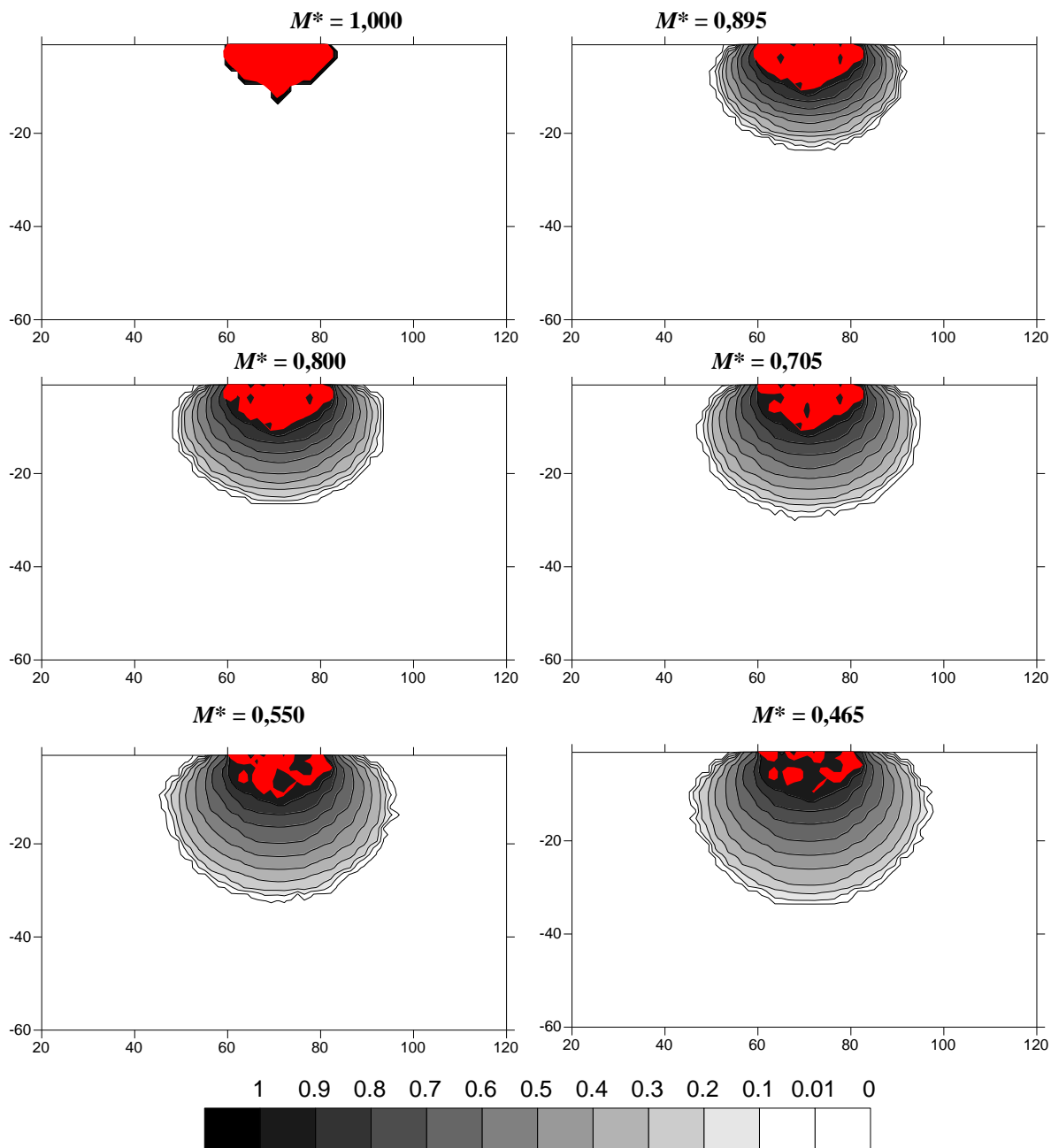


Figura 4.7 – Isolinhas do valor de R_f^* do filme dentro do meio poroso para a simulação da gota de água com a presença do filme. Vista do plano central da matriz (142x72x142) mostrando apenas a região de 40 a 100 na largura e -1 a -40 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho.

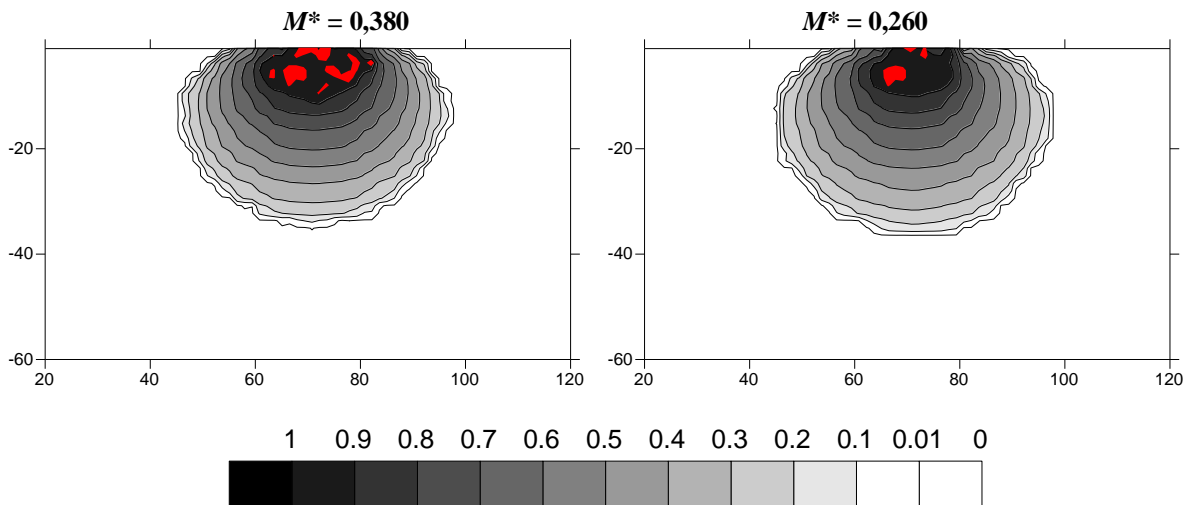


Figura 4.7 – Continuação.

Nos primeiros instantes ($M^* = 0,895$), o filme avança rapidamente do contorno da gota para o interior do meio poroso, de forma homogênea. Em seguida, o avanço é maior em direção à profundidade da matriz, pois a região do filme próximo a superfície tem maior taxa de evaporação por estar exposta ao fluxo de externo. Com isso, há uma maior redução da espessura de filme na superfície. Em $M^* = 0,465$, observa-se a formação de vários *clusters* desconectados, e a partir desse momento há uma grande redução de poros cheios localizados na superfície da matriz. Nos períodos finais, nota-se em $M^* = 0,38$ e $M^* = 0,26$ que há uma redução de filme em contato com a superfície superior, visto que os poros saturados de líquido, que alimentam a formação do filme, já estão em número bem reduzido.

Os resultados da concentração de vapor no meio poroso são mostrados nas Figuras 4.8, para o caso da gota com filme, no plano central da matriz. Em vermelho, são mostrados os poros cheios de líquido. A linha em azul representa a isolinha $R_f^* = 0,01$ dos gráficos da Figura 4.7, ou seja, essa linha delimita a região até onde o filme possui 1% de seu raio de curvatura na interface líquido/gás. Para melhor visualização da imagem, apenas os intervalos de -1 a -60 na profundidade e 20 a 120 na largura são mostrados.

Como mencionado anteriormente, nos primeiros instantes, o filme avança rapidamente, delimitada pela linha azul. Nota-se que a concentração de vapor mostra-se saturada na região do filme. O gradiente de concentração de vapor existe somente fora dessa região, e também de maneira rápida se dispersa pela região de poros vazios. No período final, com a formação de vários *clusters* desconectados a região próxima à superfície permanece saturada, diferentemente ao gradiente que surge no caso da gota sem filme (Figura 4.3). A concentração de vapor mantém-se saturada em toda região do filme acompanhando seu crescimento até o final do processo de secagem.

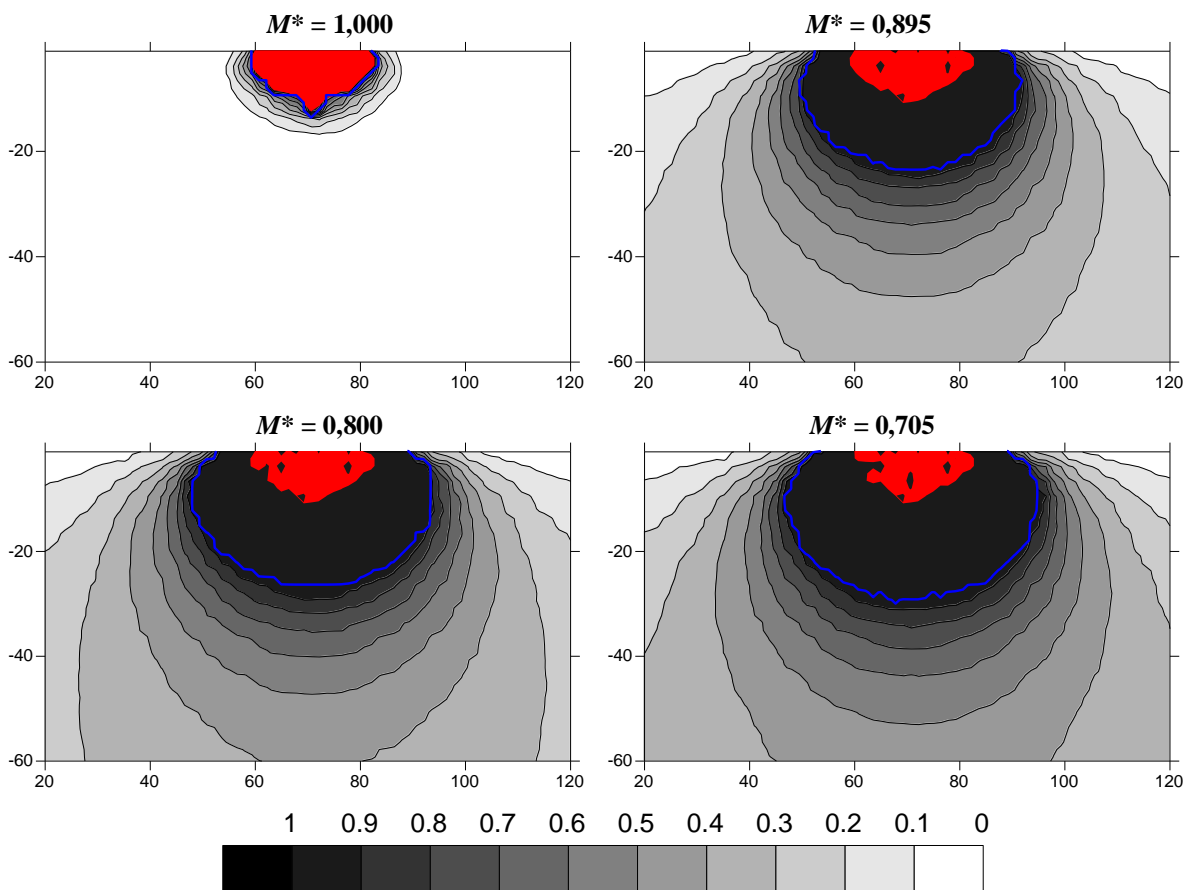


Figura 4.8 - Evolução no tempo da concentração de vapor (C_v^*) dentro do meio poroso para a simulação da gota de água com a presença do filme. Vista do plano central da matriz (142x72x142) mostrando apenas a região de 20 a 120 na largura e -1 a -60 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho e a região onde existe filme esta delimitada em azul

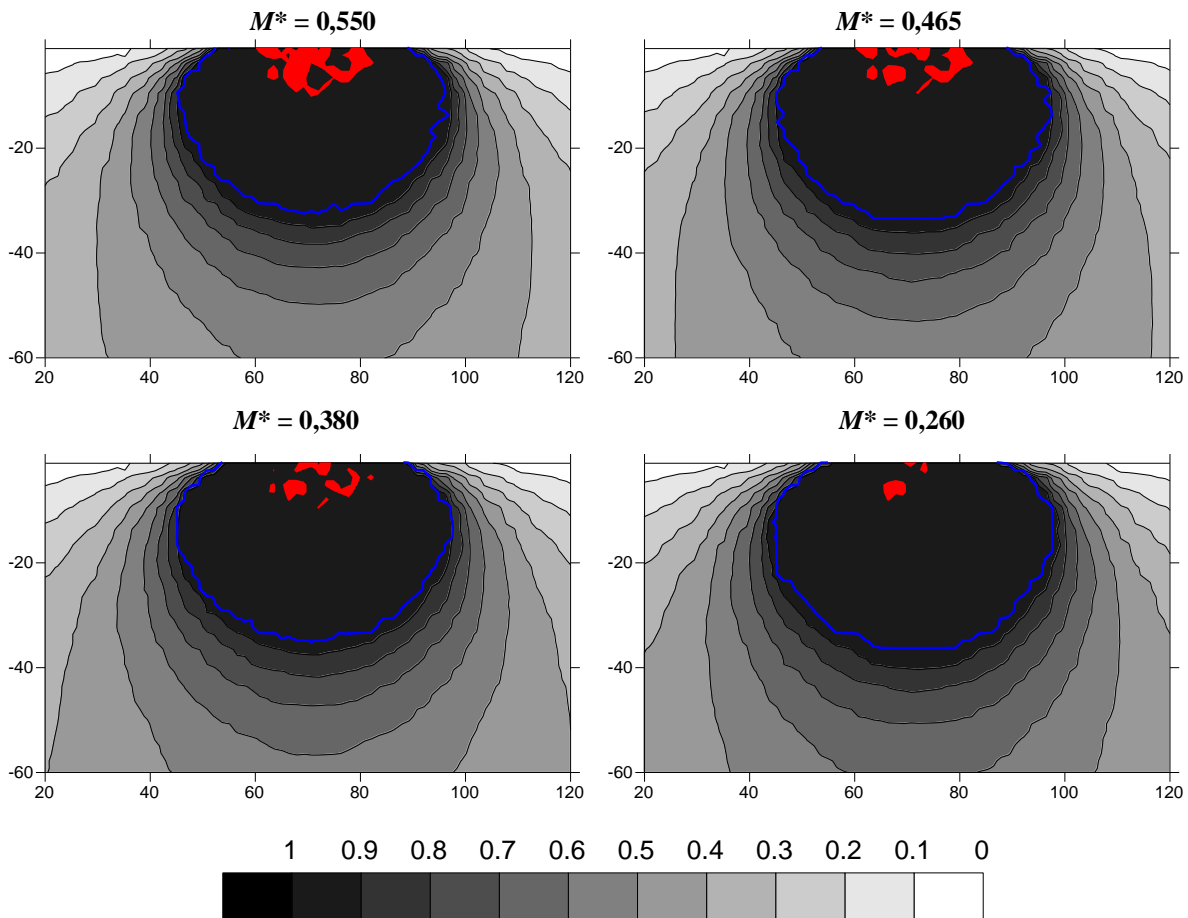


Figura 4.8 – Continuação.

A Figura 4.9 apresenta a curva de evolução no tempo da massa de líquido no meio poroso. A linha verde representa o resultado da simulação da gota com a presença do filme e as linhas em amarela e azul representam as curvas de massa de líquido no filme e nos poros saturados (*clusters*), respectivamente. O resultado da simulação para a condição da gota sem filme é representado pela linha vermelha.

Inicialmente a massa de líquido no filme é zero. Logo, todo o líquido da gota está nos poros saturados de líquido (*clusters*). Ao longo do processo de secagem o *cluster* perde líquido para o filme por meio do transporte capilar em seu contorno. Observando a massa total de líquido remanescente (linha verde), nota-se que ela segue a curva experimental até $T^* = 0,4$. Conforme descrito anteriormente, esse período é caracterizado por ser o CRP. A partir

de $T^* = 0,4$, a massa de líquido da gota começa a reduzir de forma mais lenta do que a experimental.

Este comportamento está provavelmente relacionado ao fato de que grande parte da massa de líquido neste estágio se encontra no filme localizado nas regiões mais profundas do meio poroso, onde o transporte de vapor é mais dificultado o que reduz a taxa de evaporação.

Nos estágios posteriores, a espessura do filme de líquido diminui significativamente na superfície superior (Figura 4.7 $M^* = 0,26$). Observando a curva de massa do líquido do filme percebe-se que a partir de $T^* = 0,4$ a massa de filme, que era crescente até então, começa a reduzir. Isso significa que a migração de líquido por transporte capilar dos poros saturados para o filme já não é mais suficiente para compensar a evaporação do líquido. Como consequência, a evaporação de líquido da gota passa a depender menos do transporte de vapor para o meio externo e mais da evaporação interna. Visto que a concentração de vapor na região do filme está praticamente saturada (Figura 4.8), a taxa de evaporação da gota é baixa, logo, a concentração de massa reduz vagarosamente.

Com base na literatura (Seção 2.1), o desprendimento do filme na superfície provoca uma redução do escoamento de líquido diretamente para a superfície, com isso, a taxa de evaporação é drasticamente reduzida, o que caracteriza o FRP.

Os resultados do comportamento das taxas de evaporação são apresentados na Figura 4.10. Pode-se observar que durante quase todo o episódio de secagem, a taxa de evaporação experimental é praticamente constante. A curva da simulação da gota com o filme mostra-se próxima ao comportamento experimental. Ambas as curvas com e sem filme dos resultados numéricos tem a CRP com duração inferior ao período experimental, permanecendo até $T^* = 0,35$. No FRP, as curvas das simulações têm comportamentos semelhantes, mostrando uma redução menos acentuada e constantemente suave até o final da secagem. Analisando a curva da taxa de evaporação do filme, percebe-se que durante o CRP seu valor é negativo, o que significa que o filme recebe mais líquido dos poros cheios (cluster) do que perde por evaporação. A partir do FRP em $T^* = 0,4$, o filme passa a perder líquido a uma taxa crescente que chega ao valor máximo em $T^* = 0,6$ e passa a reduzir suavemente.

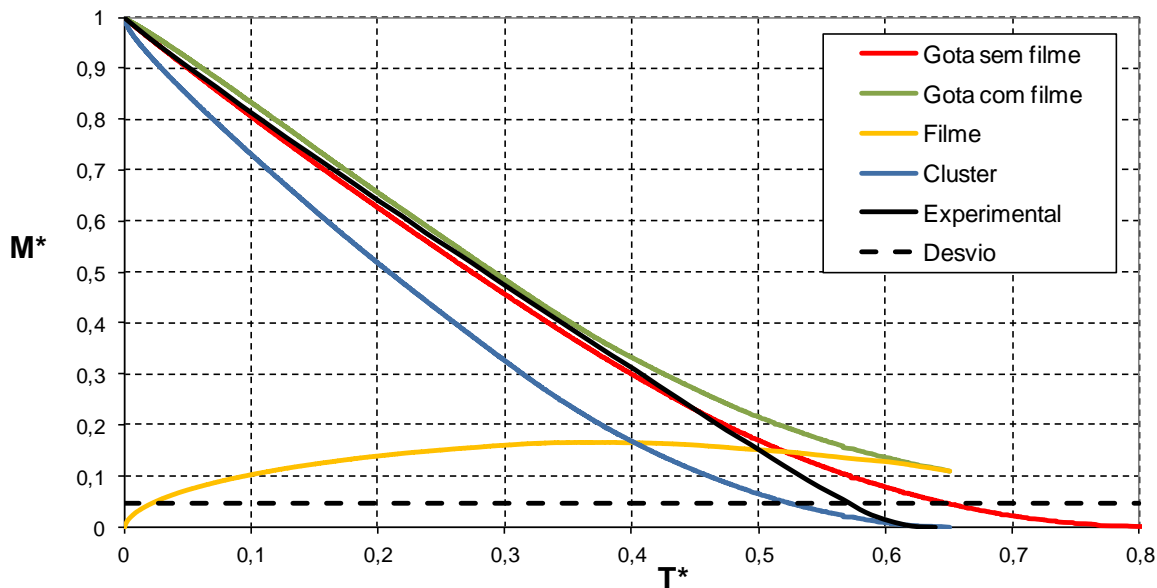


Figura 4.9 – Concentração adimensional de massa de líquido no tempo adimensional para o caso da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $400\mu\text{m}$. (Linha vermelha concentração de líquido da simulação da gota sem o filme, linha verde concentração de líquido da simulação da gota com o filme, linha amarela concentração de líquido do filme da simulação da gota com o filme, linha azul concentração de líquido do cluster da simulação da gota com o filme, linha preta concentração de líquido do resultado experimental linha preta tracejada a região de fração mássica com 4,9% da massa inicial do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003).

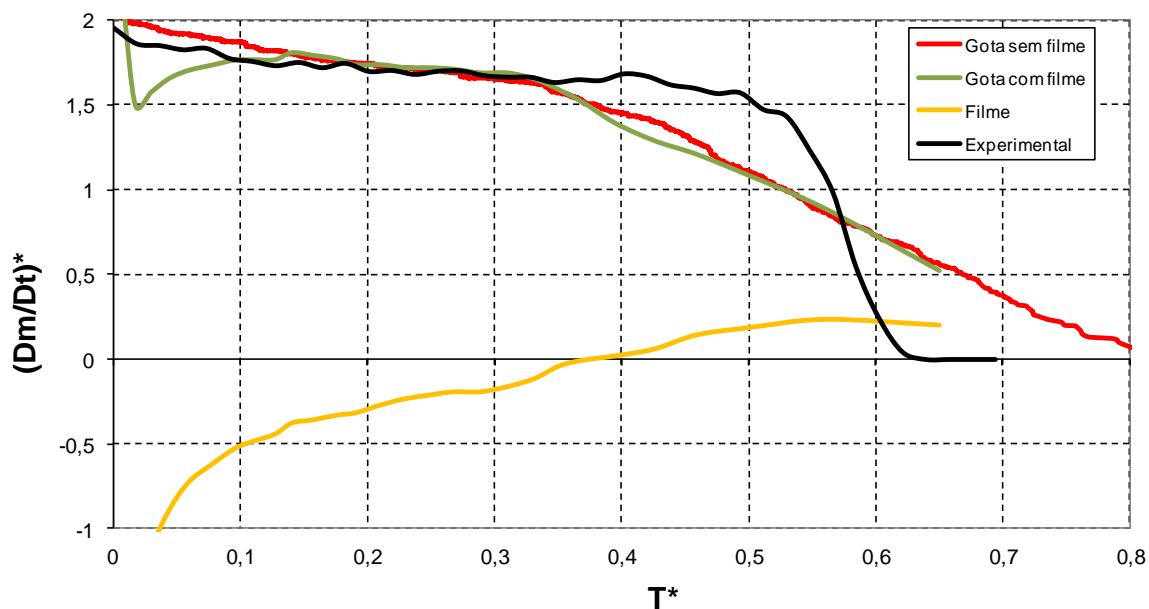


Figura 4.10 – Taxa de evaporação adimensional no tempo adimensional para da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $400\mu\text{m}$. (Linha vermelha taxa de evaporação da simulação da gota sem o filme, linha verde taxa de evaporação da simulação da gota com o filme, linha amarela taxa de evaporação do filme da simulação da gota com o filme, linha preta taxa de evaporação do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003).

A variável empírica β é a forma de ajuste da dinâmica de formação do filme no processo de evaporação. Conforme citado anteriormente, os valores de β dependerão fortemente das características do meio poroso. Valores maiores de β representam maior resistência ao transporte capilar da região saturada de líquido para o filme, ao passo que valores menores de β representam menor resistência ao transporte capilar, e portanto, favorecem a formação do filme.

A influência da variável β no transporte de líquido através do filme é investigada comparando os resultados entre simulações com três diferentes valores ($\beta = 1,0 \cdot 10^5$, $\beta = 3,5 \cdot 10^5$ e $\beta = 6,0 \cdot 10^5$). A Figura 4.11 mostra os perfis de concentração de líquido dos resultados das simulações com os diferentes valores de β . Os resultados mostram que quanto menor é o valor de β maior é a quantidade de líquido que migra das regiões superiores para as mais profundas. Na fase inicial do processo ($M^* = 0,800$) nota-se que a concentração de líquido na profundidade $X^* = -3,2$ para o caso com $\beta = 1,0 \cdot 10^5$ é significativa enquanto nos outros dois casos o valor ainda é pequeno. No decorrer do processo a concentração de líquido aumenta consideravelmente na regiões abaixo de $X^* = -1,6$ em todos os casos. Nota-se que para os casos $\beta = 6,0 \cdot 10^5$ e $\beta = 3,5 \cdot 10^5$ as concentrações de líquido são próximas em toda profundidade da gota, apenas uma quantidade pouco maior de líquido nas regiões mais profundas e menor nas regiões mais próximas a superfície para o caso $\beta = 3,5 \cdot 10^5$. O caso de menor β apresenta sempre um crescimento mais acentuado da concentração de líquido nas regiões inferiores em comparação às demais casos, porém uma concentração significativamente inferior nas regiões superiores.

A evolução da área ocupada pelo filme para os três casos de diferentes β são mostrados na Figura 4.12. Esse gráfico é equivalente à Figura 4.8, mas somente é mostrada a curva com valor $R_f^* = 0,01$. As curvas laranja, verde e azul são referentes aos casos $\beta = 6,0 \cdot 10^5$, $\beta = 3,5 \cdot 10^5$ e $\beta = 1,0 \cdot 10^5$, respectivamente. A curva do caso $\beta = 3,5 \cdot 10^5$ é a mesma curva em azul da Figura 4.8.

