

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

ESTUDO DOS PROCESSOS DE FIXAÇÃO E TRANSFERÊNCIA ISOTÉRMICA DE
UMIDADE EM MEIOS POROSOS HETEROGÊNEOS

TESE SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM ENGENHARIA MECÂNICA

HENOR ARTUR DE SOUZA

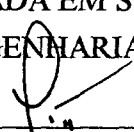
Florianópolis, setembro de 1993

UTILIZAÇÃO DA TEORIA DA PERCOLAÇÃO PARA O ESTUDO DOS PROCESSOS DE
FIXAÇÃO E TRANSFERÊNCIA ISOTÉRMICA DE UMIDADE EM MEIOS POROSOS

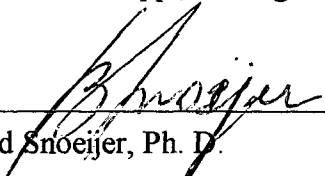
HENOR ARTUR DE SOUZA

ESTA TESE FOI JULGADA PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
DOUTOR EM ENGENHARIA

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA E APROVADA EM SUA FORMA FINAL
PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

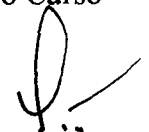


Prof. Paulo César Philippi, Dr. Ing.
Orientador



Prof. Berend Snoeijer, Ph. D.
Coordenador do Curso

BANCA EXAMINADORA:



Prof. Paulo César Philippi, Dr. Ing.
Presidente



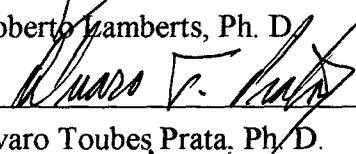
Prof. Marc Prat, Docteur ès-Sciences Physiques.



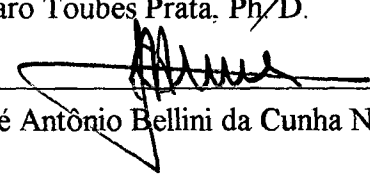
Prof. Carlos Roberto Appoloni, Dr.



Prof. Roberto Lamberts, Ph. D.



Prof. Álvaro Toubes Prata, Ph. D.



Prof. José Antônio Bellini da Cunha Neto, Dr.

a meus pais,

pela formação, apoio e carinho.

e a Joel Albino,

pela amizade, apoio e presença.

AGRADECIMENTOS

- Ao Professor Paulo César Philippi pela competência na orientação deste trabalho e, também, pelo apoio e amizade, tornando este período de convívio extremamente agradável.

- Ao Professor Jean François Daian pelas valiosas discussões que muito contribuíram para este trabalho e pela consideração e simpatia.

- Ao Fábio Santana Magnani, pela colaboração na estruturação do programa computacional relacionado ao estudo em redes de percolação, pelo apoio e convivência.

- Aos colegas Éderson Massayuki Kuriki e Gustavo de Oliveira Rhode, pela colaboração na parte computacional, principalmente no aprendizado da linguagem C e pela convivência.

- Aos colegas Diego Luiz Rauber, Paulo Afonso Leal Narciso Filho e Ricardo Veríssimo Chiozzini de Souza, pela colaboração com os desenhos em CAD e a todos os colegas do LMPT/EMC/UFSC (período 1990/1993), pelo apoio e convivência.

- Aos colegas Almir de Oliveira e Carlos Alberto Langer, pela colaboração e apoio.

- À Lígia Silva Damasceno Ferreira, Celso Peres Fernandes, Gilmar Guimarães, Luiz Mauro Moura, Pablo Yunes e Ramon Molina Vale, pela torcida, pela convivência amiga que me proporcionaram e pela imprescindível amizade.

- A todos os amigos, próximos ou não, pelo apoio e colaboração.

- À CAPES, pelo apoio financeiro.