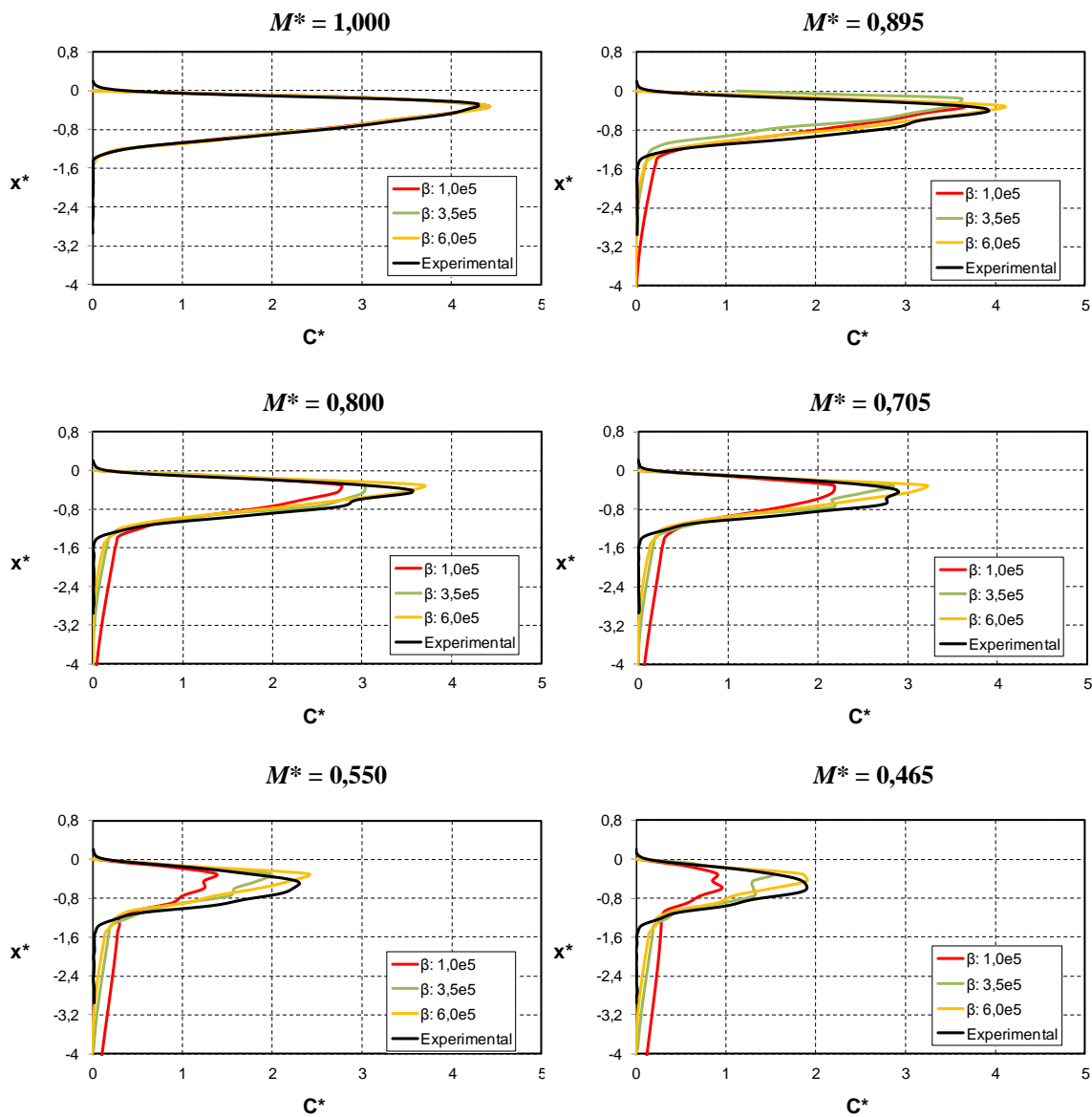


Figura 4.11 - Evolução temporal do perfil de concentração de líquido da gota de água com a presença do filme dentro do meio poroso com 400 μm de diâmetro das partículas. A curva na cor preta é referente aos dados experimentais (REIS *et al.*, 2003) e as curvas nas cores vermelha, verde e laranja são os resultados das simulações com os valores de β igual a 1,0e5, 3,5e5 e 6,0e5, respectivamente. O eixo x^* representa a profundidade da gota adimensional e o eixo c^* é a concentração adimensional de líquido.

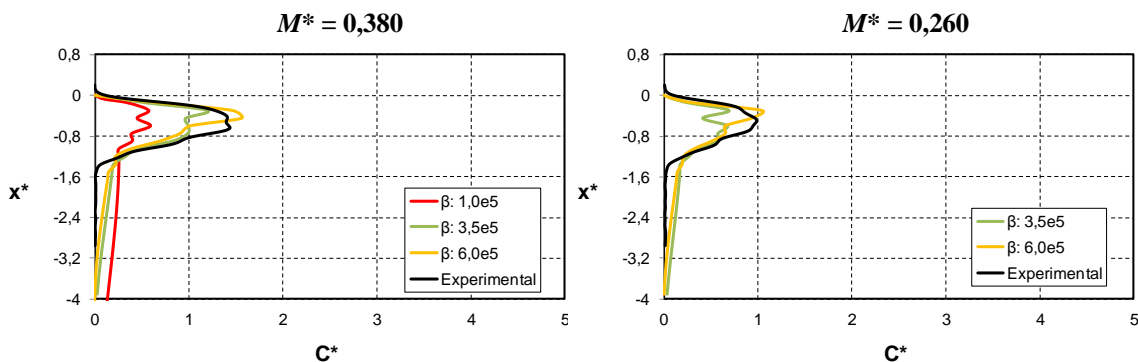


Figura 4.11 – (continuação)

Conforme pode ser observado, as curvas evoluem mais rapidamente para os menores valores de β . O comportamento da evolução da curva para o caso $\beta = 1,0 \cdot 10^5$ mostra que há maior dispersão do filme na matriz porosa e seu crescimento é mais acentuado em relação aos outros casos. Os casos $\beta = 6,0 \cdot 10^5$ e $\beta = 3,5 \cdot 10^5$, apresentam evolução qualitativamente semelhante, mas com valores um pouco mais elevados para o caso $\beta = 3,5 \cdot 10^5$ em todo o período de secagem. Este comportamento indica que para menores valores de β existe uma parcela significativamente maior de líquido no filme do que nos casos com maiores valores de β . Assim a região saturada (*cluster*) perde líquido mais rapidamente para o filme, fazendo com que o líquido se “espalhe” por uma região maior no meio poroso e resultando em maiores taxas de evaporação.

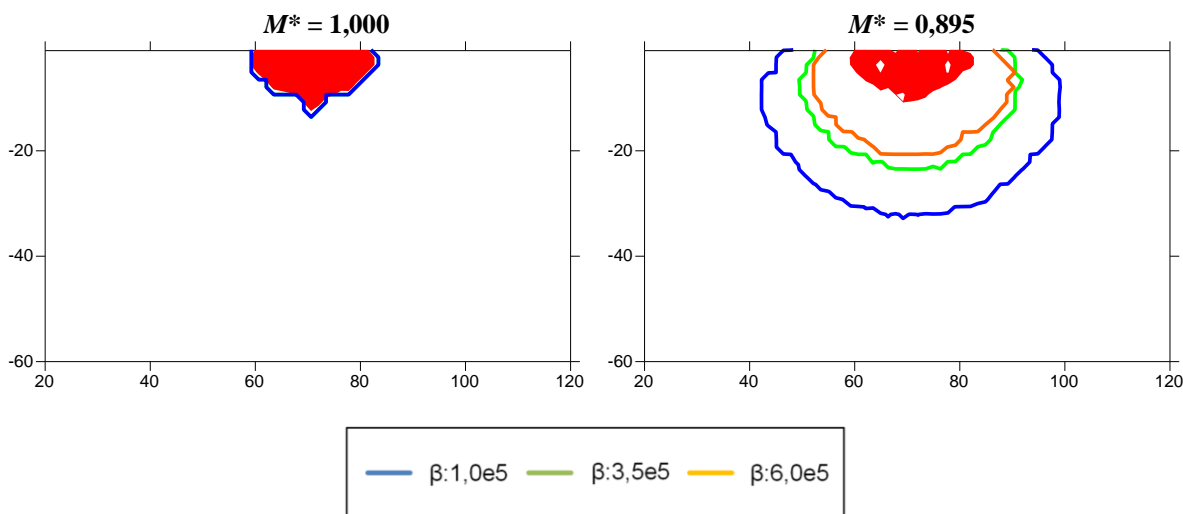


Figura 4.12 - Evolução temporal da área ocupada pelo filme da gota de água dentro do meio poroso composto por partículas com 400 μm de diâmetro. A curva na cor azul é referente a simulação com β igual a 1,0e5 e as curvas nas cores verde e laranja são os resultados das simulações com os valores de β igual a 3,5e5 e 6,0e5, respectivamente. Vista do plano central da matriz (142x72x142) mostrando apenas a região de 20 a 120 na largura e -1 a -60 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho.

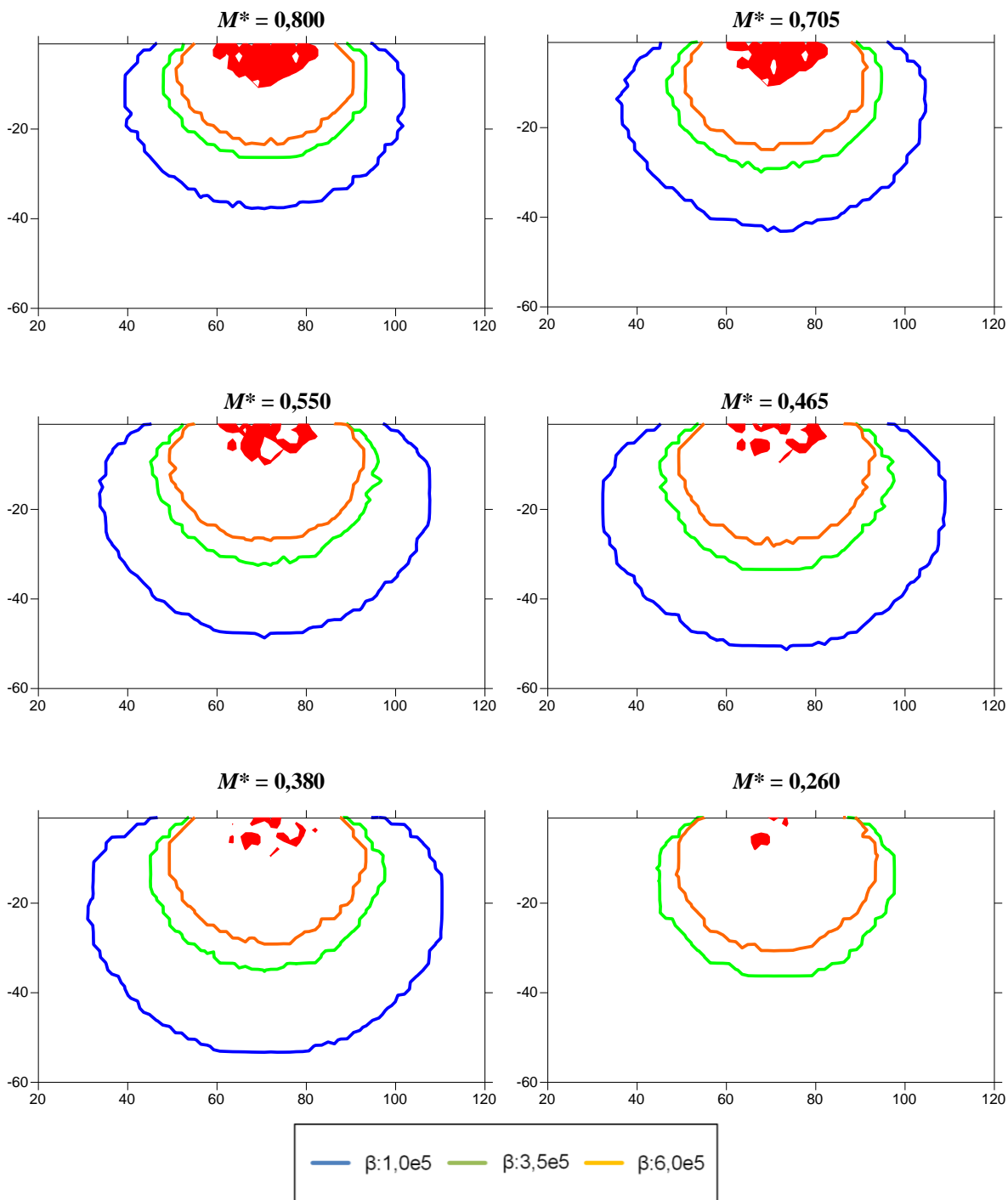


Figura 4.12 – (continuação)

Este comportamento pode ser melhor observado na Figura 4.13 que mostra a evolução temporal da massa de líquido no meio poroso para cada simulação. Como se pode observar, para $\beta = 1,0 \cdot 10^5$ a curva mostra que a quantidade de líquido na região de filme é a maior entre os três casos comparados no momento em que todos os poros cheios são esvaziados

($T^* = 0,3$). Nesse instante, a massa de líquido na região do filme é próxima de 30% do valor da massa total no instante inicial. Diferentemente, para $\beta = 6,0 \cdot 10^5$, o comportamento da curva mostra que este é o caso onde os poros cheios levam mais tempo para esvaziarem, além do mais, a quantidade de líquido na região do filme é inferior a 10% da massa inicial o que mostra que houve uma baixa migração de líquido do cluster para o filme. De acordo com os resultados, a curva com o valor de β igual a $3,5 \cdot 10^5$ foi a mais próxima do resultado experimental.

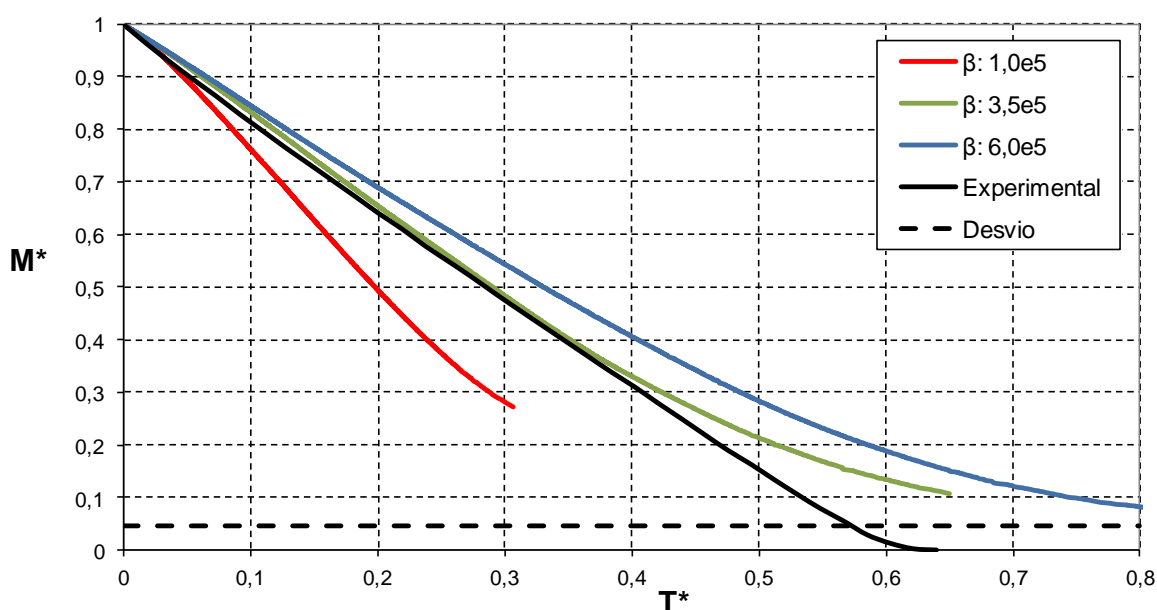


Figura 4.13 – Concentração adimensional de massa de líquido no tempo adimensional para o caso da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $400\mu\text{m}$. (A curva na cor vermelha é referente a simulação com β igual a $1,0 \cdot 10^5$ e as curvas nas cores verde e azul são os resultados das simulações com os valores de β igual a $3,5 \cdot 10^5$ e $6,0 \cdot 10^5$, respectivamente. A linha preta é referente ao resultado experimental e linha preta tracejada a região de fração mássica com 4,9% da massa inicial do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003).

A Figura 4.14 mostra os gráficos da taxa de evaporação. Observa-se que o caso $\beta = 1,0 \cdot 10^5$ é o que apresenta a maior taxa de evaporação, os valores são bastante superiores inclusive em comparação aos dos dados experimentais. O CRP não é devidamente caracterizado, pois o comportamento da curva não se porta com valores constantes, mas sim apresenta uma elevação seguida de uma redução. Este comportamento está relacionado ao crescimento da região ocupada pelo filme, que é responsável pelo aumento da taxa de evaporação.

Conforme descrito anteriormente, no período inicial, a curva do caso $\beta = 3,5 \cdot 10^5$ acompanha quantitativamente o comportamento da curva experimental até aproximadamente $T^* = 0,35$. Até este instante, a curva do caso $\beta = 6,0 \cdot 10^5$ mostra-se qualitativamente semelhante, porém a partir de então inicia uma redução gradativa de forma mais suave.

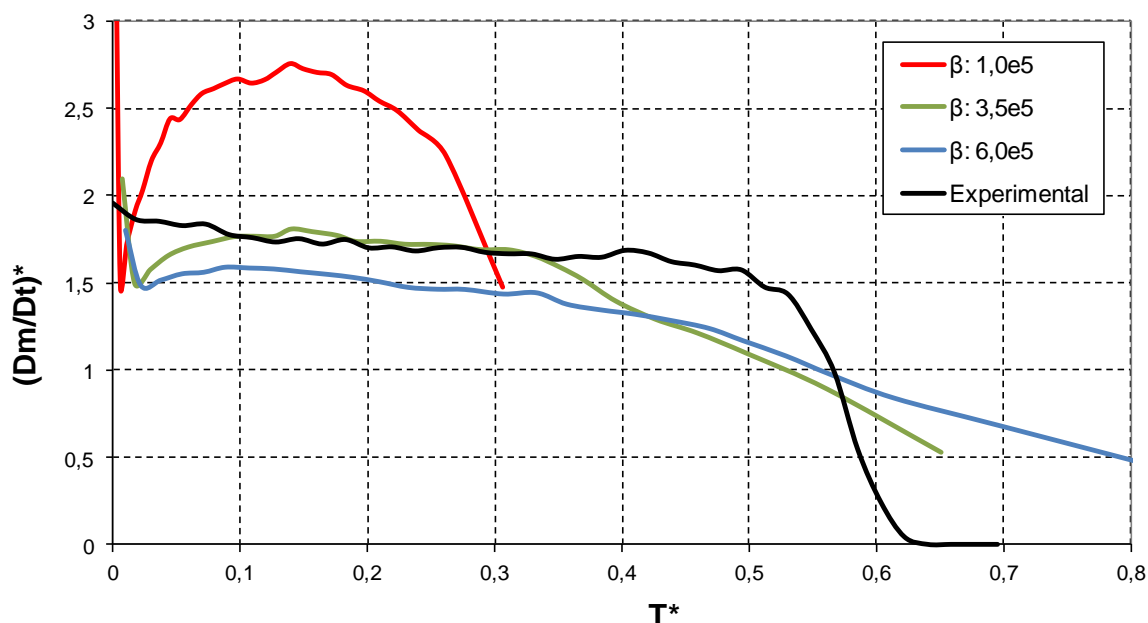


Figura 4.14 – Taxa de evaporação adimensional no tempo adimensional para da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $400\mu\text{m}$. (A curva na cor vermelha é referente a simulação com β igual a $1,0e5$ e as curvas nas cores verde e azul são os resultados das simulações com os valores de β igual a $3,5e5$ e $6,0e5$, respectivamente. A linha preta é referente ao resultado experimental de REIS *et al.*, 2003).

De maneira geral, o modelo de escala de poros sem a inclusão do filme apresentou melhores resultados quando comparado com o modelo com a inclusão de filme. Entretanto, é importante notar que a inclusão do filme no modelo de escala de poros amplia a capacidade do modelo em prever o transporte capilar de líquido para outras regiões que não estavam inicialmente ocupadas por líquido. A inclusão do filme parece superestimar o transporte de líquido para as regiões mais profundas do meio poroso. Uma análise do ajuste do parâmetro empírico β com a distribuição de tamanho dos poros e ligações pode melhorar o desempenho do modelo.

4.2.2.4 Efeitos da distribuição do tamanho dos poros e ligações

Conforme citado anteriormente, os tamanhos dos poros e ligações são distribuídos de maneira aleatória dentro de uma faixa de variação baseada nas características do meio poroso. A maioria dos modelos reportados na literatura baseia-se em uma distribuição de tamanhos uniformes para poros e ligações. Entretanto alguns autores têm investigado outras distribuições para melhor representar as características de transporte do meio poroso. Nesta Seção são analisados os efeitos da utilização de uma distribuição exponencial e de uma distribuição uniforme para os tamanhos de poros e ligações.

A Figura 4.15 mostra os perfis de concentração de líquido dos resultados experimentais e numéricos, sendo que, as simulações são referentes ao caso do modelo sem a presença do filme de líquido. Pode-se observar que a concentração inicial de líquido do caso com distribuição uniforme é diferente dos demais casos. Há menor concentração de líquido principalmente nas regiões inferiores. Isso ocorre devido à distribuição dos poros cheios na matriz. Isto é, os poros cheios na matriz compõe um formado geométrico semelhante ao formato da gota experimental. Porém, a quantidade de poros em cada camada não possui a mesma concentração de líquido em relação ao experimental, por isso, o perfil do modelo não segue exatamente o experimento. A distribuição dos poros não permite um ajuste preciso de quantidade de massa em cada camada, enquanto que a distribuição exponencial permite que a massa em cada camada do meio poroso seja ajustada com os valores experimentais apresentados nos perfis de concentração.

Apesar das imperfeições no perfil inicial de concentração obtido pela distribuição uniforme, tanto a distribuição exponencial quanto a uniforme apresentam a mesma tendência de maior redução da concentração mais próxima à superfície nos estágios iniciais, seguida de uma redução mais uniforme nos estágios posteriores. De maneira geral, ambas as distribuições subestimam a tendência de maior secagem próxima à superfície.

Além da distribuição exponencial permitir melhor ajuste do tamanho dos poros por meio do parâmetro λ (equação 3.37), também permite ajustar melhor o tamanho das ligações entre poros, alterando a resistência do transporte no interior do meio poroso.

As curvas de evolução temporal da concentração de massa de líquido para os casos das diferentes distribuições de tamanho do poro e ligações são mostradas na Figura 4.16. A concentração de líquido e o tempo estão na forma adimensional. As simulações referentes a distribuição exponencial são: A linha verde para $\lambda = 5$, vermelha $\lambda = 10$ e amarela para $\lambda = 20$. A linha azul refere-se a distribuição uniforme e preta o resultado experimental. A curva preta tracejada mostra o desvio do resultado experimental.

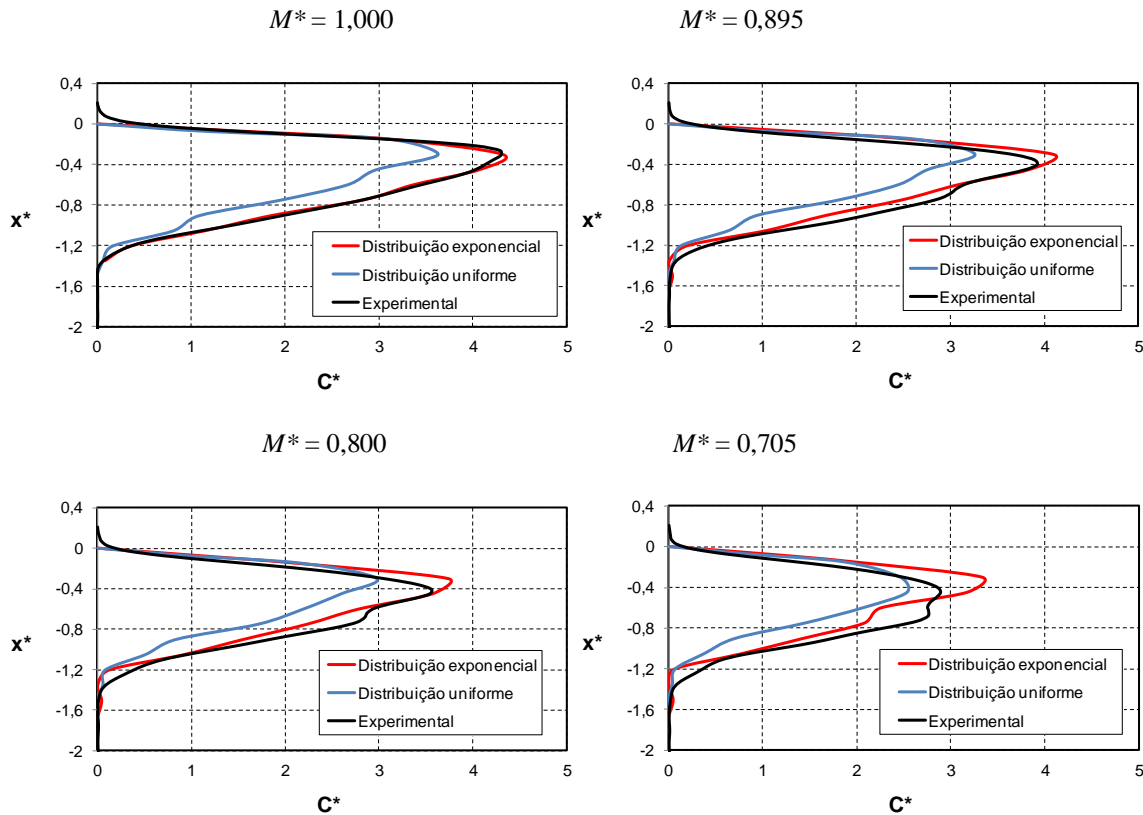


Figura 4.15 - Evolução temporal do perfil de concentração de líquido da gota de água dentro do meio poroso com 400 μm de diâmetro das partículas. A curva na cor preta é referente aos dados experimentais (REIS *et al.*, 2003) e as curvas nas cores vermelha e verde são os resultados das simulações para o caso sem o filme e com o filme respectivamente. O eixo x^* representa a profundidade da gota adimensional e o eixo c^* é a concentração adimensional de líquido.

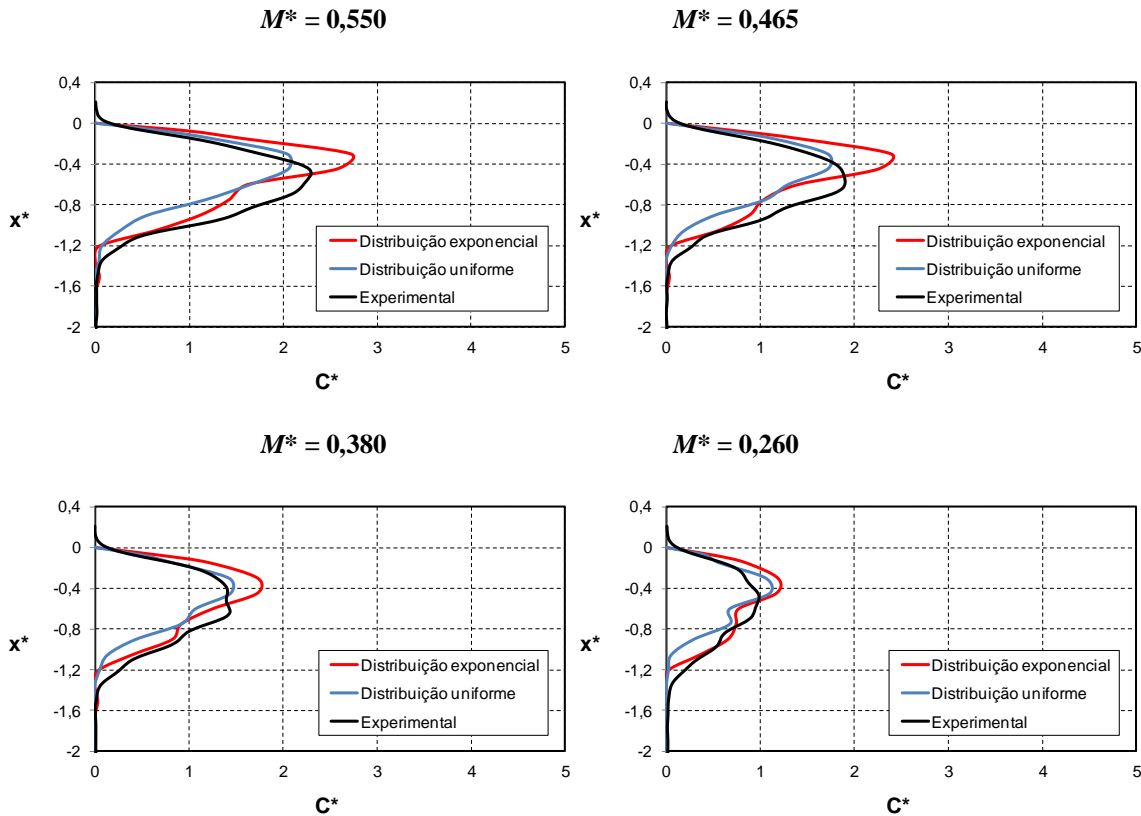


Figura 4.15 – Continuação.

Como pode-se observar pelos gráficos da Figura 4.16, a variação de λ na distribuição do tamanho das ligações influencia consideravelmente no comportamento da evolução da fração de massa de líquido remanescente no meio poroso. Quanto menor é o valor de λ maior será o número de ligações com área próxima ao valor máximo possível. Ou seja, os poros terão maior área para a evaporação, através das ligações, aumenta assim, a taxa de evaporação. A curva de $\lambda = 5$ mostra uma secagem mais rápida da gota entre os casos de distribuição exponencial. Percebe-se que a massa decai a uma taxa maior do que para $\lambda = 10$, $\lambda = 20$ e, conseqüentemente, para a curva experimental. Diferentemente, para $\lambda = 20$ nota-se que o período de secagem da gota é mais lento, a curva reduz suavemente em comparação aos demais resultados. O comportamento da curva do caso com distribuição uniforme mostra a secagem mais rápida entre todos os casos estudados, apresentando a maior inclinação e o período de redução suave mais curto.

A Figura 4.17 mostra os gráficos das taxas de evaporação. Em todos os gráficos observam-se os dois períodos característicos CRP e FRP. Conforme descrito anteriormente, quanto menor o valor de λ maior é a taxa de evaporação. Nota-se também que essas três curvas apresentam a mesma inclinação durante o CRP, porém, a curva verde inicia uma redução (FRP) em um período anterior enquanto a curva amarela, por ser a secagem mais lenta, o CRP é o mais longo. A taxa de evaporação do caso com distribuição uniforme apresenta os maiores valores e por isso tem o menor tempo de secagem. Durante a CRP, a curva mostra uma inclinação semelhante às curvas da distribuição exponencial, porém uma queda mais abrupta. Apesar de quantitativamente ser a curva mais distante em relação ao experimental, qualitativamente seu comportamento é satisfatório.

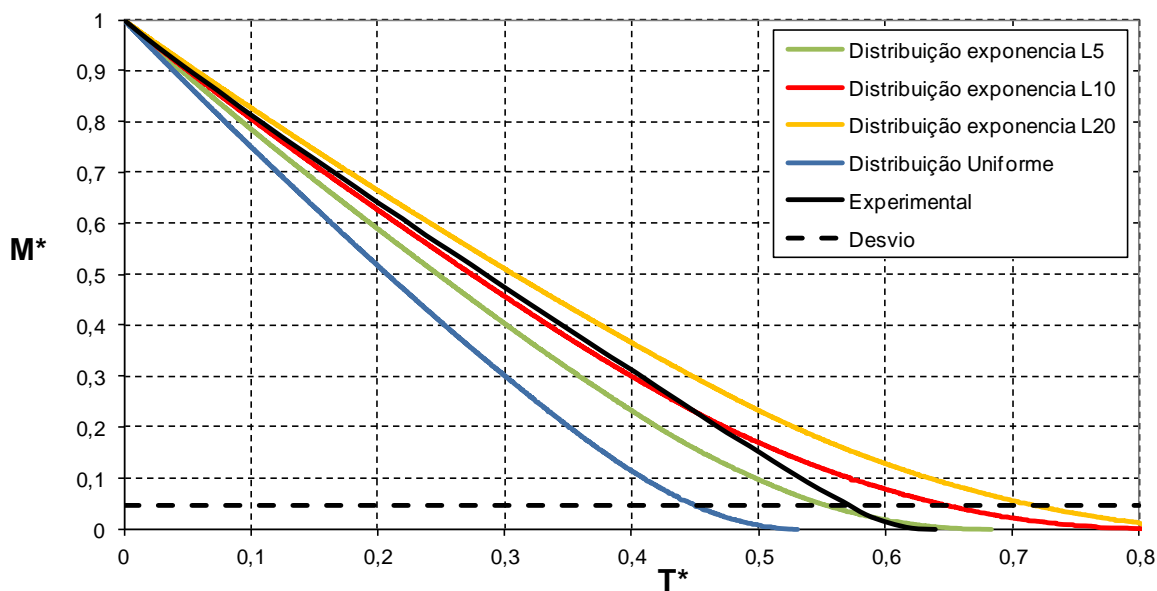


Figura 4.16 – Concentração adimensional de massa de líquido no tempo adimensional para o caso da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $400\mu\text{m}$. (Linha vermelha concentração de líquido da simulação da gota sem o filme, linha verde concentração de líquido da simulação da gota com o filme, linha amarela concentração de líquido do filme da simulação da gota com o filme, linha azul concentração de líquido do cluster da simulação da gota com o filme, linha preta concentração de líquido do resultado experimental e linha preta tracejada a região de fração mássica com 4,9% da massa inicial do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003).

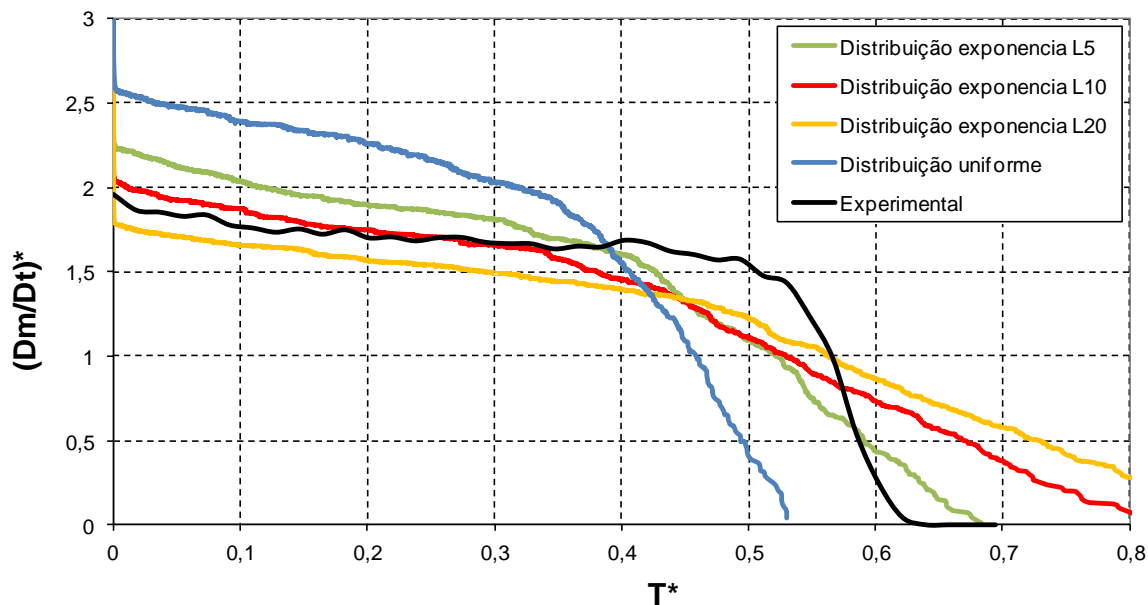


Figura 4.17 – Taxa de evaporação adimensional no tempo adimensional para da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $400\mu\text{m}$. (Linha vermelha taxa de evaporação da simulação da gota sem o filme, linha verde taxa de evaporação da simulação da gota com o filme, linha amarela taxa de evaporação do filme da simulação da gota com o filme, linha preta taxa de evaporação do resultado experimental, REIS *et al*, 2003).

De maneira geral, é possível dizer que a distribuição exponencial para os tamanhos de poros e ligações permite melhor ajuste às características do meio poroso.

4.3 INFLUÊNCIA DO MEIO POROSO

Nesta seção, a influência das características do meio poroso sobre os resultados é avaliada, por meio de simulações de dois casos com o mesmo líquido do caso base, água, porém com diferentes configurações de meio poroso. Dessa forma, esta seção está dividida em duas partes: Seção 4.3.1, com o resultado da simulação da evaporação de uma gota de água imersa em um meio poroso composto por esferas de vidro com $120\mu\text{m}$ de diâmetro e ν_r igual a $0,0079\text{ m/s}$ e Seção 4.3.2, em que é que o meio poroso é composto de partículas de areia com diâmetro de $180\mu\text{m}$. Devido ao maior número de poros envolvidos nestas simulações e ao maior esforço computacional requerido, as simulações são realizadas na condição de simetria, considerando-se apenas um quarto da matriz porosa.

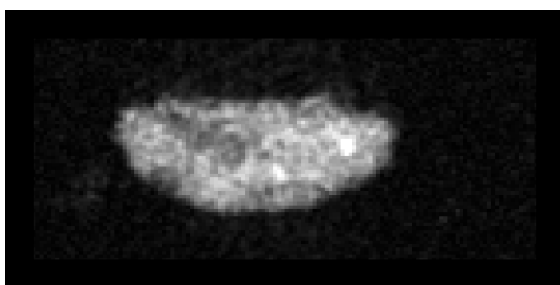
Foram realizadas simulações para avaliar os efeitos gravitacionais, viscosos e do filme. Entretanto, como os efeitos gravitacionais e viscosos não apresentaram influência significativa sobre os resultados, serão apresentados nesta Seção apenas as simulações com e sem a inclusão do filme de líquido.

4.3.1 Meio poroso composto por esferas de vidro

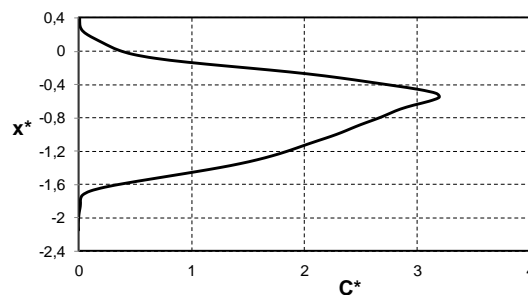
Este item apresenta a simulação de uma gota de água em um meio poroso de esferas de vidro com $120\mu\text{m}$ de diâmetro. Os resultados são comparados com os resultados experimentais de Reis *et al.* (2003).

4.3.1.1 Configuração inicial

A configuração com esferas de vidro de menor diâmetro resulta em menor permeabilidade do meio poro, o que restringe o transporte de líquido (REIS, 2000). O formato da gota no instante inicial do experimento apresentado por Reis *et al.* (2003) (Figura 4.18(a)) mostra que ocorreu uma menor penetração de líquido no meio poroso com esferas de vidro de $120\mu\text{m}$ em comparação ao caso base. A permeabilidade inferior do meio poroso com esferas de $120\mu\text{m}$ tem grande influência na absorção do líquido após a queda, e como consequência, causa menor penetração e maior espalhamento lateral da gota.



(a)



(b)

Figura 4.18 - Evolução temporal das imagens da gota de água dentro do meio poroso com esferas de vidro de $120\mu\text{m}$ de diâmetro. (a) Imagem 2D obtida com uso de NRM e (b) perfil de concentração de líquido (REIS *et al.*, 2003).

Ao observar a Figura 4.18(a) percebe-se que há uma imagem de líquido acima da superfície superior. Essa quantidade de líquido é quantificada pelo perfil de concentração da Figura 4.18(b), pois pode-se observar uma concentração existente acima da linha $x^* = 0$. Reis (2000) menciona que essas irregularidades de líquido na superfície são causadas por distúrbios nas partículas do meio poroso devido ao impacto da gota. Como descrito no item 3.3.1, a gota é “liberada” no meio poroso por um orifício central instalado no tubo de ensaio, por onde ela cai e é absorvida pelo meio poroso. A força do impacto dessa queda provoca uma desordem nas partículas. Assim, o líquido absorvido preenche os interstícios dessas partículas desordenadas gerando irregularidade na superfície. O modelo computacional não considera tais irregularidades, portanto, a superfície da matriz porosa é considerada plana e não há concentração de líquido acima dela. De certa forma, essa hipótese do modelo pode influenciar no comportamento da taxa de evaporação, pois se há líquido na região acima da superfície superior haverá mais área exposta ao fluxo externo, o que gera maior taxa de evaporação. Como não há dados sobre a distribuição desse líquido acima da superfície e nem sobre os contornos dessas irregularidades, opta-se por manter a superfície plana na matriz porosa do modelo computacional.

Para representar a geometria inicial no modelo utiliza-se o procedimento descrito no item 3.2.1. O valor da constante λ que, pela equação 3.39, melhor representa a distribuição dos valores da lateral das ligações para o meio poroso em questão é 3. O coeficiente β e a matriz definidos são: $1 \cdot 10^6$ e $132 \times 102 \times 132$, respectivamente.

Para que a porosidade da matriz porosa seja de 0,41, definem-se os valores de 1,4 e 0,087 mm para a constante λ (equação 3.40) e a distância entre poros, respectivamente.

4.3.1.2 Processo de evaporação

A Figura 4.19 apresenta a comparação entre as imagens 2D obtidas experimentalmente por Reis *et al.* (2003) e os resultados obtidos neste trabalho. Nas três primeiras imagens ($M^* = 1,00, 0,857$ e $0,719$) do resultado experimental é possível notar que existe uma leve redução de concentração de líquido na superfície. De fato, pode-se observar nas imagens experimentais a formação de uma região seca que penetra no meio poroso em formato

bastante irregular assemelhando-se a um *capilar finger*. Provavelmente relacionado a não-homogeneidades do meio poroso causadas pelo impacto da gota. Apesar de capturar o formato irregular da secagem a partir da superfície e a presença de capillary finger os resultados numéricos não são capazes de prever exatamente tal comportamento, uma vez que não incluem tais não-homogeneidades, visto que a mesma distribuição de tamanho de poros e ligações é utilizada ao longo de todo domínio.

De maneira geral, as imagens experimentais mostram uma redução da saturação de líquido nos poros mais próximos da superfície. As imagens da simulação não capturam de forma tão evidentemente este comportamento. Pelas imagens 2D da simulação há uma redução de concentração na superfície, mas essa redução não é muito maior do que a redução nas demais regiões. No decorrer da evaporação, é possível observar um avanço das frentes de evaporação, formando diversos *clusters* desconectados. Esta tendência é representada de maneira adequada pela simulação.

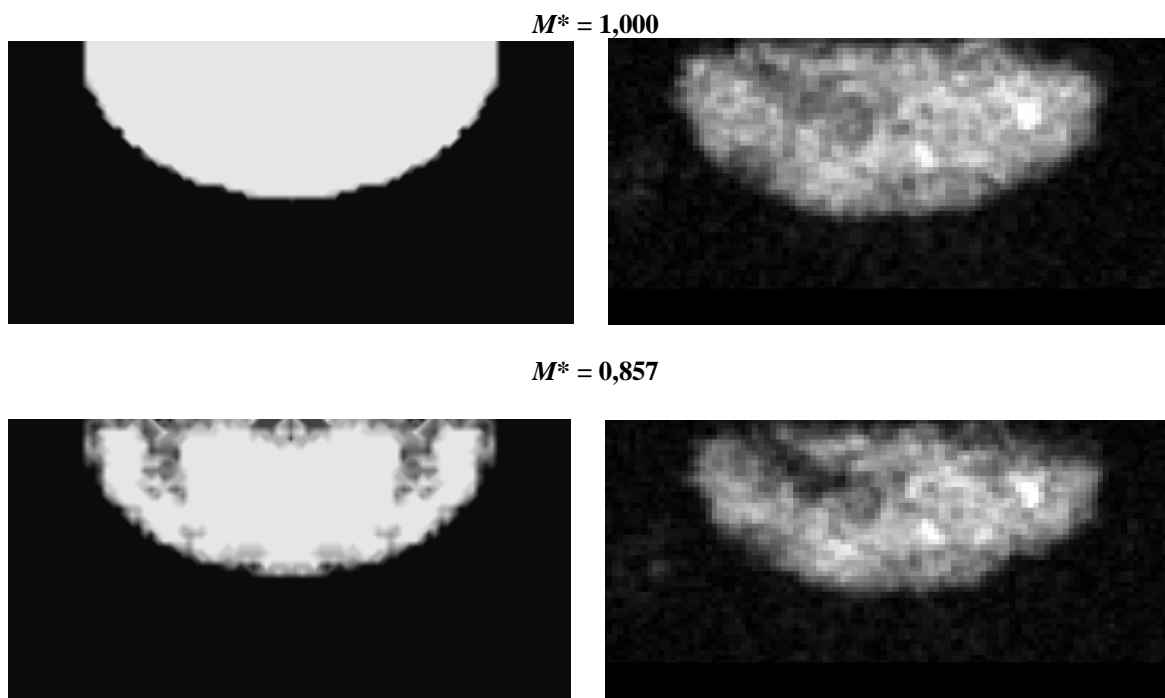


Figura 4.19 - Evolução no tempo das imagens 2D da gota de água dentro do meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $120\mu\text{m}$. Simulação no lado direito e dados experimentais no lado esquerdo (REIS *et al*, 2003).

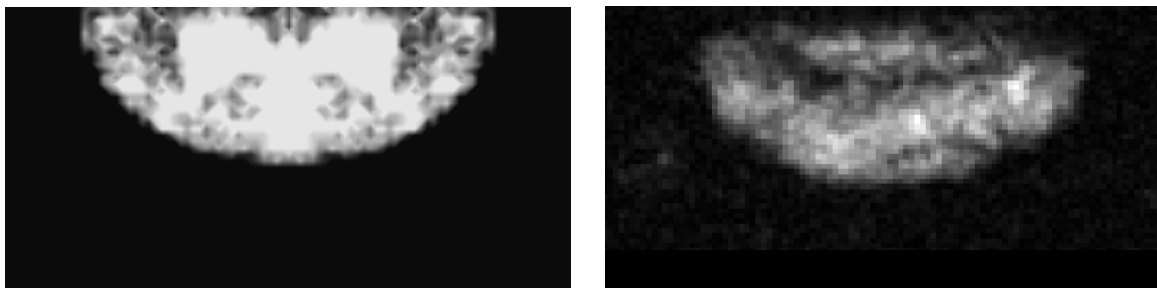
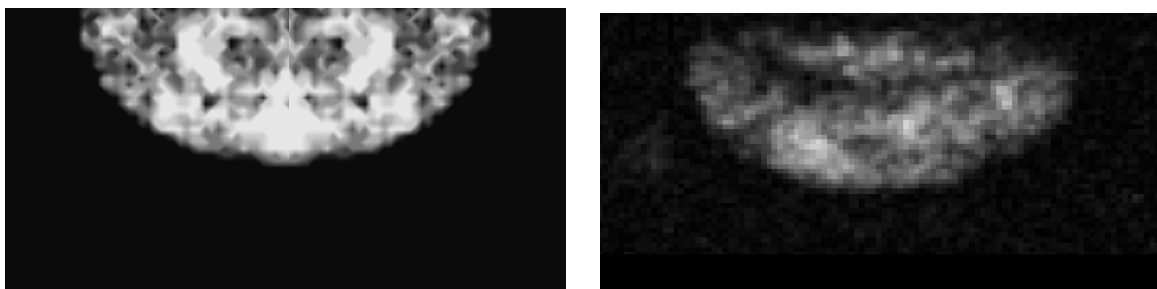
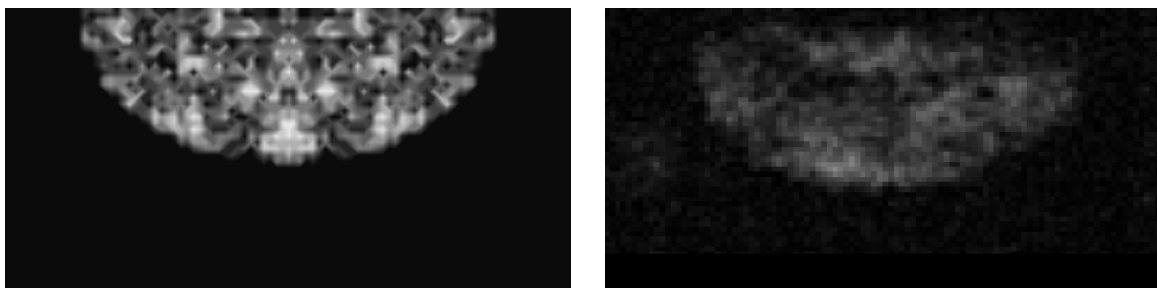
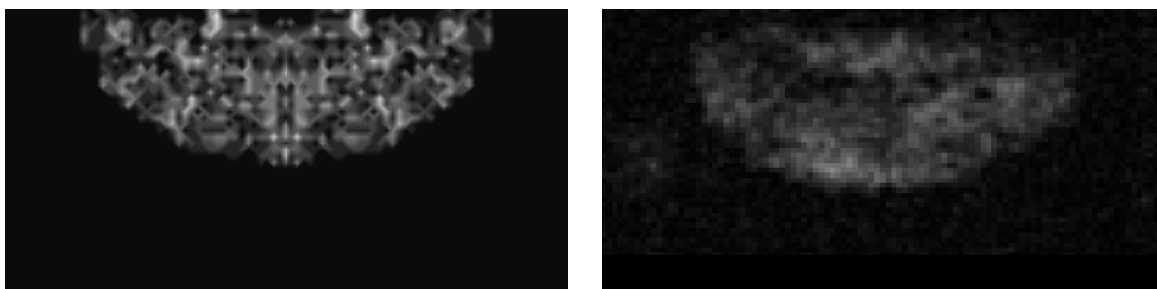
$M^* = 0,719$  $M^* = 0,585$  $M^* = 0,370$  $M^* = 0,250$ 

Figura 4.19 - Continuação

$$M^* = 0,147$$

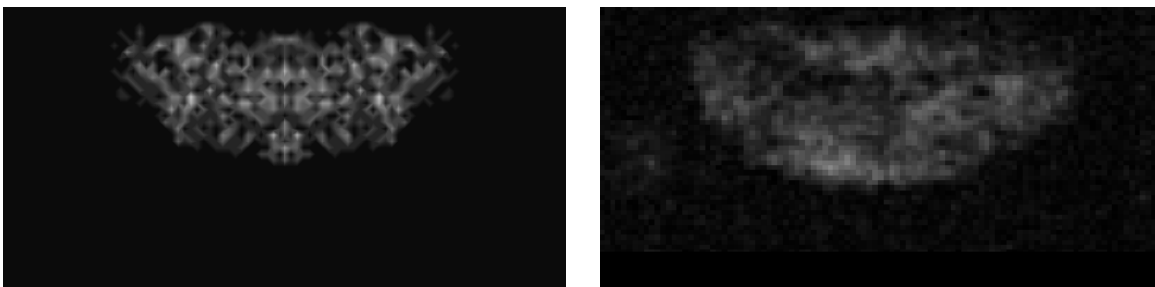


Figura 4.19 - Continuação

Os perfis de concentração de líquido são apresentados na Figura 4.20. Nela são mostrados os resultados experimentais e os resultados da simulação numérica, considerando a presença do filme de líquido e sem a presença do filme. Reis *et al.* (2003) descrevem que nas primeiras etapas da evaporação ($M^* = 1,00$, $0,857$ e $0,719$), há 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 2D (Figura 4.19). Os perfis obtidos pelas simulações mostram essa redução durante os mesmos instantes e, a partir de $M^* = 0,730$, o perfil é reduzido igualmente em todo o contorno da gota, da mesma forma como mostra o comportamento dos perfis dos experimentos. Em $M^* = 0,37$, o perfil de concentração do resultado da simulação do caso da gota com a presença do filme mostra-se satisfatório em relação ao perfil do resultado experimental. Porém, há uma considerável concentração de líquido na região inferior a $x^* = -1,8$, o que corresponde à existência do filme de líquido nessa região. O resultado experimental mostra concentração nula nesse local, o que sugere que para esse caso a presença do filme de líquido não seja considerável. Os resultados da simulação para o caso da gota sem o filme representam de maneira mais adequada os dados experimentais.

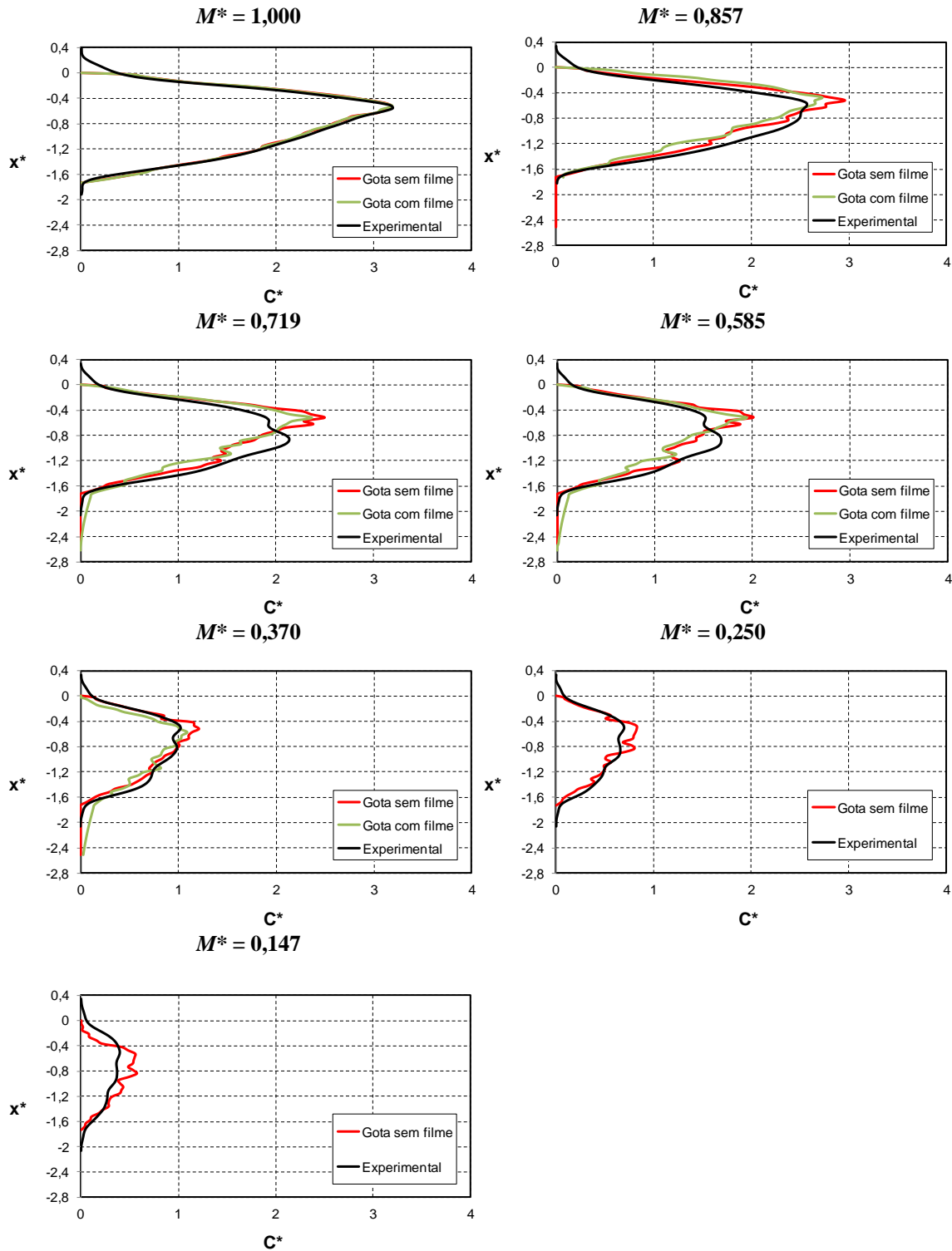


Figura 4.20 - Evolução no tempo do perfil de concentração de líquido da gota de água dentro do meio poroso de esferas de vidro com 120 μm de diâmetro. A curva na cor preta é referente aos dados experimentais (REIS *et al.*, 2003) e as curvas nas cores vermelha e verde são os resultados das simulações para o caso sem o filme e com o filme, respectivamente. O eixo x^* representa a profundidade da gota e o eixo c^* é a concentração adimensional de líquido.