SUMÁRIO

	p.
SIMBOLOGIA	XV
LISTA DE FIGURAS	XXI
LISTA DE TABELAS	XXXI
RESUMO	XXXIII
ABSTRACT	XXXV
1 - Introdução	001
1.1 - Colocação do problema	001
1.2 - Revisão bibliográfica	005
1.2.1 - Modelagem da condutividade hidráulica	005
1.2.2 - Distribuição de umidade em materiais porosos	025
1.2.3 - Modelagem da difusividade mássica	035
2 - Fundamentos - Teoria da percolação	047
2.1 - Introdução	047
2.2 - Definição e histórico	048
2.3 - Terminologia	050
2.4 - Probabilidade crítica	054
2.5 - Leis de escala para sistemas infinitos e expoentes críticos	066
2.5.1 - Lei de escala para $S(p)$	068
2.5.2 - Lei de escala para $P(p)$	068
2.5.3 - Lei de escala para $\xi(p)$	069
2.6 - Algoritmo para obtenção do agrupamento percolante	070
2.7 - Estudo estatístico das redes	076
3 - Obtenção do modelo	083

3.1 - Introdução	083
3.2 - Distribuição total em volume de poros	084
3.3 - Concepção do modelo	089
3.4 - Concepção da rede para poros com $1000\text{Å} \leq D \leq 10000\text{Å}$	098
3.4.1 - Geração da rede	100
3.4.2 - Frequência em número	103
3.5 - Modelo de Maxwell-De Vries para poros com $D > 10000\text{Å}$	105
3.6 - Modelo para as fissuras	106
4 - Processos de invasão	109
4.1 - Introdução	109
4.2 - Embebição/adsorção/umidificação e drenagem/dessorção/desumidificação	110
4.3 - Invasão por um fluido molhante na rede de sítios	112
4.4 - Invasão por um fluido não molhante na rede de sítios	116
4.5 - Estudo estatístico da rede no processo de drenagem	120
4.6 - Comparação entre os resultados	125
4.7 - A curva de injeção de mercúrio	126
5 - Simulação da condutividade hidráulica	135
5.1 - Introdução	135
5.2 - Transferência isotérmica de massa em meios porosos	136
5.2.1 - Volume elementar representativo e o equilíbrio local	136
5.2.2 - Transferência de líquido e vapor dentro de cada fase	138
5.2.3 - Os diferentes coeficientes de transferência macroscópicos	144
5.3 - Simulação do processo de transferência isotérmica de umidade sobre uma rede representativa do meio poroso	147
5.3.1 - Princípio da simulação	147
5.3.2 - Os coeficientes elementares	149
5.3.3 - Esquema numérico - analogia com uma rede de resistências elétricas	153

5.4 - Modelo de Maxwell-De Vries	162
5.4.1 - Justificativa do modelo	162
5.4.2 - Definição do modelo	162
5.4.3 - Equações resultantes do modelo	165
5.5 - Métodos de solução para o sistema de equações	168
5.6 - Resultados	172
5.7 - Conclusões	184
6 - Simulação da difusividade mássica	187
6.1 - Introdução	187
6.2 - Modelo de fissuração utilizado	191
6.2.1 - Modelo físico	191
6.2.2 - Estimativa da condutividade das fissuras	192
6.2.3 - Equações governantes	198
6.3 - Esquema numérico	203
6.3.1 - O domínio de cálculo	203
6.3.2 - Discretização espacial	204
6.3.3 - Balanço local	205
6.3.4 - As condutividade internodais	208
6.3.5 - As curvas características	209
6.4 - Metodologia de cálculo	209
6.4.1 - Metodologia usada	209
6.4.2 - Os casos estudados	212
6.5 - Resultados. Comparação com os dados experimentais	213
7 - Conclusão	233
8 - Referências bibliográficas	237

SIMBOLOGIA

a	- constante relativa à polarizabilidade da água, (m).
d	- diâmetro do tubo capilar, (m).
D	- diâmetro do poro, (m).
D_f	- dimensão fractal.
D_h	- coeficiente de difusão global associado ao gradiente de umidade relativa, (m^2/s).
D_{hl}	- coeficiente de migração de líquido associado ao gradiente de umidade relativa, (m^2/s).
D_{hv}	- coeficiente de difusão de vapor associado ao gradiente de umidade relativa, (m^2/s).
D_o	- coeficiente de difusão do vapor d'água no ar, (m^2/s).
D_r	- coeficiente de difusão mista, (m^2/s).
D_θ	- coeficiente de difusão global associado ao gradiente de pressão, (m^2/s).
e_a	- espessura da camada adsorvida, (m).
$f(r)$	- função distribuição de raios de poros.
g	- aceleração da gravidade, (m/s^2).
h	- umidade relativa, (%).
J	- fluxo de massa na escala macroscópica, ($kg/m^2 \cdot s$).
j_l	- fluxo de massa da fase líquida na escala microscópica, ($kg/m^2 \cdot s$).
J_l	- fluxo de massa da fase líquida na escala macroscópica, ($kg/m^2 \cdot s$).
j_v	- fluxo de massa da fase gasosa na escala microscópica, ($kg/m^2 \cdot s$).
J_v	- fluxo de massa da fase gasosa na escala macroscópica, ($kg/m^2 \cdot s$).
k	- permeabilidade do meio poroso, (m^2).
k_a	- condutância equivalente de um sítio a , (m.s).
k_b	- condutância equivalente de um sítio b , (m.s).