Os resultados numéricos da evolução temporal da massa de líquido do filme representados pela razão R_f^* são apresentados na Figura 4.21 e a concentração de vapor (C_v^*) na Figura 4.22. Os gráficos mostram os resultados nos intervalos de -1 a -80 na profundidade e 1 a 80 na largura da matriz, obtidos no plano central da gota e, nesse mesmo plano, são mostrados em vermelho os poros cheios de líquido.

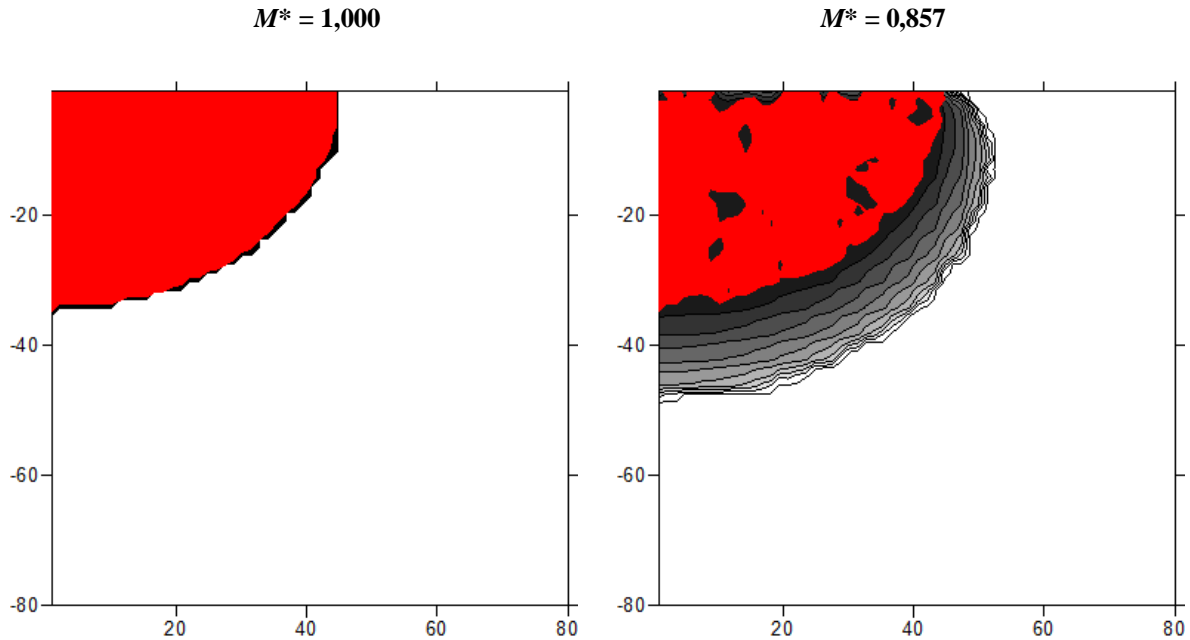


Figura 4.21 – Isolinhas do valor de R_f^* do filme dentro do meio poroso para a simulação da gota de água com a presença do filme. Vista do plano central da matriz (132x102x132) mostrando apenas a região de 1 a 80 na largura e -1 a -80 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho.

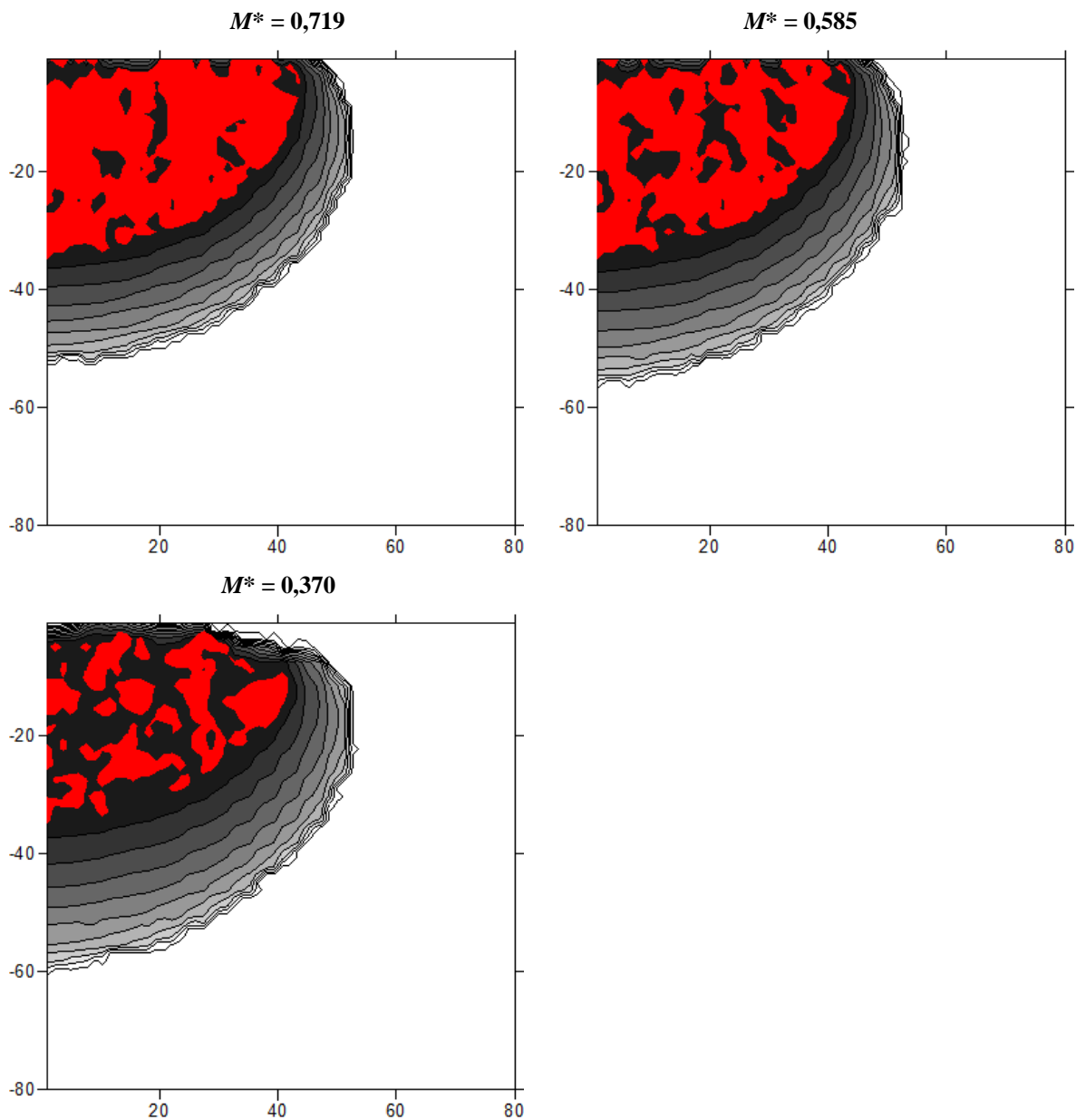


Figura 4.21 – Continuação.

Ao analisar a Figura 4.21, pode-se observar que o transporte de líquido através do filme ocorre de maneira semelhante ao caso base, onde inicialmente há uma rápida propagação do filme, principalmente na direção vertical. Conforme citado anteriormente, o filme tende a se propagar em todas as direções (vertical e radial), porém as concentrações de vapor são menores próximo a superfície, resultado em maiores taxas de evaporação do filme e menor extensão do filme nesta região.

Nota-se pela Figura 4.22 que o transporte de vapor também ocorre de maneira rápida e que a concentração de vapor está saturada na região do filme delimitada pela linha azul (a linha azul na Figura 4.22 é a mesma linha representando o valor de 0,01 da Figura 4.21). Em $M^* = 0,719$, os poros da superfície superior começam a se tornar vazios e logo se observa a geração de um gradiente de R_f^* . Esse gradiente não é observado no caso base, onde, mesmo com poucos poros cheios nas camadas próximas à superfície, há uma maior espessura de filme. Uma vez que a velocidade de remoção do vapor para o meio externo (v_r) é a mesma em ambos os casos, a espessura do filme no presente caso pode ser menor devido ao meio poroso gerar maior resistência ao escoamento do filme. O valor de β é maior, igual a $1 \cdot 10^6$, enquanto no caso base é igual a $3,5 \cdot 10^5$. Portanto, como o transporte de líquido é menor e a taxa de evaporação é governada pelo mesmo parâmetro, a espessura tende a ser menor também. Em $M^* = 0,37$, há um gradiente da espessura do filme em toda superfície e uma grande quantidade de *clusters* desconectados, porém, ainda assim, a concentração de vapor na região de filme continua saturada. Neste mesmo instante, nota-se que o filme começa a descolar da superfície do meio poroso.

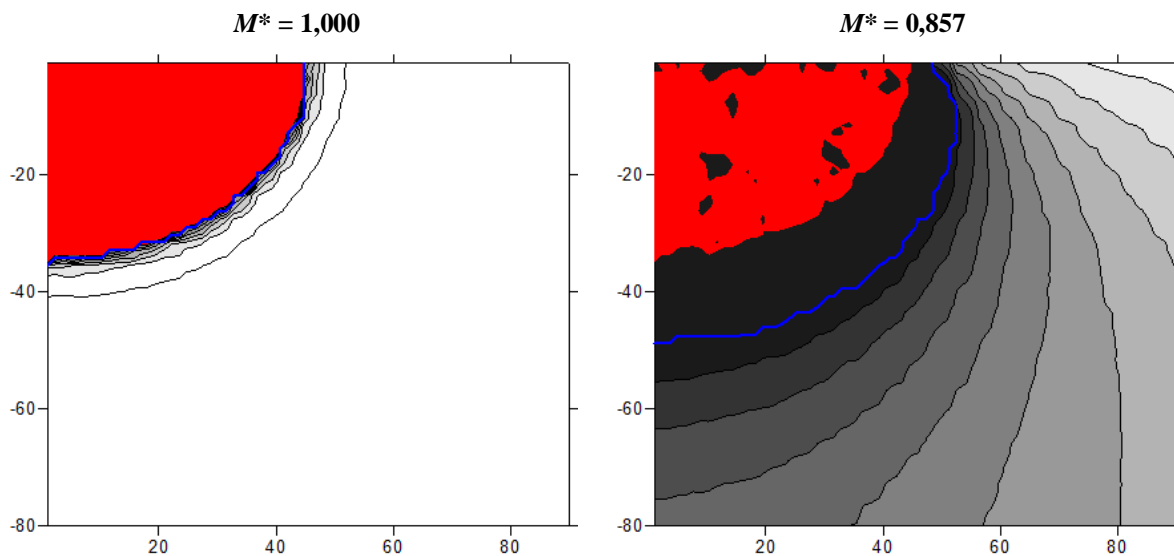


Figura 4.22 - Evolução no tempo da concentração de vapor (C_v^*) dentro do meio poroso para a simulação da gota de água com a presença do filme. Vista do plano central da matriz (132x102x132) mostrando apenas a região de 1 a 90 na largura e -1 a -80 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho e a região onde existe filme está delimitada em azul.

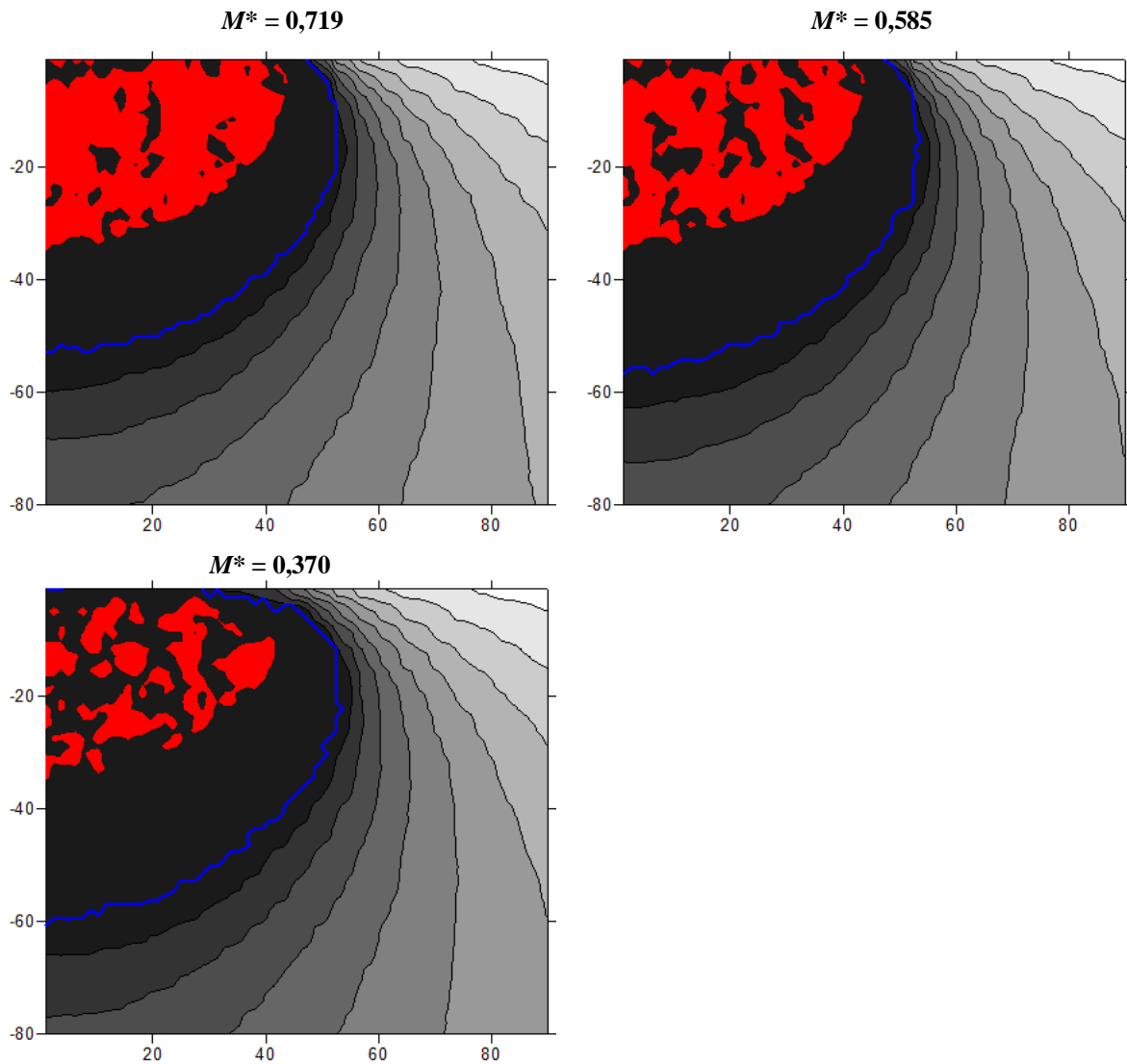


Figura 4.22 - Continuação.

Outra importante questão é o crescimento do filme. Neste caso, o filme avança para o fundo, a um pouco mais da metade do valor da profundidade inicial da gota. O avanço inicia-se na profundidade da gota localizada na posição -34 no eixo vertical e chega próximo a -60. No caso base, o avanço é quase duas vezes o valor da profundidade inicial.

A Figura 4.23 mostra o resultado da concentração de vapor da simulação do caso da gota sem a presença de filme. As concentrações são mostradas no plano do centro da gota junto com as imagens em vermelho dos poros cheios. Os intervalos da matriz mostrados são de -1 a -80 na profundidade e 1 a 90 na largura.

Inicialmente há um grande transporte de vapor ocupando toda a região de poros vazios da matriz ($M^* = 0,857$). Em seguida, a evolução da distribuição de fase mostra o surgimento de vários *clusters* desconectados e, a partir de $M^* = 0,37$, a quantidade de poros cheios nas extremidades da gota vai diminuindo, concentrando-se mais na região central. Essa evolução apresenta mais *clusters* desconectados do que o resultado da simulação do caso da gota com filme, porém, de maneira geral, a distribuição de fase é semelhante. Nos instantes finais ($M^* = 0,255$ e $0,147$), com a retração dos poros cheios para o centro, a maior concentração de vapor também retrai para o centro, reduzindo a concentração nas regiões mais distantes da gota. Nessa fase, observa-se o surgimento de um gradiente de concentração de vapor entre os poros cheios e a superfície do meio poroso.

A Figura 4.24 apresenta a curva de evolução no tempo da fração de massa de líquido. Pode-se observar que os resultados da simulação da gota sem o filme são bastante próximos aos dados obtidos experimentalmente, enquanto os resultados com filme subestimam consideravelmente a redução de massa de líquido no meio poroso.

A Figura 4.25 apresenta os resultados das taxas de evaporação. O comportamento da taxa de evaporação do resultado experimental mostra dois períodos característicos de secagem, CRP e FRP. O resultado da simulação do caso da gota sem filme apresenta um comportamento muito próximo ao experimental. A curva acompanha devidamente os dois períodos característicos do processo, mantendo-se constante no primeiro período (CRP) e apresentando uma queda na etapa final. O resultado da simulação do caso da gota com a presença do filme mostra valores quantitativamente inferiores, mas também demonstra um comportamento no qual observam-se os dois períodos, CRP e FRP.

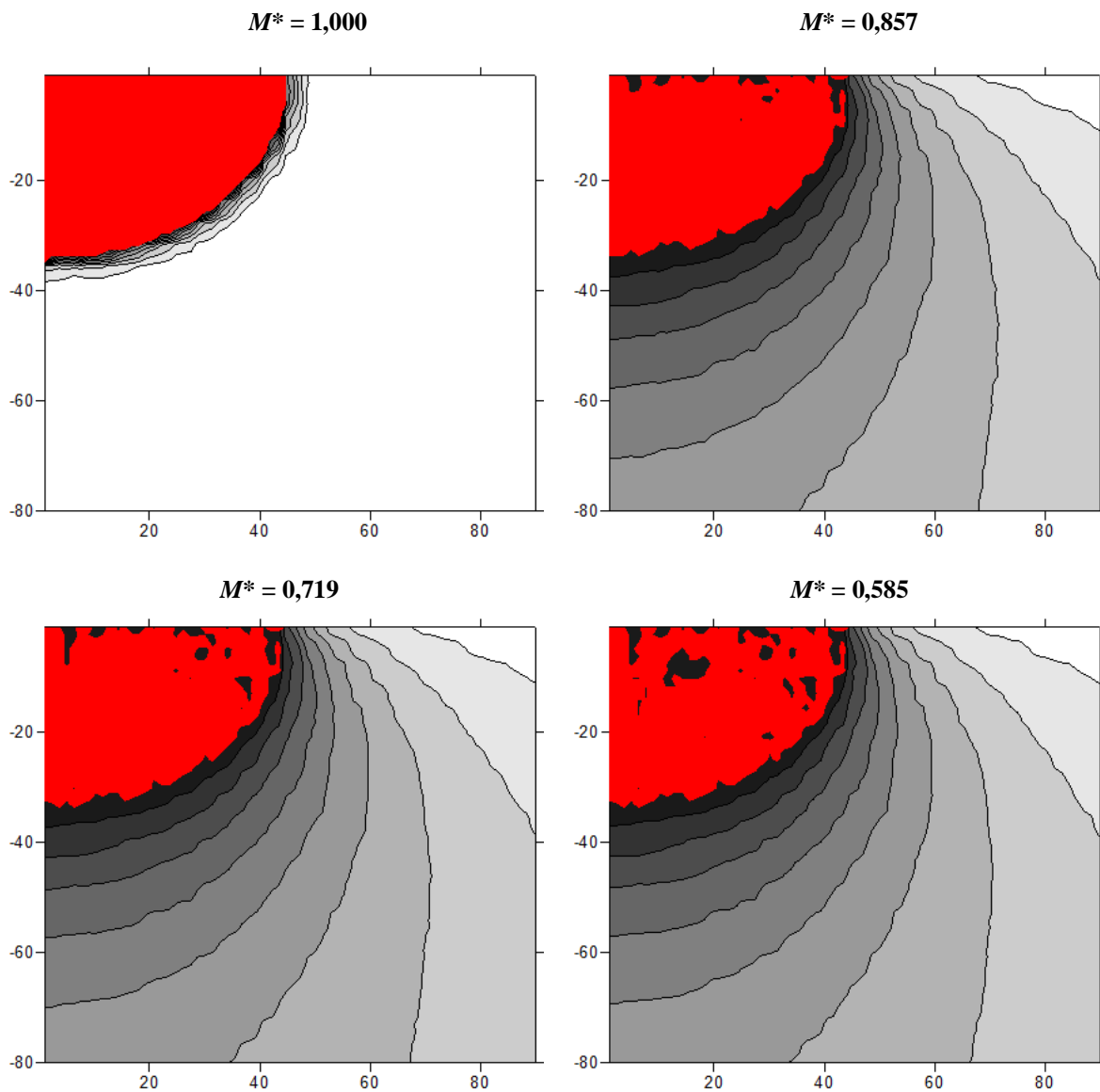


Figura 4.23 - Evolução no tempo da concentração de vapor (C_v^*) dentro do meio poroso para a simulação da gota de água sem a presença do filme. Vista do plano central da matriz (132x102x132) mostrando apenas a região de 1 a 90 na largura e -1 a -80 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho

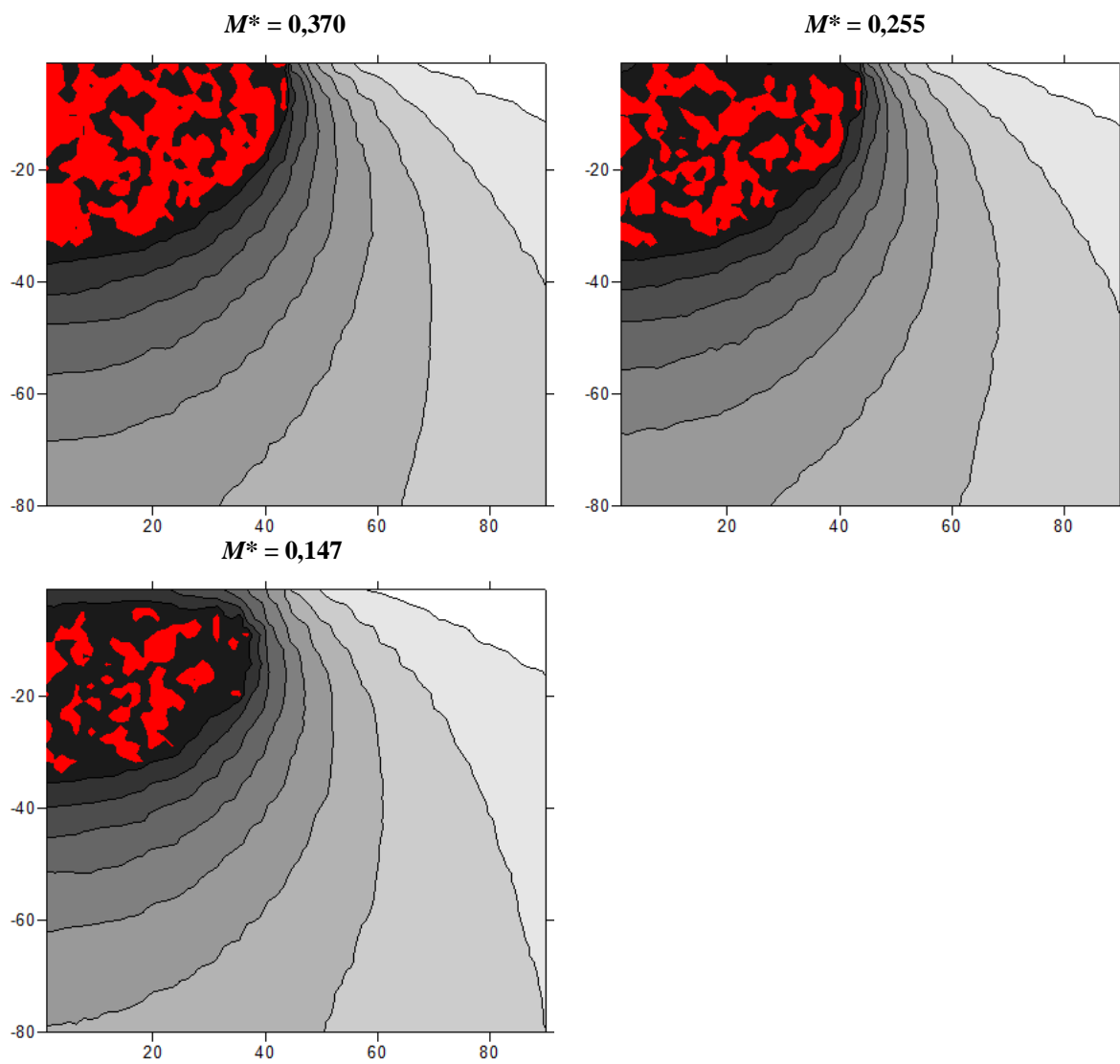


Figura 4.23 - Continuação.

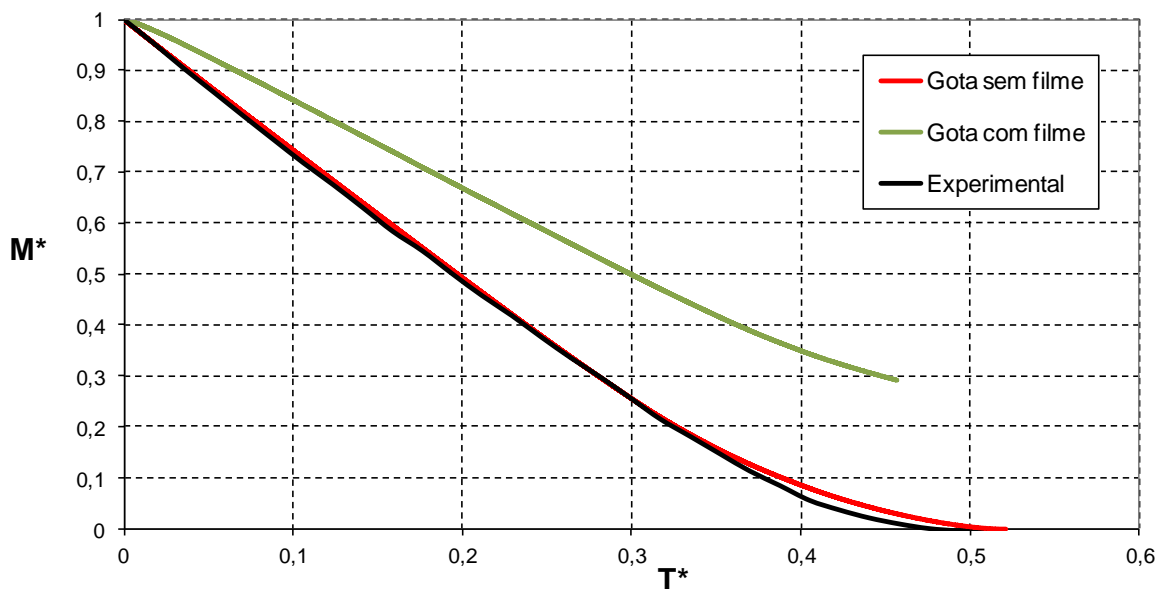


Figura 4.24 – Concentração adimensional de massa de líquido no tempo adimensional para o caso da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $120\mu\text{m}$. (Linha vermelha concentração de líquido da simulação da gota sem o filme, linha verde concentração de líquido da simulação da gota com o filme e linha preta concentração de líquido do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003).

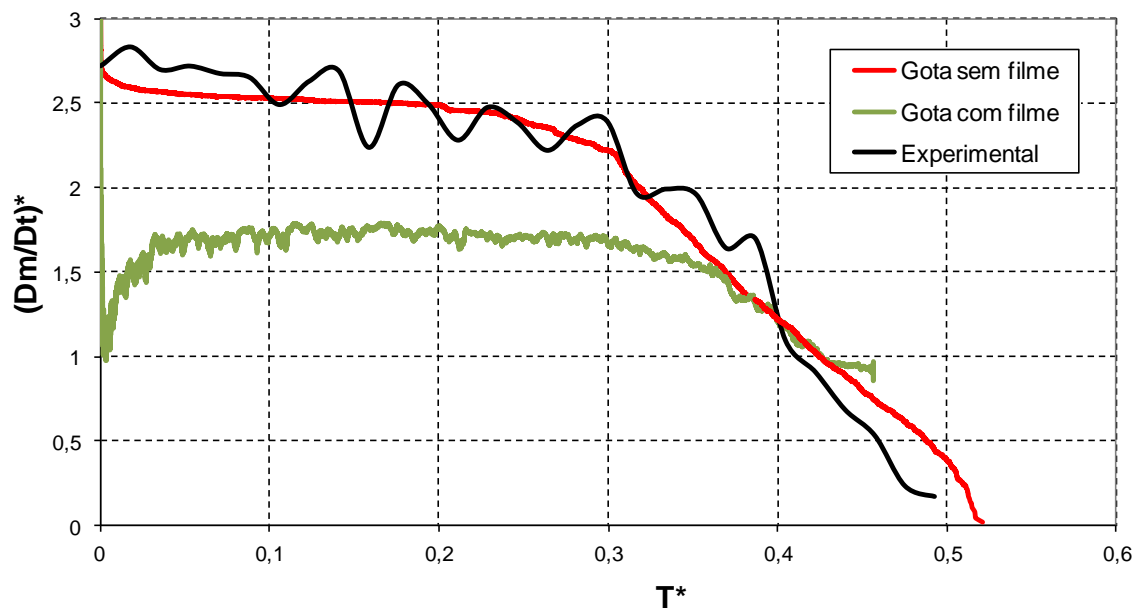


Figura 4.25 – Taxa de evaporação adimensional no tempo adimensional para da gota de água em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $400\mu\text{m}$. (Linha vermelha taxa de evaporação da simulação da gota sem o filme, linha verde taxa de evaporação da simulação da gota com o filme e linha preta taxa de evaporação do resultado experimental, REIS *et al.*, 2003).

4.3.2 Meio poroso composto por partículas de areia

Este item apresenta a simulação de uma gota de água em um meio poroso de partículas de areia com diâmetro de $180\mu\text{m}$ e compara os resultados com os resultados experimentais de Reis *et al.* (2003). Apenas as simulações do caso da gota com a presença do filme são mostradas.

4.3.2.1 Configuração inicial

De maneira semelhante ao caso base, segue-se o procedimento descrito no item 3.2.1 para a configuração do meio poroso. Para garantir uma porosidade de 0,41, os valores de λ para o cálculo da distribuição do diâmetro dos poros e comprimento de ligação são: 3 e 0,14mm.

Os valores de R^* e H^* são obtidos pela Tabela 2.2 e, em conjunto com as equações 3.33 e 3.34, calcula-se o raio e a profundidade inicial da gota. Com base nas imagens 2D (Figura 4.26(a)) do formato inicial da gota do experimento de Reis *et al.* (2003), nota-se que a definição do contorno da gota é difícil de ser determinada. Conforme pode se observar existe uma zona mais clara na região central, que se refere a uma grande concentração de líquido, provavelmente indicando a região saturada de líquido. Percebe-se ainda uma zona menos clara, logo abaixo. Essa região representa uma baixa concentração de líquido e essa pequena quantidade de massa é detectada no gráfico do perfil de concentração de líquido (Figura 4.26 (b)). Esta região pode ser composta por poros que não estão totalmente cheios de líquidos ou pode representar a presença do filme de líquido. Por formar uma região cujo contorno é de difícil identificação e por não saber se há uma região de filme, decidiu-se representar somente a região mais clara da Figura 4.26(a). Dessa forma, a geometria inicial da gota do modelo computacional é semelhante à região mais clara obtida pelos valores de R^* e H^* . Essa forma inicial apresenta uma quantidade de líquido inferior ao detectado pelo experimento, pois não contempla a área de líquido espalhado que está exposta para evaporação. A massa de líquido inicial no modelo é de aproximadamente $10\mu\text{g}$.

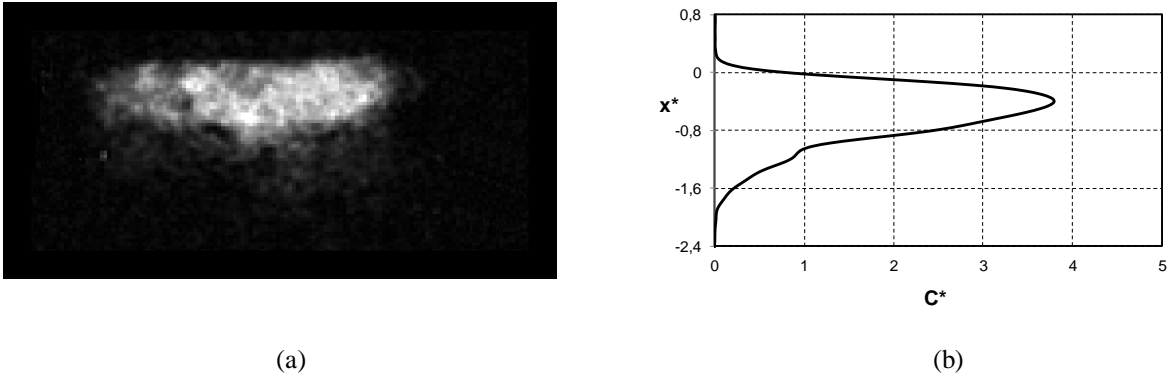


Figura 4.26 - Evolução temporal das imagens da gota de água dentro do meio poroso com partículas de areia de 180 μm de diâmetro. (a) Imagem 2D obtida com uso de NRM e (b) perfil de concentração de líquido (REIS *et al.*, 2003).

Por não considerar a geometria inicial exata da gota, os resultados numéricos apresentam diferenças no comportamento e valores da curva da taxa de evaporação. Por este motivo, as imagens 2D e os gráficos da taxa de evaporação serão apresentados somente para mostrar o comportamento, sem intuito de comparação quantitativa com os dados experimentais.

Baseado no contexto exposto, a geometria inicial da gota do modelo representará o perfil de concentração de líquido experimental somente até a profundidade referente à H^* . Pelo perfil de concentração (Figura 4.26(b)), há uma quantidade de líquido acima da superfície superior. Esta massa não é considerada, pois a superfície do meio poroso é representada de forma plana. A Tabela 4.5 mostra os valores da quantidade de poros no raio da gota e o λ (equação 3.40) de cada camada.

O fato de a geometria inicial da gota ser diferente para o caso do meio poroso com partículas de areia em comparação à de esferas de vidro mostra que as características do transporte de líquido não são as mesmas. Reis *et al.* (2003) citam que o mecanismo de transporte de líquido é diferente devido a estrutura do meio poroso. Os autores reportam que existe maior transporte ou difusão capilar para a areia devido as diferenças de microestrutura do meio poroso. De fato, este comportamento é reportado em diversos livros texto da área, tais como Bear (1972).

Isso pode sugerir que para este caso o meio poroso é mais favorável ao transporte de filme, oferecendo assim, menor resistência ao escoamento. Como o coeficiente β é dependente das características do meio poroso, é razoável pensar que seu valor, para este caso, deva ser

menor em relação aos demais meios porosos estudados. Os valores das taxas de evaporação entre os experimentos e as simulações são diferentes, conforme descrito anteriormente. Sendo assim, não é possível ajustar o valor de β com base nesses resultados. Dessa forma, ajustam-se os valores com base nos gráficos do perfil de concentração de líquido. O ajuste é realizado da seguinte maneira: quanto menor o valor de β , mais líquido migra da gota para a região de poros vazios na matriz. Esse espalhamento do líquido é representado pelo perfil de concentração. Portanto, o valor β que melhor representar o perfil de concentração em relação aos experimentos é definido como o melhor ajuste. O valor considerado é $\beta = 6.10^4$ que é significativamente menor do que aqueles utilizados para os outros meios porosos analisados (esferas de vidro 400 e 120 μ m).

As dimensões da matriz porosa são 86x60x86.

O valor de λ , para o cálculo da distribuição do tamanho da lateral das ligações (equação 3.39) é definido igual a 3.

4.3.2.2 Processo de evaporação

A comparação entre as imagens 2D experimental e numérica é apresentada na Figura 4.27. A primeira imagem retrata a discussão sobre a configuração inicial. A gota do modelo computacional está concentrada na região central, enquanto no experimento há um espalhamento do líquido em menores concentrações. Ao longo do processo, a imagem de líquido do experimento reduz rapidamente tornando-se quase que imperceptível em $M^* = 0,460$. As imagens dos resultados numéricos em todos os casos estudados nesta tese mostram apenas o líquido nos poros cheios, não há imagem do líquido na região do filme. Em outras palavras, é mostrada a distribuição de fase apenas do *cluster* (região de poros cheios). Neste caso, o comportamento da distribuição de fase é semelhante aos demais casos apresentados. Pelas imagens 2D, nota-se que há uma redução de líquido em todo o contorno da gota que se dá de maneira homogênea. Logo, na segunda imagem ($M^* = 0,755$), há o surgimento de vários *clusters* desconectados, o que também é mostrado na imagem experimental. No último instante, há ainda concentração de líquido no *cluster*, apesar da imagem experimental não mostrar presença de líquido.

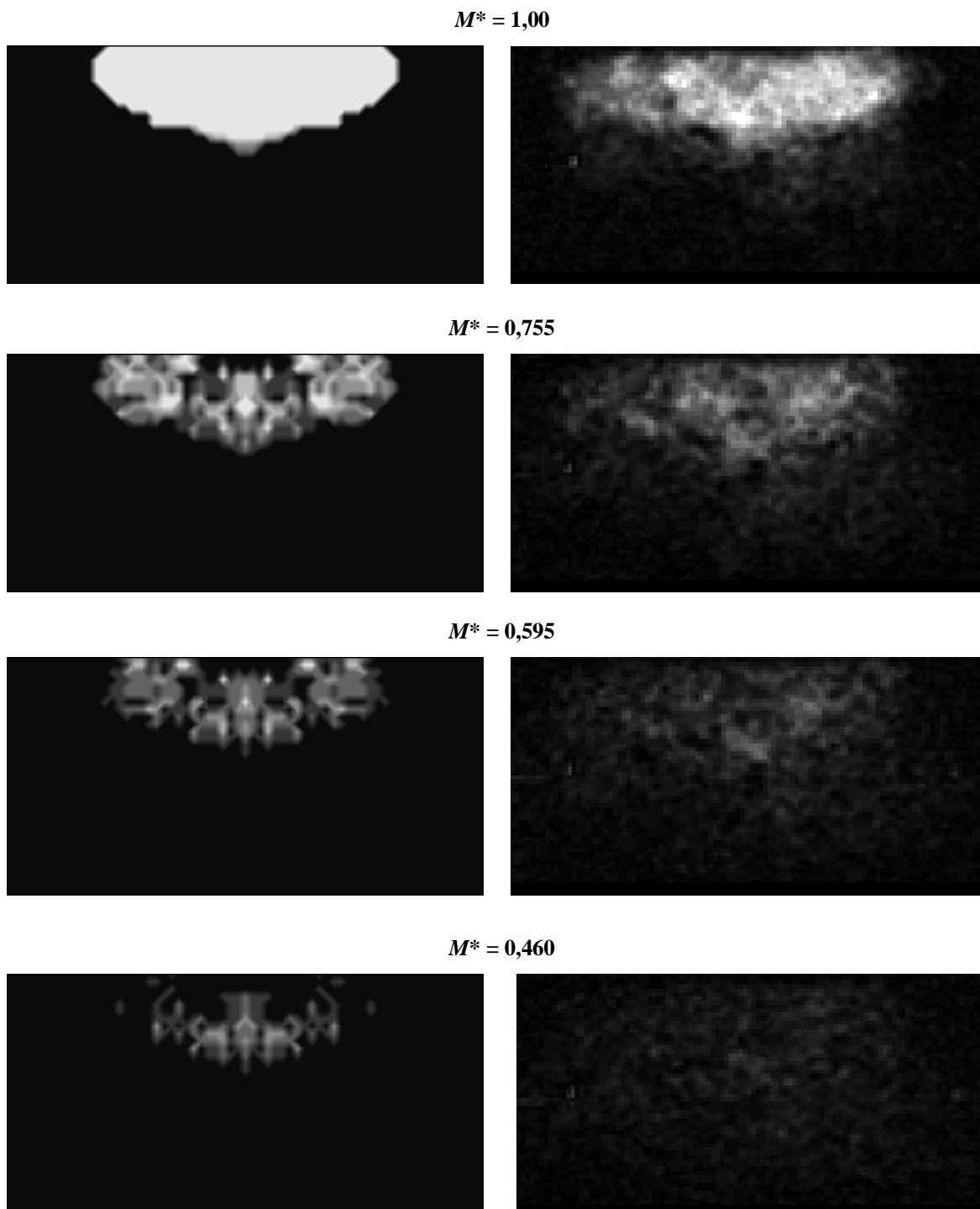


Figura 4.27 - Evolução temporal das imagens 2D da gota de água dentro do meio poroso de partículas de areia com diâmetro de $180\mu\text{m}$. Simulação no lado esquerdo e dados experimentais no lado direito (REIS *et al*, 2003).

Os perfis de concentração de líquido dos resultados experimentais e numéricos são mostrados na Figura 4.28. As simulações foram realizadas somente para o caso da gota com

e sem a presença do filme. Em cada instante são mostrados dois gráficos. O gráfico da esquerda mostra na cor preta o resultado do perfil experimental, em vermelho o resultado numérico sem a inclusão do filme e em verde com o filme. Na direita o mesmo gráfico é mostrado, porém, o resultado numérico mostrado é apenas para o caso com o filme. Nele são apresentadas duas curvas, em amarelo a curva do perfil de concentração de líquido presente no filme e em azul o perfil de concentração do *cluster* (poros cheios). Nota-se que a curva verde (gráfico da esquerda) é a soma das curvas amarela e azul do gráfico a direita.

Conforme descrito anteriormente, a geometria inicial da gota do modelo não possui a mesma massa inicial e nem considera inicialmente a presença de líquido nas regiões mais profundas na matriz. Além disso, a superfície do meio poroso é considerada plana, assim, não há concentração de líquido acima dela. Dessa forma, em $M^* = 1,000$, o perfil do modelo tem concentração igual à zero nas regiões abaixo de $X^* = -1,0$ e acima de $X^* = 0,0$. Apesar dos dados experimentais apresentam resultados até $M^* = 0,070$, neste trabalho são amostrados os resultados até $M^* = 0,460$, pois é quando todos os poros que inicialmente estavam cheio se esvaziam e a partir desse momento, o modelo não prossegue com a simulação.

Logo no início ($M^* = 0,755$), a concentração de líquido da gota experimental tem uma grande redução, de aproximadamente metade do seu valor inicial, na região próxima a superfície do meio poroso. Nesse mesmo instante, há uma grande migração de líquido para as regiões mais profundas da matriz. Percebe-se em $M^* = 0,595$ que o líquido, do resultado experimental, se deslocou para a região entre $X^* = -1,6$ a $X^* = -3,0$. Este comportamento não é predito pelo modelo sem a inclusão do filme. Por outro lado, o resultado numérico para o caso com filme também mostra uma redução maior na região superior e uma migração de líquido para regiões mais profundas. Nota-se, pela curva amarela, que há uma grande presença de líquido no filme distribuído ao longo da região superior e também na região inferior a $X^* = -1,0$, ou seja, houve migração de líquido para as regiões inferiores e esse transporte ocorreu através do filme.

No decorrer do processo, a migração de líquido da gota para o filme torna-se cada vez maior nos resultados das simulações e os perfis de concentração preditos pelo modelo com

filme apresentam melhor concordância com os dados experimentais. Entretanto, convém ressaltar que a profundidade máxima do líquido predita pelo modelo com filme é bastante superestimada em relação aos dados experimentais. O resultado da simulação sem filme (curva vermelha do gráfico a esquerda) mostra uma redução do perfil de forma uniforme ao longo de toda profundidade da gota e sem aumento de concentração nas regiões inferiores. Pelas imagens 2D da figura 4.27, no instante final, a concentração de líquido na imagem é muito baixa, e a região que era clara na imagem em $M^* = 1,0$ está praticamente escura, mesmo havendo concentração de líquido conforme mostrado no perfil. Este resultado evidencia o fato de que as imagens 2D obtidas por NRM não conseguem captar baixos valores de concentração. Essa análise sugere que a presença de líquido seja mais significativa para o caso da evaporação de uma gota de água em um meio poroso de areia do que nos casos em meios porosos com esferas de vidro. Em casos onde a presença do filme é significativa, o modelo consegue prever a distribuição de fase com melhor precisão. O resultado da simulação sem filme mostra uma redução do perfil, mas não a migração de líquido para as regiões mais profundas, abaixo de $X^* = -1,0$ a concentração de líquido é nula. Isso mostra que o modelo não é capaz de captar o transporte de líquido ao longo da matriz. O modelo sem filme superestima significativamente as concentrações próximas à superfície e subestima as concentrações nas camadas mais profundas do meio poroso.

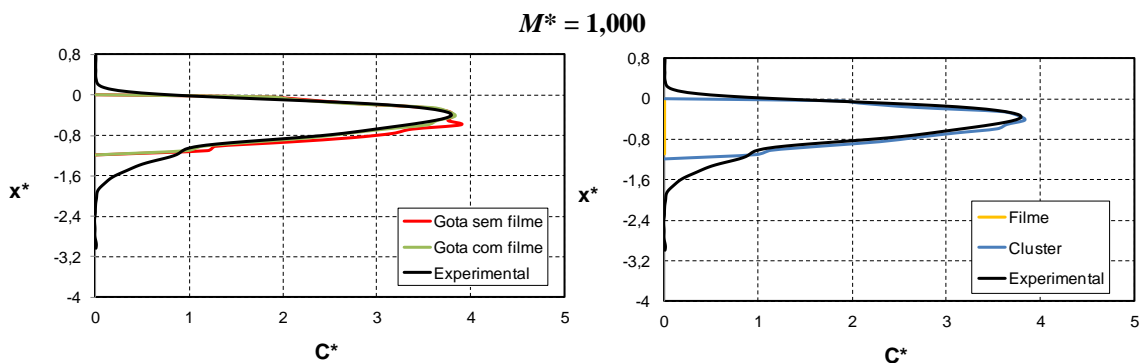
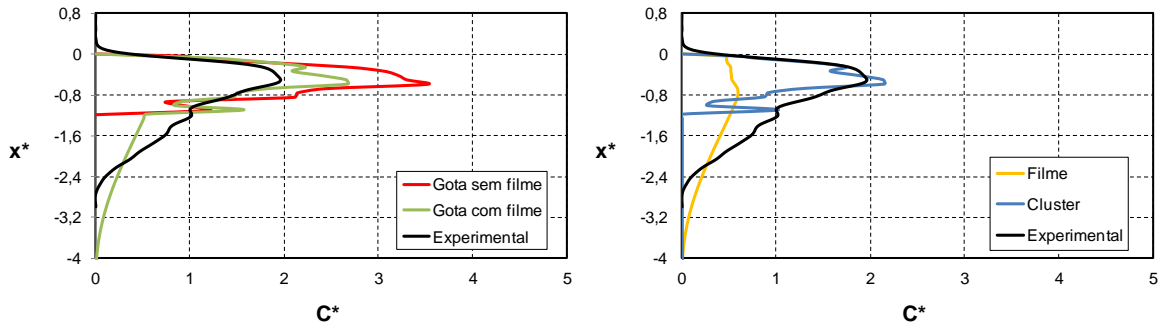
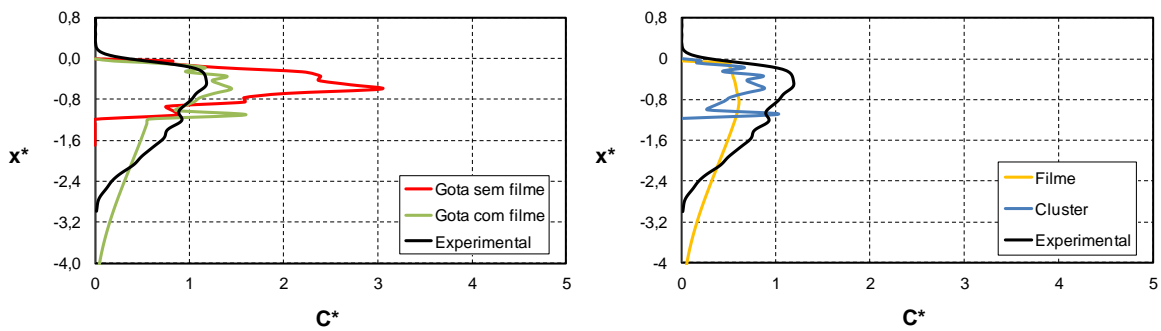


Figura 4.28 - Evolução temporal do perfil de concentração de líquido da gota de água dentro do meio poroso de partículas de areia com $180 \mu\text{m}$ de diâmetro. No gráfico à esquerda, a curva na cor preta é referente aos dados experimentais (REIS *et al.*, 2003) e as curvas nas cores vermelha e verde são os resultados das simulações para o caso sem o filme e com o filme, respectivamente. No gráfico à direita, a curva na cor preta é mesmo resultado experimental (REIS *et al.*, 2003) mostrado no gráfico à esquerda, em amarelo a curva do perfil de concentração de líquido presente no filme e em azul o perfil de concentração do *cluster* (poros cheios). O eixo X^* representa a profundidade da gota em milímetros e o eixo C^* é a concentração adimensional de líquido.

$$M^* = 0,755$$



$$M^* = 0,595$$



$$M^* = 0,460$$

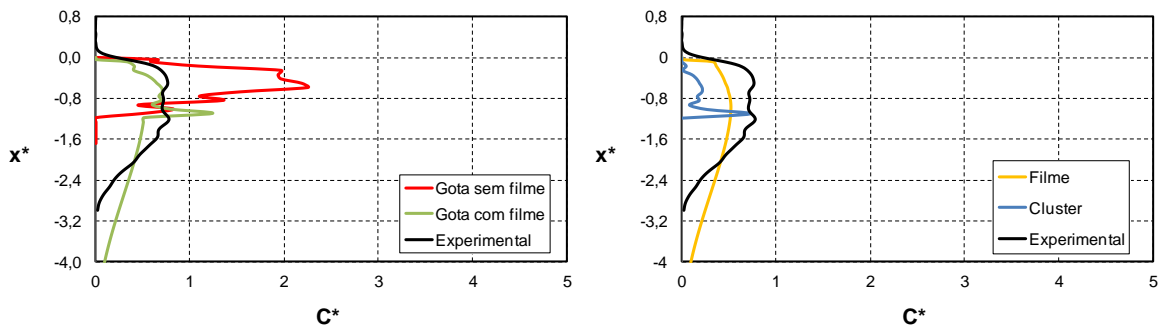


Figura 4.28 - Continuação.

O comportamento do filme pode ser melhor observado na Figura 4.29 que mostra os resultados numéricos da evolução temporal do raio de curvatura do filme (R_f^*). O gráfico mostra os resultados obtidos no plano central da gota e os poros cheios estão na cor vermelha. Na Figura são mostrados apenas os intervalos de -1 a -90 na profundidade e 1 a 90 na largura da matriz.

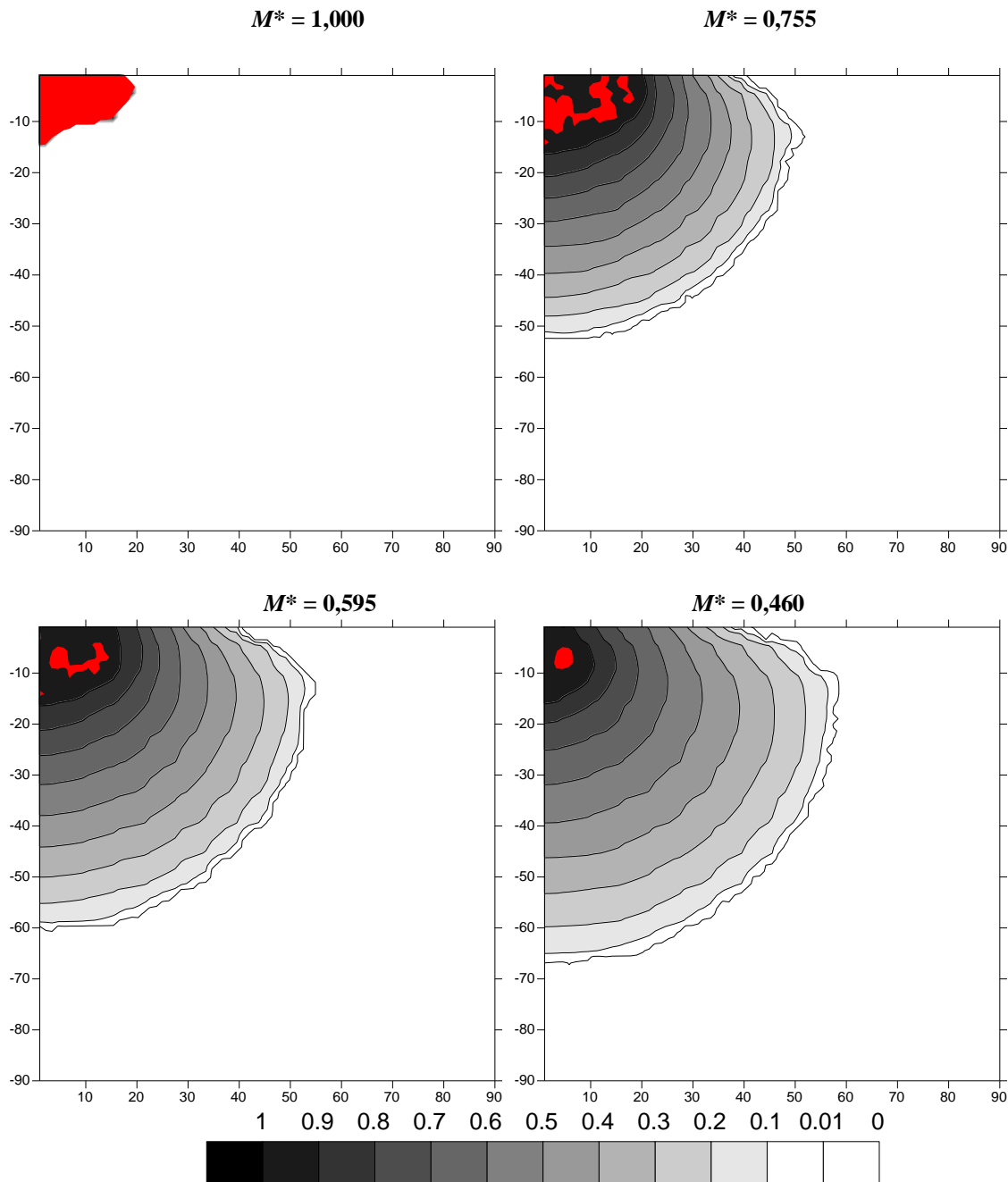


Figura 4.29– Isolinhas do valor de R_f^* do filme dentro do meio poroso para a simulação da gota de água com a presença do filme. Vista do plano central da matriz (86x60x86) mostrando apenas a região de 1 a 90 na largura e -1 a -90 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho.

O filme avança rapidamente para as regiões mais fundas, enquanto próximo à superfície, a massa de líquido no filme é menor devido à elevada taxa de evaporação próxima ao meio externo. Ao longo da secagem, o filme continua migrando para regiões laterais e para

baixo, mas mantém uma baixa concentração na superfície. Percebe-se, também, que há uma grande área onde há presença de filme nas regiões inferiores para uma quantidade muito pequena de poros cheios.

Os resultados da concentração de vapor (C_v^*) são mostrados na Figura 4.30 para ambos os casos. A esquerda é mostrado o gráfico da concentração de vapor referente ao caso com filme e a direita ao caso sem filme. Os poros cheios estão na cor vermelha e a isolinha de valor $R_f^* = 0,01$ que delimita a região de filme está na cor azul. O plano central da gota é mostrado nos intervalos de -1 a -90 na profundidade e 1 a 90 na largura.

Pode ser visto que nos primeiros instantes a concentração de vapor do caso sem filme se propaga mais rapidamente, mas ao longo do processo essa situação é revertida devido ao rápido crescimento da região de filme. Nota-se ainda que a região do filme está em uma zona completamente saturada de vapor. Na evolução do processo ($M^* = 0,595$ e $M^* = 0,460$), nota-se que há um gradiente de concentração de vapor maior em direção à superfície da matriz porosa no caso com filme e na região onde há filme de líquido, a concentração permanece saturada mesmo na região superior. Percebe-se que para o caso sem filme a região de concentração saturada situa-se bem próxima ao contorno da gota. Em $M^* = 0,460$ surgem os *clusters* desconectados e nota-se que a quantidade de poros cheios é superior ao caso com filme.

A Figura 4.31 apresenta a curva de evolução no tempo da fração de massa de líquido. A curva do resultado experimental corrobora com a análise descrita anteriormente, mostrando uma rápida queda na massa de líquido da gota no início do episódio e uma queda mais suave no período restante. Apesar dos resultados do modelo do filme estarem mais próximos da curva experimental, nenhum dos modelos conseguiu capturar adequadamente o decaimento da massa de líquido no meio poroso, mesmo com as tentativas de ajuste para os parâmetros ótimos de β e λ . É interessante destacar que a quantidade de líquido mirado para o filme é mais alta em relação aos demais casos. O valor chega próximo a 40% da massa inicial da gota em $T^* = 0,3$, ou seja, pela curva do cluster (azul) nota-se que todos os poros que inicialmente estavam cheios se esvaziaram e a massa de líquido restante está toda

no filme. A curva do caso sem filme também mostra uma redução linear, por um período mais longo e uma redução suave no final.

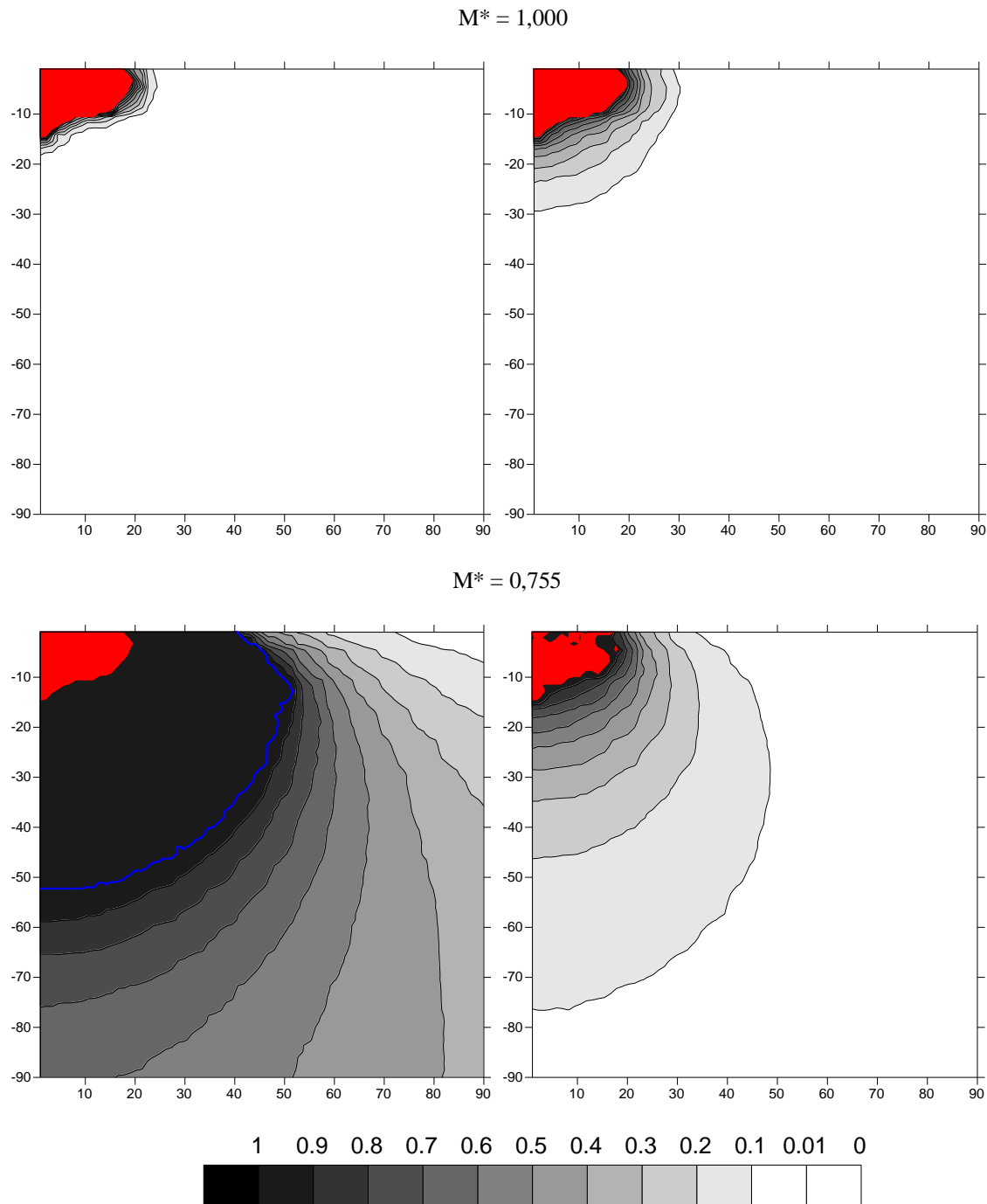


Figura 4.30 – Evolução temporal da concentração de vapor (C_v^*) dentro do meio poroso para a simulação da gota de água em um meio poroso de partículas de areia. O resultado da simulação com a presença do filme está a esquerda e a direita o resultado da simulação sem filme. Vista do plano central da matriz (86x60x86) mostrando apenas a região de 1 a 90 na largura e -1 a -90 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho e a região onde existe filme está delimitada em azul.

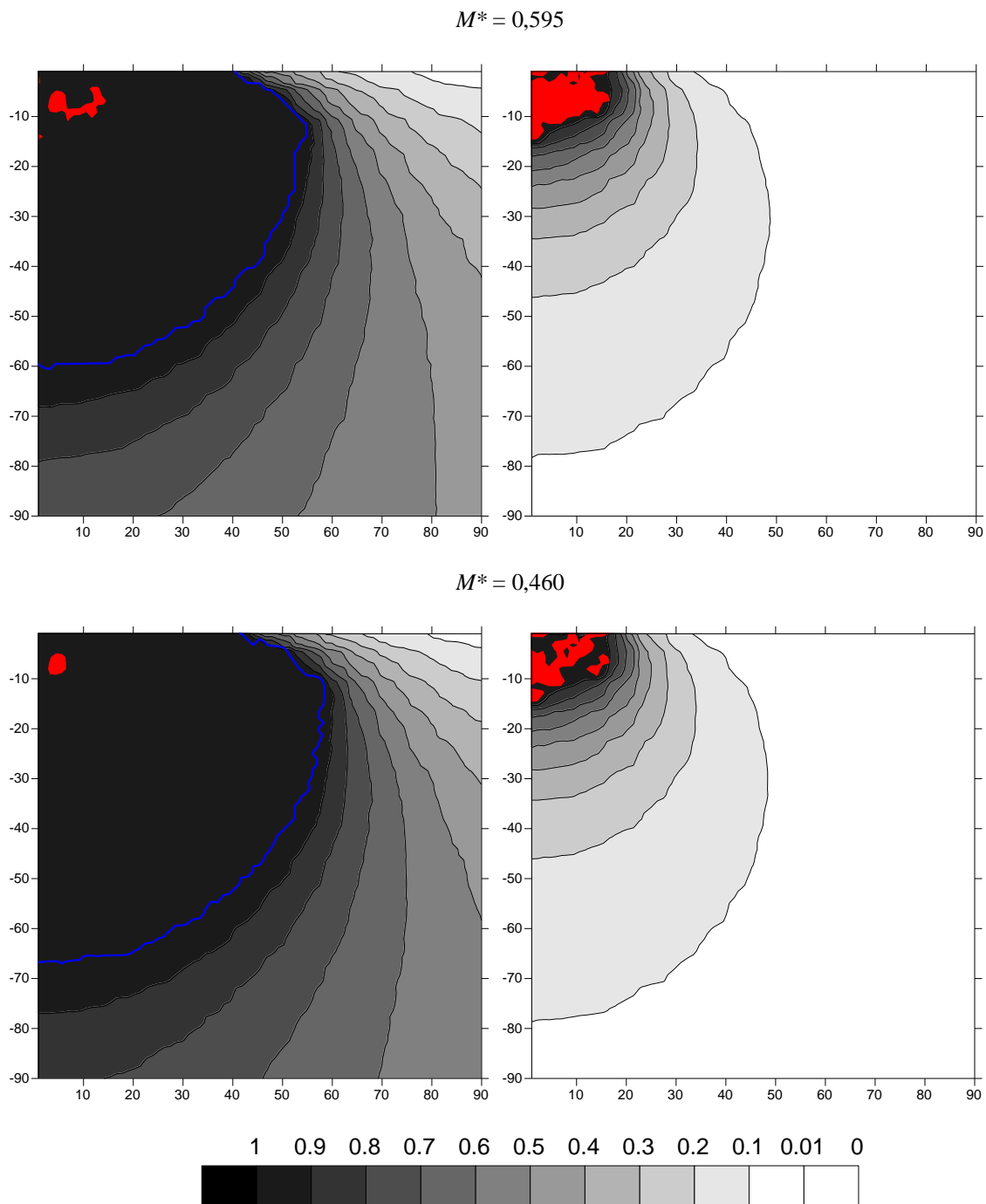


Figura 4.30 – Continuação.

As curvas da taxa de evaporação das simulações com e sem o filme e experimental, na forma adimensional, são mostradas na Figura 4.32. A curva experimental apresenta um

comportamento diferente entre os casos de gota de água. Ela tem um valor inicial alto não sendo possível identificar o CRP. Como há uma grande migração de líquido para as camadas mais profundas, durante o processo de secagem, a taxa de evaporação é cada vez menor, visto que, quanto mais próximo da superfície, maior é a remoção de vapor. Esse comportamento não é observado nos resultados numéricos, pois a geometria inicial da gota não possui área exposta para evaporação tão grande quanto no experimento. Logo, o comportamento dos resultados das simulações são semelhantes aos demais casos, há inicialmente um período de taxa de evaporação constante e uma subsequente queda. Por ter um maior valor, o CRP é mais curto para o caso com filme. Para o caso sem filme observa-se que a curva da taxa de evaporação permanece constante por um longo tempo e apresenta uma redução suave no período final do processo.

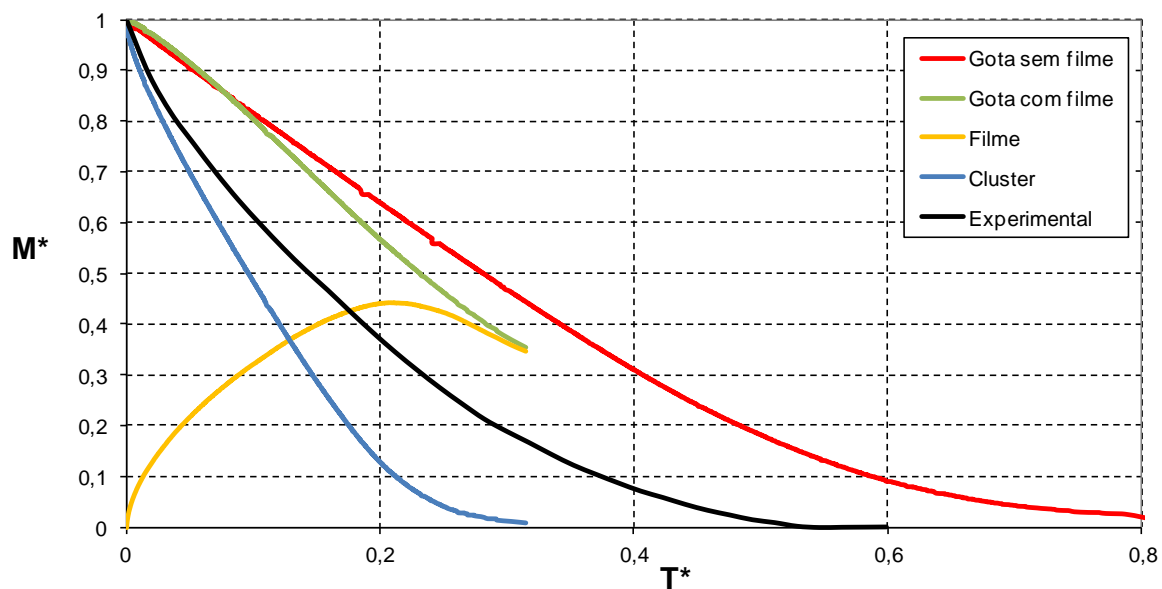


Figura 4.31 – Concentração adimensional de massa de líquido no tempo adimensional para o caso da gota de água em meio poroso de partículas de areia. (Linha verde taxa de evaporação da simulação da gota com o filme e linha preta resultado experimental, REIS *et al.*, 2003).

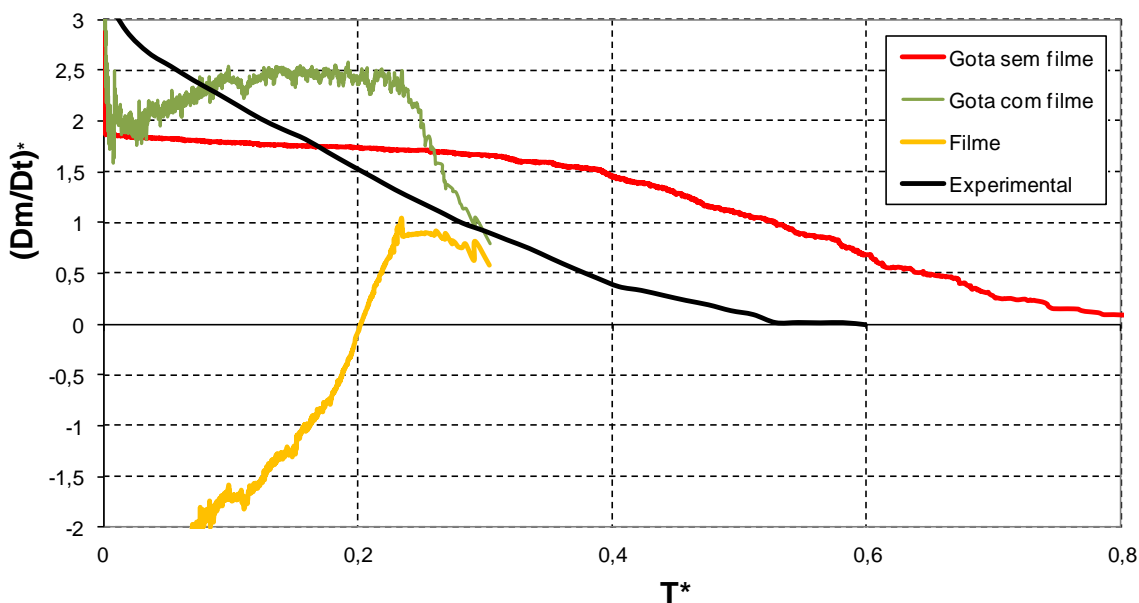


Figura 4.32 – Taxa de evaporação adimensional no tempo adimensional para o caso da gota de água em meio poroso de partículas de areia com 180 μm de diâmetro. (Linha verde taxa de evaporação da simulação da gota com o filme e linha preta resultado experimental, REIS *et al.*, 2003).

4.4 COMPARAÇÃO ENTRE GOTAS DE ÁGUA E DEM

Com o objetivo de avaliar o efeito das propriedades dos líquidos sobre a capacidade de predição do modelo, os resultados obtidos para água são comparados com DEM, que possui viscosidade maior, tensão superficial menor e menor concentração de saturação e vapor.

Nesta seção, são apresentados os resultados obtidos nas simulações para o caso da evaporação de uma gota de DEM imersa em um meio poroso composto por esferas de vidro com 120 μm de diâmetro e v_r igual a 0,0079 m/s. A simulação é realizada na condição de simetria considerando-se apenas um quarto da matriz porosa.

4.4.1 Configuração inicial

As características da matriz porosa são as mesmas do item 4.2.1.1, considera-se os mesmos valores para valores a constante λ (equação 3.37) e a distância entre poroso ($\lambda = 1,4$ e

distância entre poros igual a 0,087mm). Dessa forma, a porosidade de 0,41 é garantida no meio poroso. As dimensões da matriz porosa são 125x126x125.

O meio poroso é equivalente à configuração do item 4.3.1. É possível se perceber pela imagem 2D da Figura 4.33 (a) e a respectiva concentração de líquido da Figura 4.33(b) que como nos casos das configurações com água o formato da gota no interior do meio poroso é similar a um semi-elipsoide. Nota-se ainda que há líquido acima da superfície superior que é quantificada pelo perfil de concentração. Essa quantidade de líquido existente é devido às irregularidades nas partículas do meio poroso na superfície (REIS *et al.*, 2006). Da mesma forma que nas configurações anteriores, o modelo computacional considera a superfície do meio poroso plana sem concentração de líquido acima dela.

O valor da constante λ utilizada para a distribuição dos valores da lateral das ligações (equação 3.36), assim como, o valor do coeficiente β são determinados analogamente ao caso base. Porém, os dados das simulações realizadas para a comparação e escolha desses valores não estão disponíveis porque não houve tempo hábil. Escolheu-se o valor de 3 para λ e $1,5 \cdot 10^6$ para β .

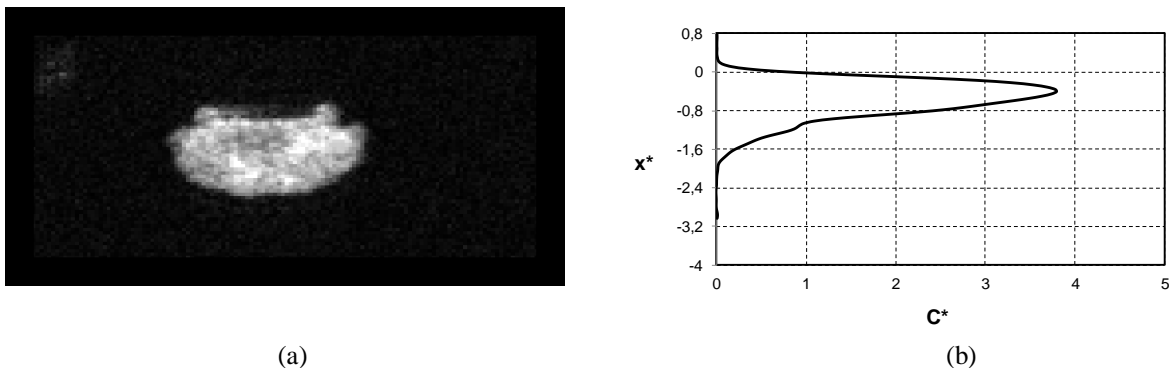


Figura 4.33 - Evolução no tempo das imagens da gota de DEM dentro do meio poroso de esferas de vidro com 120 μm de diâmetro. (a) Imagem 2D obtida com uso de NRM e (b) perfil de concentração de líquido (REIS *et al.*, 2003) e simulação lado direito

4.4.2 Processo de evaporação

A Figura 4.34 mostra a comparação da evolução temporal da distribuição de líquido pelas imagens 2D dos experimentalmente e resultados do modelo numérico (com a presença do filme). Reis *et al.* (2006) comentam que há uma redução de líquido na superfície bastante

nítida nas primeiras imagens. Pode-se notar que quase não há redução de concentração nas camadas mais inferiores da gota, diferentemente dos casos de água (tens 4.2 e 4.3.1). As imagens do modelo numérico não representam muito bem esse comportamento. O resultado numérico para até $M^* = 0,935$ indica uma redução de concentração de líquido superior na superfície em relação as camadas inferiores, mas a partir de então a redução ocorre de forma mais homogênea em todo o contorno da gota, inclusive nas camadas mais profundas. Na superfície a redução é apenas um pouco mais acentuada do que nas demais regiões do contorno.

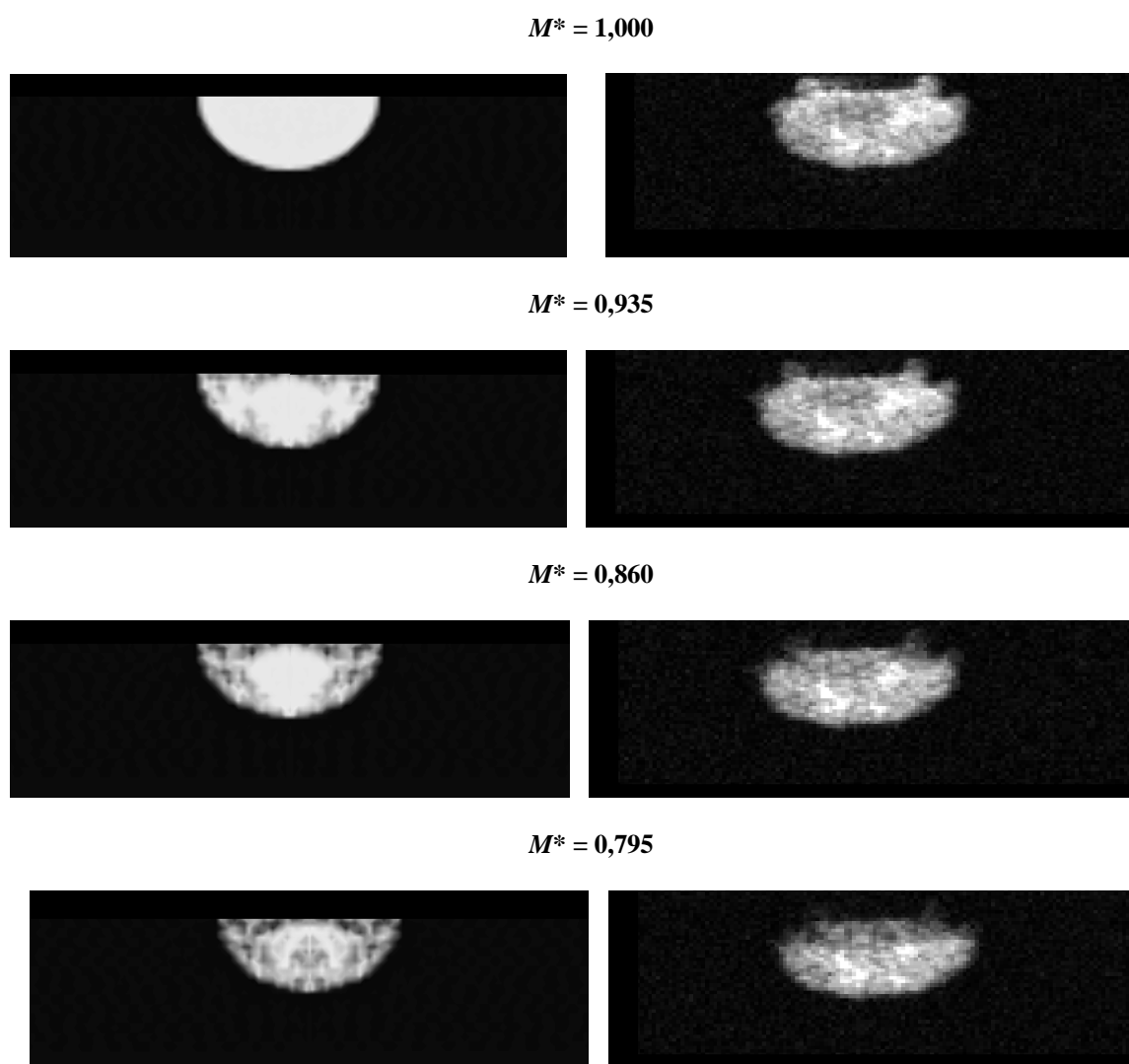


Figura 4.34 - Evolução temporal das imagens 2D da gota de DEM dentro do meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $120\mu\text{m}$. Simulação no lado esquerdo e dados experimentais no lado direito (REIS *et al*, 2006).

$M^* = 0,640$  $M^* = 0,570$  $M^* = 0,505$  $M^* = 0,400$  $M^* = 0,355$  $M^* = 0,270$ 

Figura 4.34 – (continuação)

Nos experimentos, observa-se a evolução de uma frente de secagem avançando da superfície para o interior da gota. Esse fenômeno ocorre somente até $M^* = 0,640$. A partir desse ponto, a evaporação torna-se mais homogênea em toda a gota. As imagens das simulações mostram que no período até $M^* = 0,640$ a frente de evaporação avança vinda de todas as extremidades até o centro formando os *fingers* e gerando vários *clusters* desconectados. No período seguinte, pode-se visualizar que a secagem passa a ser mais homogênea da mesma forma como ocorre nos experimentos.

O comportamento relacionado ao avanço de uma frente de evaporação observado nos experimentos está provavelmente ligado à viscosidade e tensão superficial do DEM, pois não foi observado para a água. Entretanto, as formulações para incorporação dos efeitos viscosos e gravitacionais incluídas no modelo não foram capazes de capturar tal fenômeno, nem geravam modificações significativas na solução e, portanto não são apresentadas aqui.

Reis *et al.* (2006), ressaltam que os perfis de concentração (Figura 4.35) apresentam, de forma semelhante às imagens, a redução de líquido na superfície e que o perfil é quase inalterado nas regiões mais profundas até aproximadamente metade da secagem. Os perfis das simulações com e sem filme mostram uma redução da concentração da superfície significativamente menor (Figura 4.35). No decorrer do tempo, até $M^* = 0,64$, a região de maior concentração do perfil dos resultados numéricos 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. Nesse ponto, nota-se uma significativa concentração de líquido nas regiões inferiores a $x^* = -1,6$ para o caso da gota com o filme. Essa concentração é proveniente do filme que começa a crescer. Então o líquido começa a migrar da gota para o filme e percebe-se que a redução de líquido na superfície é maior do que no caso da gota sem filme. Ou seja, a frente de secagem para este caso representa o transporte de líquido da gota para o filme. Nos instantes posteriores da secagem, o perfil mantém uma redução homogênea em toda a região num comportamento semelhante aos dos experimentos. Em $M^* = 0,27$, é de se observar que a gota com filme apresentou uma redução de líquido na região superior maior do que o caso da gota sem filme, com valores mais próximos aos resultados experimentais. Mostra também que há

uma grande concentração de líquido no filme nas regiões inferiores o que não é evidenciado no perfil de concentração dos dados experimentais

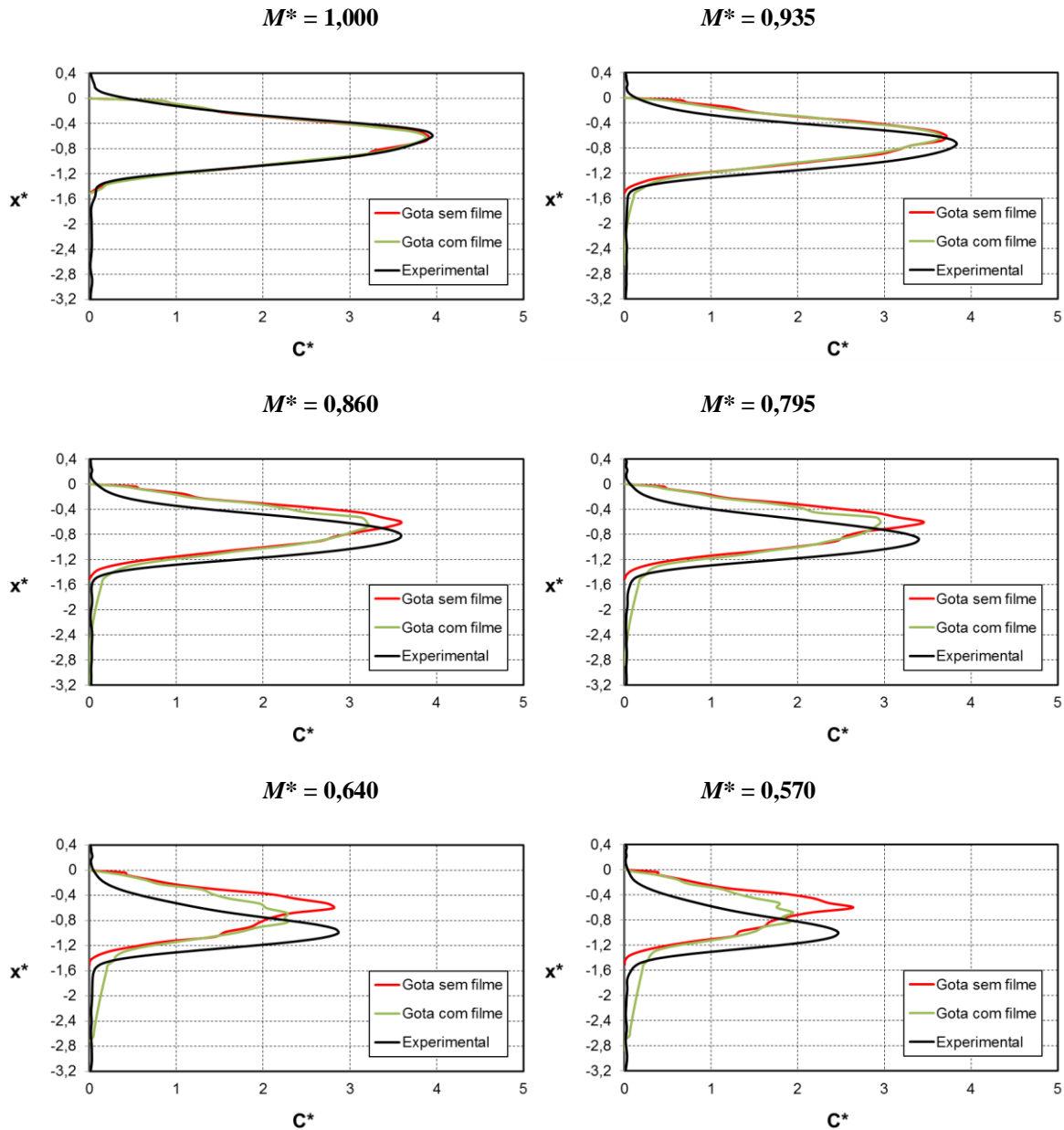


Figura 4.35 - Evolução temporal do perfil de concentração de líquido da gota de DEM dentro do meio poroso com 120 μm de diâmetro das partículas. A curva na cor preta é referente aos dados experimentais (REIS *et al.*, 2006) e as curvas nas cores vermelha e verde são os resultados das simulações para o caso sem o filme e com o filme respectivamente. O eixo x^* representa a profundidade da gota adimensional e o eixo c^* é a concentração adimensional de líquido..

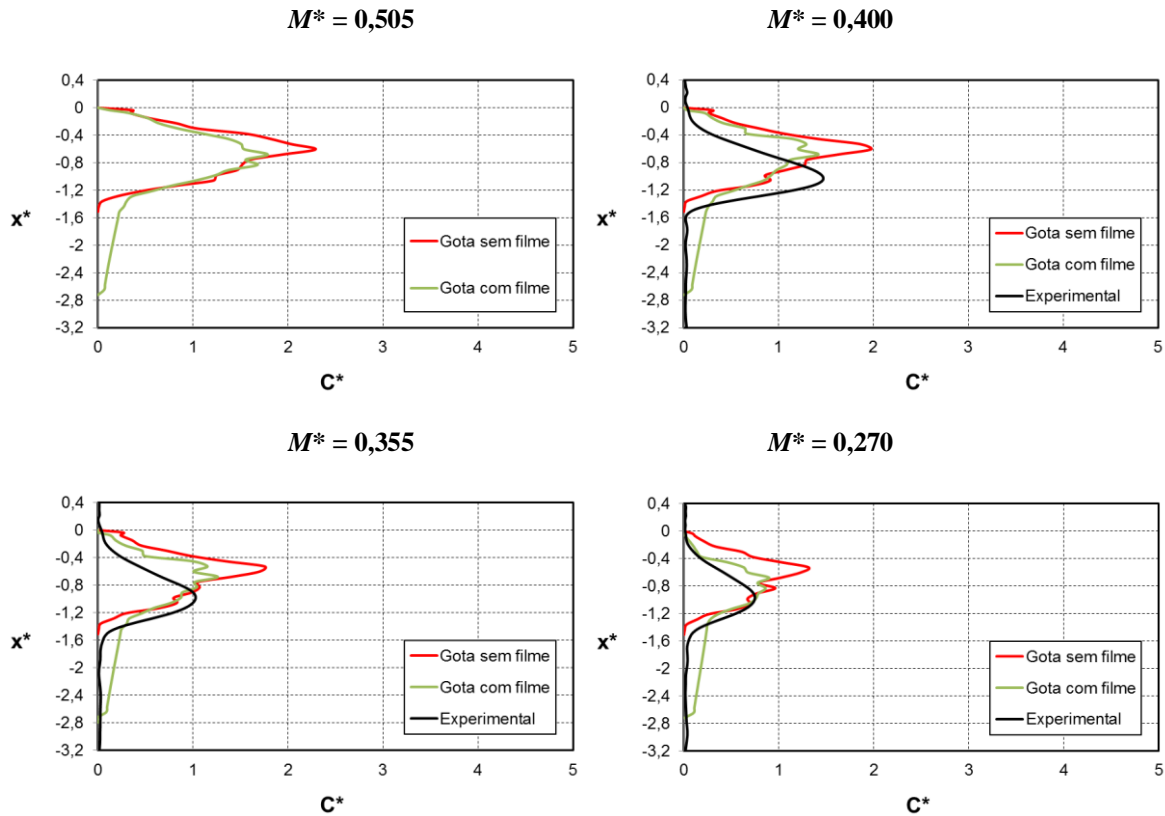


Figura 4.35 – (continuação)

A Figura 4.36 mostram os resultados da concentração de vapor para os casos da gota com e sem o filme respectivamente. As concentrações são mostradas no plano do centro da gota sobreposto com as imagens de poros cheios que estão em vermelho. Os intervalos de -1 a -80 na profundidade e 1 a 80 na largura são mostrados.

A concentração de vapor para o caso da gota com filme se divide em uma região saturada e uma onde há gradiente de concentração de vapor, de maneira equivalente ao ocorrido para os casos de água (Seção 4.2 e Seção 4.3.1) a região saturada corresponde à região do filme que é delimitada pela linha azul (essa linha corresponde ao de valor de $R_f^* = 0,01$). Inicialmente ($M^* = 0,935$) junto com o rápido crescimento da região de filme, há um rápido transporte de vapor na região de poros vazios da matriz. O transporte de vapor também é rápido para o caso da gota sem filme, mas a região de saturação de vapor é pequena e próxima ao contorno da gota. Mesmo com o surgimento dos clusters desconectados e uma

redução de poros cheios na superfície, em $M^* = 505$, não há gradiente de concentração de vapor na região da superfície para ambos os casos. Mesmo no final do processo de secagem a região próxima a superfície continua saturada de vapor. No caso da gota com filme isso ocorre, pois a região de filme esta presente nessa zona e já para o caso sem filme, a justificativa pode estar nas características do meio poroso e à menor concentração de saturação e vapor. Conforme observado no caso de evaporação de uma gota de água em esferas de $120\ \mu\text{m}$, para a simulação da gota sem o filme, há um gradiente de vapor em toda a superfície quando há redução de poros cheios nessa região.

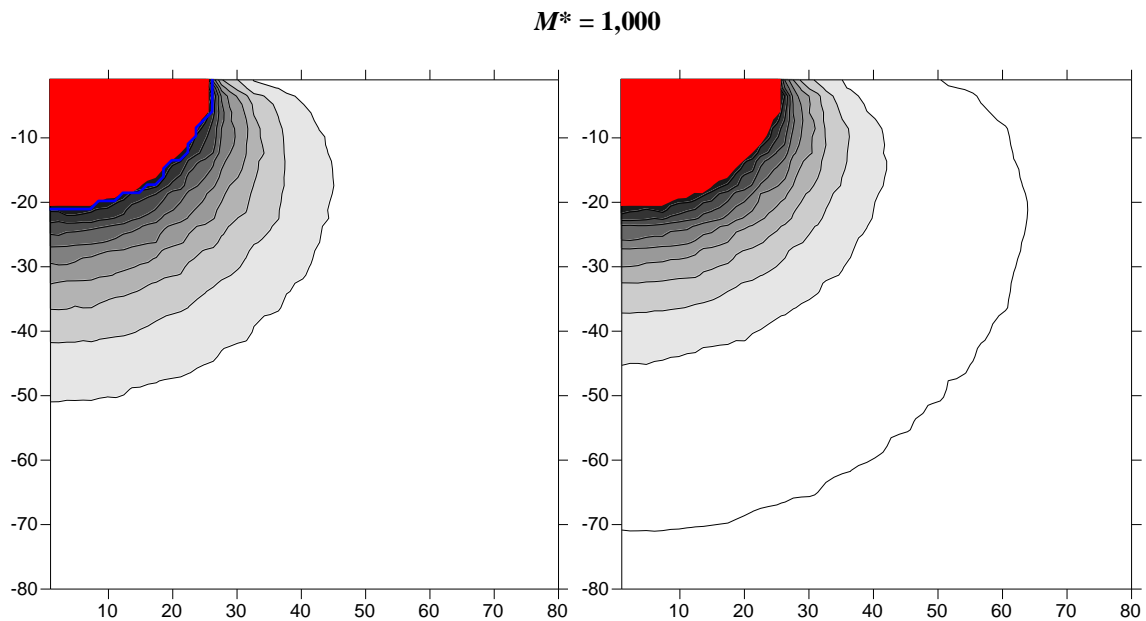


Figura 4.36 – Evolução no tempo da concentração de vapor (C_v^*) dentro do meio poroso para a simulação da gota de água em um meio poroso de partículas de areia. O resultado da simulação com a presença do filme esta a esquerda e a direita o resultado da simulação sem filme. Vista do plano central da matriz ($125 \times 126 \times 125$) mostrando apenas a região de 1 a 90 na largura e -1 a -90 na profundidade. Os poros cheios de líquido estão em vermelho e a região onde existe filme está delimitada em azul.

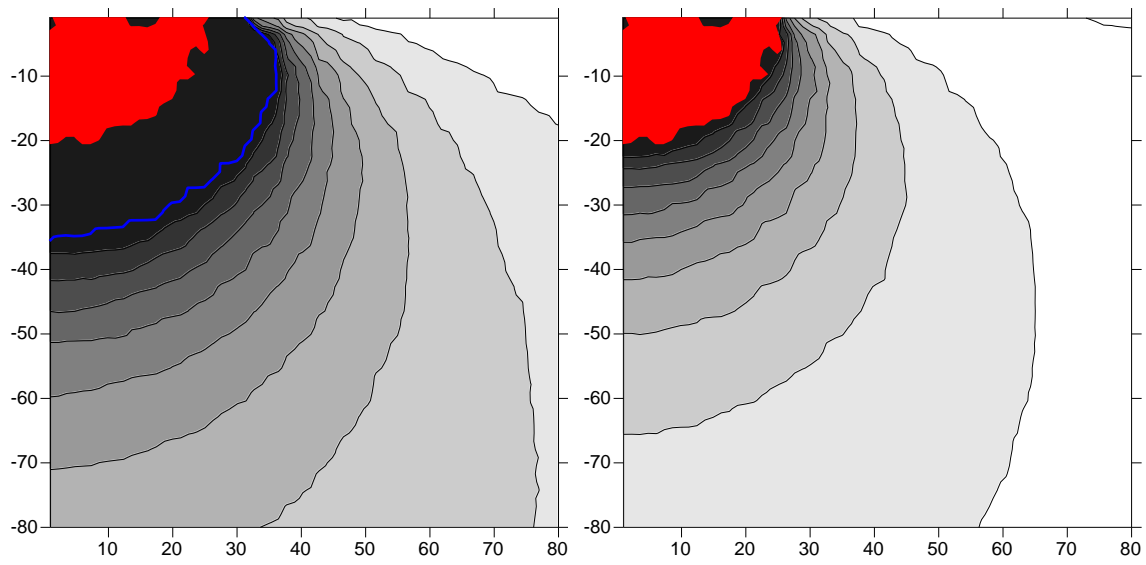
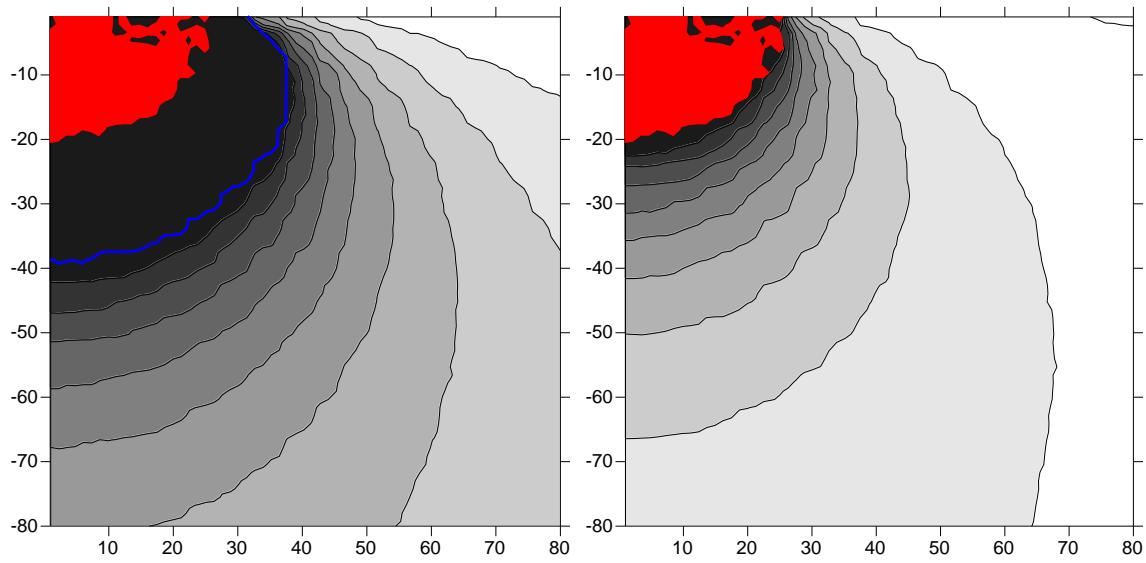
$M^* = 0,935$  $M^* = 0,860$ 

Figura 4.36 –Continuação

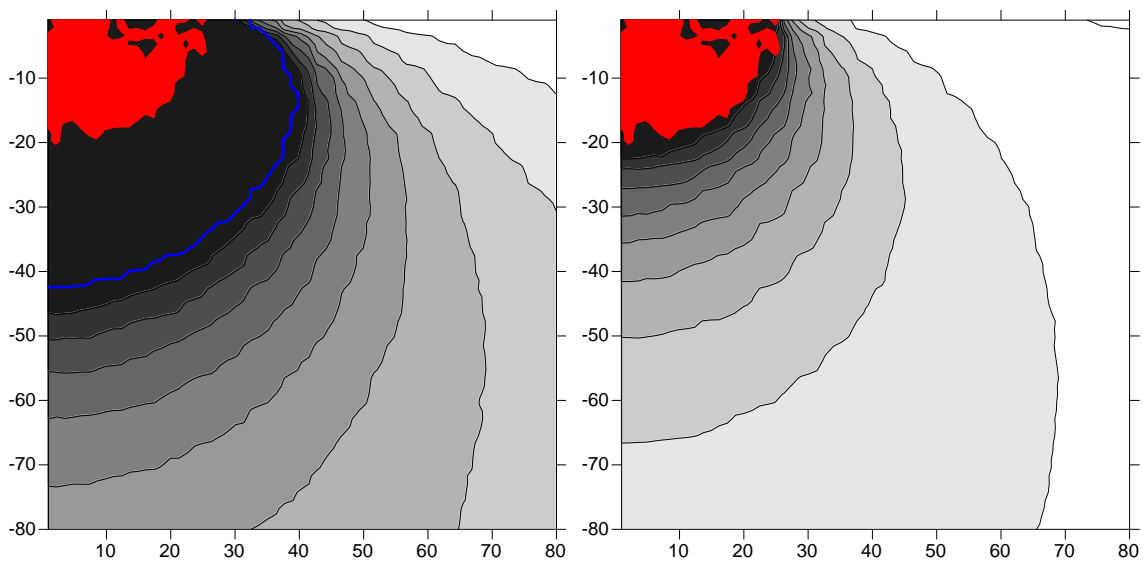
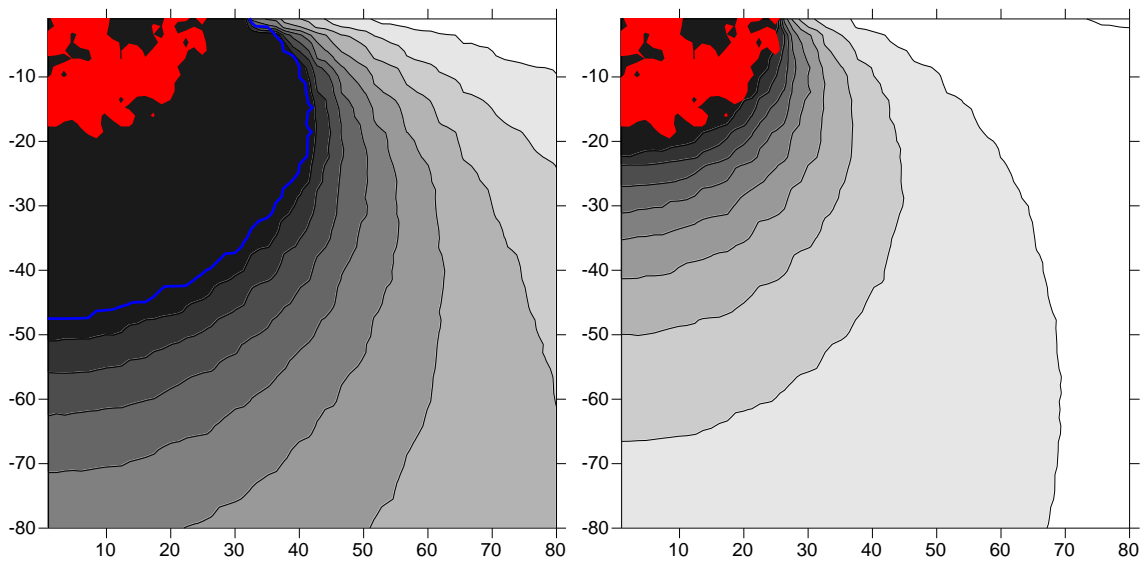
$M^* = 0,795$  $M^* = 0,640$ 

Figura 4.36 –Continuação

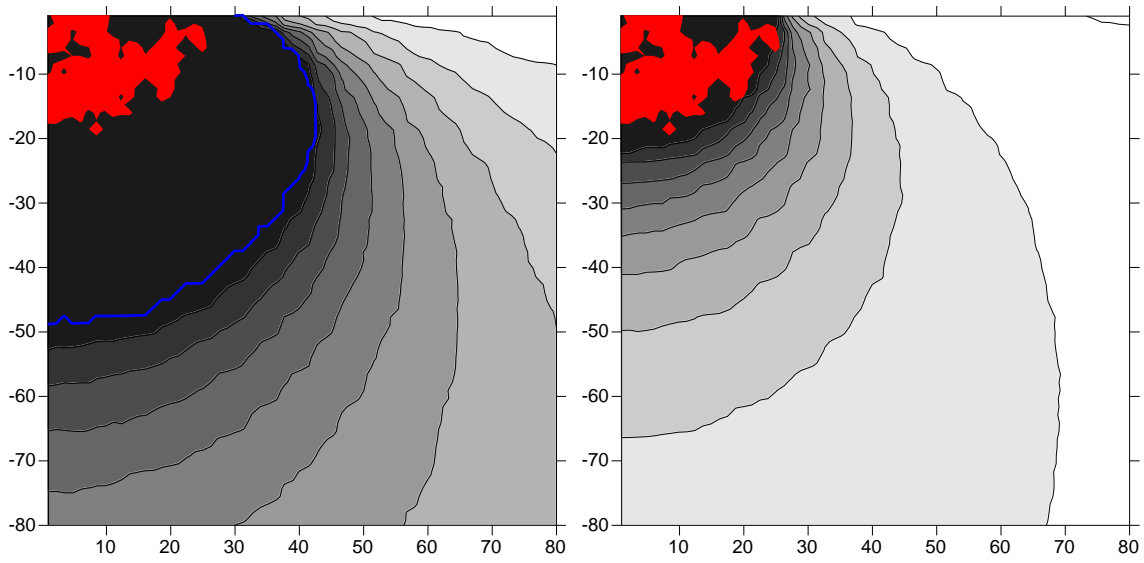
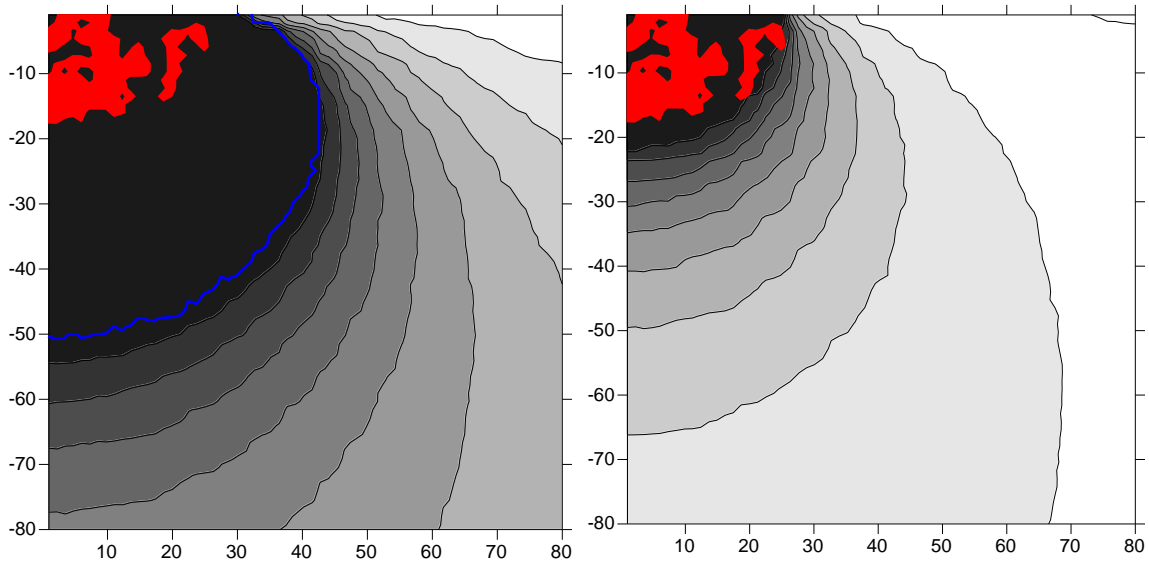
$M^* = 0,570$  $M^* = 0,505$ 

Figura 4.36 –Continuação

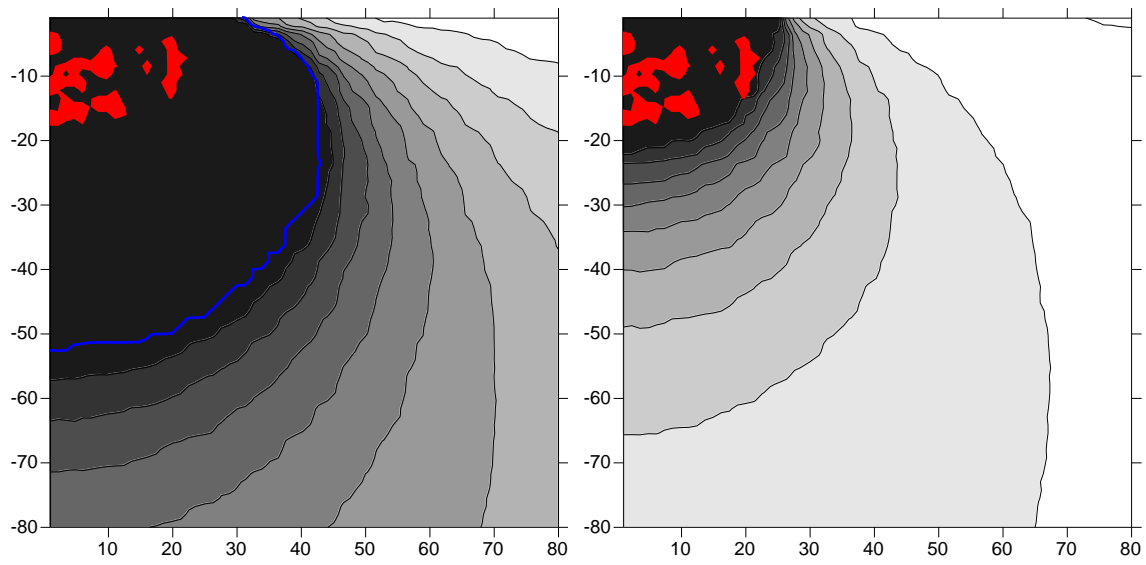
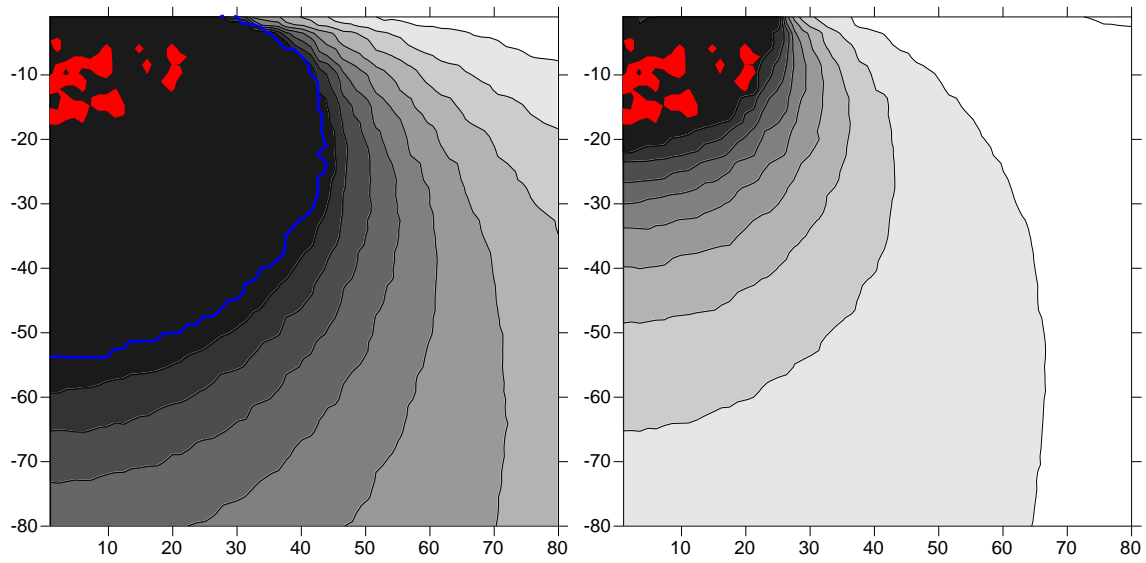
$M^* = 0,400$  $M^* = 0,355$ 

Figura 4.36 –Continuação

$$M^* = 0,270$$

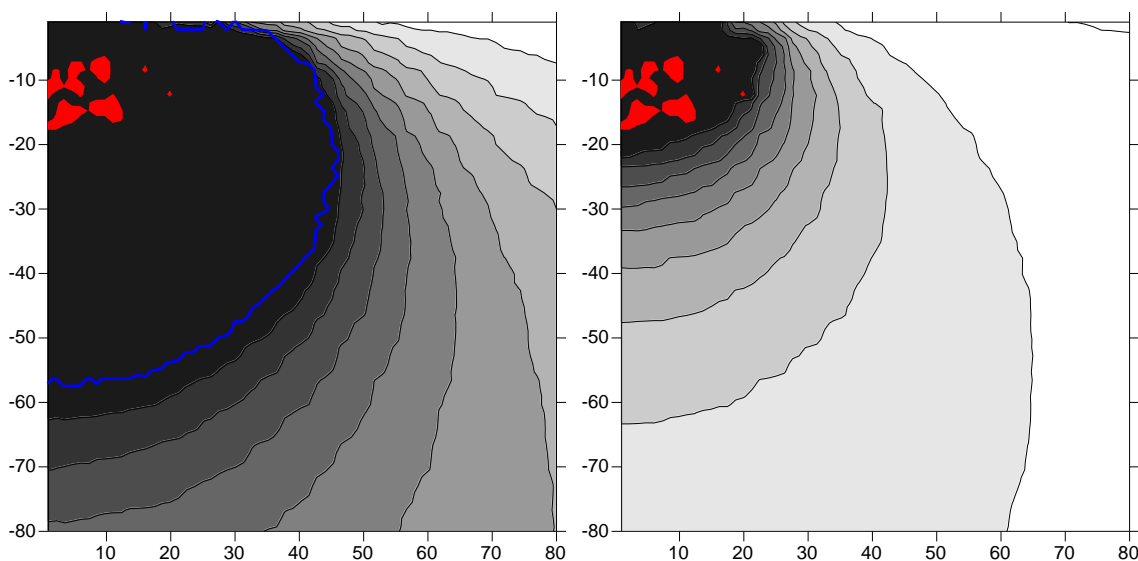


Figura 4.36 –Continuação

A Figura 4.37 apresenta a curva de evolução no tempo da massa de líquido na forma adimensional. A linha vermelha representa o resultado da simulação com a gota sem filme, a linha verde representa o resultado com filme e em amarelo a curva da taxa de evaporação do filme. A curva do resultado experimental esta na cor preta. Conforme descrito no item 3.3.1, há uma imprecisão na aquisição de dados pela técnica NMR, onde nem toda a massa de líquido da gota é detectada. Por isso, pode haver um desvio na curva do resultado experimental. No caso base esse desvio foi apurado e representado pela linha tracejada. Como esse desvio não foi mensurado para o presente caso, a avaliação quantitativa deve ser feita com certo cuidado, pois o resultado real pode mostrar uma curva com o período de secagem maior.

Apesar dos desvios em relação aos dados experimentais obtidos para a distribuição de líquido no interior do meio poroso, os modelos de escala de poros com e sem a presença de filme predizem razoavelmente bem a evolução da massa de líquido remanescente no meio poroso. Entretanto, é possível notar que o modelo sem inclusão de filme apresenta um resultado bem mais próximo aos dados experimentais.

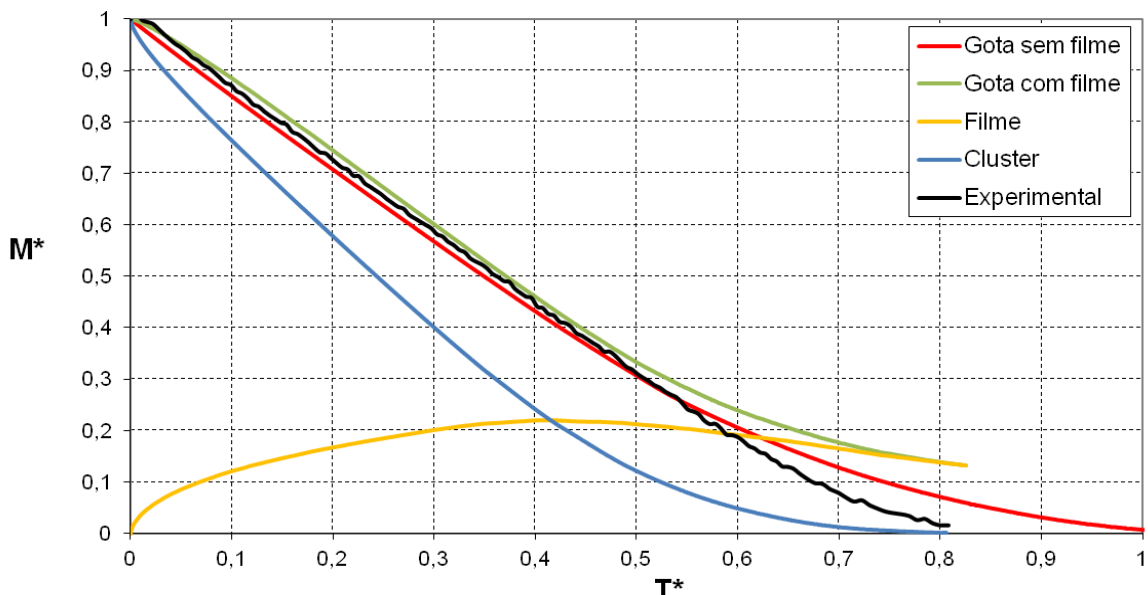


Figura 4.37 – Concentração adimensional de massa de líquido no tempo adimensional para o caso da gota de DEM em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $120\mu\text{m}$. (Linha vermelha concentração de líquido da simulação da gota sem o filme, linha verde concentração de líquido da simulação da gota com o filme, linha amarela concentração de líquido do filme da simulação da gota com o filme, linha azul concentração de líquido do cluster da simulação da gota com o filme, linha preta concentração de líquido do resultado experimental e linha preta tracejada desvio do valor da concentração de líquido do resultado experimental, REIS *et al.*, 2006).

Durante o período até $T^* = 0,4$ nota-se que a curva vermelha está um pouco abaixo da curva experimental e a curva do caso com filme um pouco acima, mas as três curvas apresentam o mesmo comportamento. Mostram que a massa de líquido decresce na mesma taxa, o que pode ser comprovado via comportamento das curvas das taxas de evaporação da Figura 4.38. Nesse mesmo instante, observa-se que a massa de líquido do filme atinge seu valor máximo. A partir de $T^* = 0,45$ as curvas dos resultados numéricos começam a mudar a direção com uma perda de líquido mais suave. A curva experimental prossegue em um decaimento linear até aproximadamente $T^* = 0,6$ onde se torna um pouco menos linear. Em $T^* = 0,6$, as curvas vermelha e verde começam a apresentar um comportamento mais distinto. O caso da gota com filme passa a ter uma redução mais suave, logo, uma taxa de evaporação menor. Esse momento, conforme descrito anteriormente, é quando o filme descola da superfície, logo, a taxa de evaporação do filme, que estava em seu valor máximo, passa a diminuir e com isso, a gota tem uma redução de líquido pequena. A gota do caso experimental evapora totalmente em $T^* = 0,8$. Nesse instante ainda há

aproximadamente 5% da massa inicial no resultado da simulação do caso da gota sem filme e 13% para o caso da gota com filme.

Os gráficos das taxas de evaporação na forma adimensional estão na Figura 4.38. Pelo comportamento da curva preta (valor filtrado), percebe-se que durante a maior parte do processo a taxa de evaporação mantém-se constante e a partir de $T^* = 0,6$, inicia uma suave queda. As curvas tanto do caso da gota com filme quanto sem filme apresentam um comportamento semelhante, mantendo-se constantes até $T^* = 0,4$. Quantitativamente ambas as curvas são equivalentes entre si, mas com um pequeno desvio em relação a curva preta.

De maneira geral, as taxas de evaporação previstas pelo modelo são razoavelmente similares aos dados experimentais, porém incluindo um CRP de menor duração, analogamente aos resultados das seções anteriores. Os resultados do modelo sem filme parecem estar mais próximos aos dados experimentais.

É interessante notar que a taxa de evaporação do modelo com filme cresce nos instantes iniciais (até $T^*=0,1$) e depois mantém-se aproximadamente constante. Este comportamento está, provavelmente, relacionado ao crescimento inicial da região ocupada pelo filme que amplia a superfície de evaporação no interior do meio poroso.

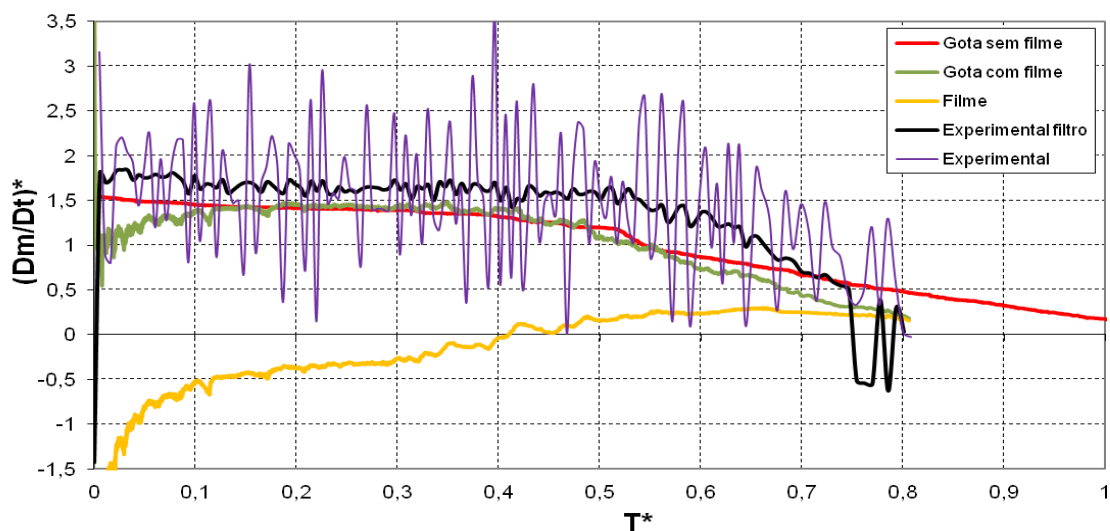


Figura 4.38 – Taxa de evaporação adimensional no tempo adimensional para o caso da gota de DEM em meio poroso de esferas de vidro com diâmetro de $120\mu\text{m}$. (Linha vermelha taxa de evaporação da simulação da gota sem o filme, linha verde taxa de evaporação da simulação da gota com o filme, linha amarela taxa de evaporação do filme da simulação da gota com o filme, linha roxa taxa de evaporação do resultado experimental e linha preta filtro da tendência da Lina roxa, REIS *et al.*, 2006).

5 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

O presente estudo apresentou um modelo computacional baseado no modelo de escala de poros desenvolvido para simular a evaporação de gotas em meios porosos. O transporte de líquido dominado pelas forças capilares é implementado no modelo com base na metodologia da teoria de percolação apresentada por Prat (1993). Os efeitos gravitacionais e viscosos foram considerados e implementados, assim como, a presença do filme de líquido e as distribuições de probabilidade uniforme e exponencial.

Com o objetivo de analisar a precisão do modelo, foram simuladas quatro diferentes configurações baseadas nos experimentos de Reis *et al.* (2003) e Reis *et al.* (2006). Para avaliar o efeito das propriedades dos meios porosos sobre a dinâmica do processo e a capacidade de predição do modelo, as três primeiras configurações consistem na evaporação de uma gota de água absorvida por três diferentes meios porosos: esferas de vidros com diâmetro de 400 μm , esferas de vidro com diâmetro de 120 μm e areia com partículas com diâmetro médio de 180 μm . A quarta configuração foi usada para investigar a influência de diferentes líquidos, na qual é simulada a evaporação de uma gota de dietil malonato (DEM) em um meio poroso composto por esferas de vidro com diâmetro de 120 μm .

Para as configurações estudadas, os efeitos gravitacionais e viscosos foram incluídos no modelo, mas os resultados apontaram que tais fenômenos apresentam pequena influência no comportamento dos padrões de secagem, não resultando em diferenças significativas na dinâmica do processo. Dessa forma, sugere-se que as forças gravitacionais e viscosas podem ser negligenciadas para esta classe de aplicações.

Os resultados do modelo sem a inclusão do filme mostraram que nas configurações de meio poroso composto por esferas de vidro, para ambos os líquidos estudados, tanto a taxa de evaporação quanto a distribuição de fase foram significativamente melhores do que o modelo com filme em comparação com os dados experimentais. Destaca-se a configuração da gota de água em um meio poroso de esferas de vidro com partículas de diâmetro 120 μm onde o modelo (sem o filme) obteve os resultados mais precisos. Os resultados do modelo computacional com a inclusão do filme de líquido para o caso do meio poroso composto

por partículas de areia são bons em relação à distribuição de fase. O modelo foi capaz de demonstrar a migração de líquido para o filme tanto na região central quanto na região mais profunda. Além disso, a variação do formato do perfil de concentração ao longo do período de secagem ocorreu de acordo com o experimental.

De maneira geral, o modelo de escala de poros sem a inclusão de filmes apresentou melhores resultados quando comparado com o modelo com a inclusão de filme de líquido em todas as simulações, exceto para a configuração com meio poroso de areia, na qual o modelo com a inclusão de filmes apresentou melhor desempenho qualitativo. Uma das razões possíveis é que, fisicamente, a presença do filme não seja significativa nos casos com meio poroso composto por esferas de vidro. Apesar do melhor desempenho do modelo sem filme, é importante notar que a inclusão do filme no modelo de escala de poros amplia a capacidade do modelo de prever o transporte capilar de líquido para regiões que não estavam inicialmente ocupadas por líquido. A inclusão do filme parece superestimar o transporte de líquido para as regiões mais profundas do meio poroso, em todas as simulações. Uma análise do parâmetro empírico β com a distribuição de tamanhos de poros e ligações pode melhorar o desempenho do modelo.

As características do meio poroso, principalmente a distribuição do tamanho dos poros e das ligações tem grande influência no comportamento das taxas de evaporação como pôde ser visto nos resultados apresentados no caso base. Os resultados obtidos com o uso da distribuição exponencial são consideravelmente melhores do que os resultados obtidos com a distribuição uniforme. O uso da distribuição de probabilidade exponencial parece ser mais recomendável, visto que é possível ajustar empiricamente o parâmetro λ para melhor reproduzir as características do meio poroso, tanto para a distribuição inicial das concentrações de líquido (ajuste da distribuição do tamanho de poros) quanto para representar as características do transporte de vapor e líquido no interior do meio poroso (ajuste da distribuição do tamanho de poros).

Como sugestões para trabalhos futuros, recomenda-se uma melhor investigação na determinação dos parâmetros que caracterizam o meio poroso. Uma análise mais detalhada

relacionada à influência das diferentes distribuições de probabilidade dos diâmetros dos poros e tamanho das ligações torna-se necessária.

Outro assunto importante que deve ser investigado é a determinação do formato inicial da gota. A geometria deve ser bem definida, mostrando a quantidade correta de líquido exposto na superfície superior, bem como as irregularidades de todo o contorno da gota. Estes parâmetros influenciam tanto na taxa de evaporação quanto na evolução do perfil de concentração de líquido. O formato inicial da gota no modelo computacional deve seguir em detalhes as geometrias experimentais para obter melhor precisão nos resultados.

Adicionalmente, uma vez que a matriz porosa é randomicamente distribuída em cada simulação, seria interessante explorar o efeito da média de diversas repetições de cada simulação para extrair conclusões sobre a dinâmica do processo.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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.

BEAR, J., **Dynamics of fluids in porous media**, 1st ed. American Elsevier Publishing Company, 1972.

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.

CHAUVET, F., CAZIN, S., DURU. P., PRAT. M., Use of infrared thermography for the study of evaporation in a square capillary tube. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 53, p. 1808-1818, 2010b.

CHAUVET, F., DURU. P., GEOFFROY, S., PRAT. M., Three periods of drying of a single square capillary tube. **Phys. Rev. Lett.**, v. 103, 124502, 2009.

CHAUVET, F., DURU. P., PRAT. M., Depinning of evaporating liquid films in square capillary tubes: Influence of corners' roundedness. **Physics of Fluid**, v. 22, 112113, 2010a.

CHEN, Y.; WEISLOGEL, M.M.; NARDIN, C.L. Capillary-driven flows along rounded interior corners. **J. Fluid Mech.** vol. 566, p. 235–271, 2006.

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. The evaporation of a thickened agent simulants from wet and dry sand. **U.S. Army Aberdeen Proving Ground**, Report No. CRDEC-TR-112, 1990.

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. Vapour/liquid hazards associated with persistent liquid droplets on non-porous surfaces. **U.S. Army Aberdeen Proving Ground**, Report No. ARCSL-TR-82092, 1983.

COUSSOT, P. Scaling approach of the convective drying of a porous medium. **Eur. Phys. J. B**15, p.557-566, 2000.

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.

DONG, M.; CHATZIS L. The imbibitions and flow of a wetting liquid along the corners of a square capillary tube. **Journal of colloid and interface science**. v 172, p. 278-288, 1995.

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.

FOX, R.W.; PRITCHARD, P.J.; MCDONALD, A.T. **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. 7th ed. Rio de Janeiro: LTC, 2010.

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.

LINDQUIST, W. B., VENKATARANGAN, A., Investigating 3D geometry of porous media from high resolution images. **Physics and Chemistry of the Earth, Part A: Solid Earth and Geodesy**, V. 24, Is. 7, pp. 593-599, 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.

MARKICEVIC, B., LI, Y., ZAND, A. R., SANDERS. M., NAVAZ. H. K., Infiltration time and imprint shape of a sessile droplet imbibing porous medium. **J. Colloid Interface Sci**, v. 336, p. 698-706, 2009.

MARKICEVIC, B., NAVAZ. H. K., Numerical solution of wetting fluid spread into porous media. **Int. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow**, v. 19, p. 521, 2009.

MARKICEVIC, B., NAVAZ. H. K., The influence of capillary flow on the fate of evaporating wetted imprint of the sessile droplet in porous medium. **Physics of fluids**, v. 22, 122103, 2010.

MATTHEWS, G.P., MOSS, A. K, RIDGWAY, C. J. , The effect of correlated networks on mercury intrusion simulations and permeabilities of sandstone and other porous media. **Powder Technology**, V. 83, Is. 1, p. 61-77, 1995.

METZGER, T, TSOTSAS, E. Viscous stabilization of drying front: Three-dimensional pore network simulations. **Chemical engineering research and design**. v 86, p.739–744, 2008.

METZGER, T.; TSOTSAS. E; PRAT, M. **Pore-network Models: A Powerful Tool to Study Drying at the Pore Level and Understand the Influence of Structure on Drying Kinetics**, in Modern Drying Technology. Vol 1 (eds Tsotsas E.; Mujumdar, A.S). WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. Germany, 2007.

METZGER, T.; TSOTSAS, E.; Viscous stabilization of drying front: Three-dimensional pore network simulation. **Chemical Engineering Research Design**. V.86, p.739-744, 2008.

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.

NOWICKI, S.C.; DAVIS, H.T.; SCRIVEN, L.E. Microscopic determination of transport parameters in drying porous media, **Drying Technology**. v.10 (4), p. 925–946, 1992.

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.

PLOURDE, F.; PRAT, M. Pore network simulations of drying of capillary media. Influence of thermal gradients. **International Journal of Heat and Mass Transfer** v 46, p. 1293–1307, 2003.

PRACHAYAWARAKORN, S.; PRAKOTMAK, P.; SOPONRONNARIT, S. Effects of pore size distribution and pore-architecture assembly on drying characteristics of pore networks. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v 51, p. 344–352, 2008.

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.

PRAT, M. On the influence of pore shape, contact angle and film flows on drying of capillary porous. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 50, p. 1455-1468, 2007.

PRAT, M. Pore Network Models of Drying, Contact Angle, and Film Flows. **Chem. Eng. Technol.**, No. 7, p. 1029–1038, 2011

RANSOHOFF, T.C.; RADKE, C.J. Laminar Flow of a Wetting Liquid along the Corners of a Predominantly Gas-Occupied Noncircular Pore. **Journal of Colloid and Interface Science**. Vol. 121, No. 2, p. 392-401, 1988.

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

REIS, N. C. Jr.; 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. 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.; 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. The evaporation of neat/thickened agent simulant droplets from porous surfaces. **Final report on agreement**, n. 2044/013/CDBE, UMIST, 1996.

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

RUGGIERO, M.A.G.; LOPES, V.L.R, Cálculo numérico, aspectos teóricos e computacionais. 2ª Edição, Makron Books do Brasil, 1997.

SARTIM, R. **Simulação numérica tridimensional da evaporação de gotas em meios porosos usando um modelo de escala de poros.** 2007. 139f. Dissertação (Mestrado em Ciências Ambientais) – Departamento de Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2007.

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.

SHAERI,M.R.; BEYHAGHI, S, PILLAI, K.M. On applying an external-flow driven mass transfer boundary condition to simulate drying from a pore-network model. **International Journal of Heat and Mass Transfer.** v 57, p. 331–344, 2013.

SHAW, T. M. Drying as an immiscible displacement process with fluid counterflow. **Phys. Rev. Lett.** v 59, p.1671–1674, 1987.

SURASANI, V.K.; METZGER,T.; TSOTSAS, E. Drying Simulations of Various 3D Pore Structures by a Nonisothermal Pore Network Model. **Drying Technology**, vol. 28, no. 5, p. 615-623, 2010.

TSIMPANOIANNIS, I. N., YORTSOS, Y. C., POULOU, S., KANELLOPOULOS, N., STUBOS, A. K., Scaling theory of drying in porous media, **Phys. Rev. E** 59, pp. 4353, 1999.

WEISLOGEL, M.M.; LICHTER, S. Capillary flow in an interior corner. **J. Fluid Mech.** vol. 373,p. 349-378,1998.

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.

WHITAKER, S. **Coupled Transport in Multiphase Systems: A Theory of Drying**, Advances in Heat Transfer, Vol. 31, New York: Academic Press, p. 1–103, 1998.

WHITAKER, S. **Simultaneous Heat, Mass and Momentum Transfer in Porous Media: A Theory of Drying.** Advances in Heat Transfer, Vol. 13, New York: Academic Press, p. 119–203, 1977.

WUA, R.; CUI, GM.; CHEN, R. Pore network study of slow evaporation in hydrophobic porous media. **International Journal of Heat and Mass Transfer.** v 68, p. 310–323, 2014.

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.; YORTSOS, 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.; YORTSOS, 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.; YORTSOS, Y. C. Pore-network study of the characteristics periods in the drying of porous materials. **Journal of Colloid and Interface Science**, v.297, p. 738-748, 2006.

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

YIOTIS, A.G.; SALIN D. Analytical solutions of drying in porous media for gravity-stabilized fronts. **Physical Review**. E 85, 046308, 2012.

YIOTIS, A.G.; SALIN, D.; TAJER, E.S.; YORTSOS, Y.C. Drying in porous media with gravity-stabilized fronts: Experimental results. **Physical Review**. E 00, 006300, 2012.

YIOTIS, A.G.; STUBOS, A.K.; BOUDOUVIS, A.G.; TSIMPANOIANNIS, I.N.; YORTSOS, Y.C.; Pore-Network Modeling of Isothermal Drying in Porous Media. **Transp Porous Med**. V 58, p.63–86, 2005.

ZHOU, D.; BLUNT, M.; ORR JR, F.M. Hydrocarbon Drainage along Corners of Noncircular Capillaries. **Journal of Colloid and Interface Science**. v 187, p. 11–21, 1997.