XVI

- k_{ab} - condutância equivalente de um ramo da rede, (m.s).
- k_i - condutância de cada elemento da rede, (m.s).
- K - condutividade hidráulica, (m/s).
- K_e - condutividade hidráulica na interface dos volumes de controle, (m/s).
- K_{eo} - condutividade hidráulica equivalente para um dado comprimento de fissura, (m/s).
- K_{eao} - condutividade hidráulica equivalente do constituinte principal, modelo Maxwell-De Vries, (m/s).
- K_{eai} - condutividade hidráulica equivalente dos constituintes adicionais, modelo Maxwell - De Vries, (m/s).
- K_f - condutividade hidráulica na fissura, (m/s).
- K_l - condutividade hidráulica da fase líquida, (m/s).
- k_{lc} - condutância de um elemento cilíndrico ocupado pela fase molhante, (m.s).
- k_{le} - condutância de um elemento esférico ocupado pela fase molhante, (m.s).
- k_{vc} - condutância de um elemento cilíndrico ocupado pela fase não molhante, (m.s).
- k_{ve} - condutância de um elemento esférico ocupado pela fase não molhante, (m.s).
- K_v - condutividade hidráulica da fase vapor, (m/s).
- m - fluxo de massa, (kg/s).
- m_{ab} - fluxo de massa entre dois sítios a e b , (kg/s).
- m_l -fluxo de líquido, (kg/s).
- m_v -fluxo de vapor, (kg/s).
- M - peso molecular da água, (kg/kgmol).
- n_i - frequência em número da cada classe de diâmetros de poro.
- p - pressão (N/m²).
- p_a - diferença de pressão no sítio a , (N/m²).

p_b	- diferença de pressão no sítio b , (N/m ²).
p_c	- pressão capilar, (N/m ²).
p_e	- pressão na face de entrada da rede de sítios, (N/m ²).
p_g	- pressão do vapor, (N/m ²).
p_l	- pressão do líquido, (N/m ²).
p_s	- pressão na face da saída da rede de sítios, (N/m ²).
q	- fluxo volumétrico de líquido, (m/s).
r	- raio do menisco no tubo capilar, (m).
\mathfrak{R}	- constante universal dos gases, (J/kgmol.K).
t	- tempo, (s).
T	- temperatura, (K).
$V_n(D)$	- fração em volume de poros com diâmetros menores ou iguais a D .
$V_s(D)$	- volume aparente de sólido da amostra de argamassa, (m ³).
w	- profundidade, (m).
$X(t)$	- posição do menisco na fissura, (m).
x'	- coordenada referencial na escala microscópica.
x	- coordenada referencial na escala macroscópica.
Z	- número de coordenação nas redes de sítios.

Teoria da percolação

$g(r,p)$	- função conectividade.
g_{st}	- número de configurações de um agrupamento de s sítios com t sítios vizinhos não ativos.
k	- é a classe do sítio e denota o menor sítio invadido em qualquer etapa do processo de invasão da rede de sítios.
M_{k_i}	- número de sítios da classe j invadidos.

XVIII

- $n_s(p)$ - proporção de agrupamentos constituídos de s sítios ativos.
- N - número de classes de sítios presentes na rede.
- N_j - número total de sítios caracterizados pelo tamanho j .
- p - probabilidade de um sítio ser ativo.
- p_c - probabilidade crítica.
- p_k - probabilidade de sítios de tamanho $j \leq k$ estarem presentes.
- $P(p)$ - probabilidade de que um sítio arbitrário esteja ativo e pertença a um agrupamento infinito de sítios ativos conectados entre si.
- s - tamanho do agrupamento de sítios ativos.
- $S(p)$ - tamanho médio dos agrupamentos de sítios ativos.
- $w_s(p)$ - proporção de elementos contidos em agrupamentos com s sítios ativos em relação ao número total de sítios ativos.
- Y_k - função acessibilidade para os sítios da classe k .
- Y_{ki} - proporção de sítios da classe j invadidos.
- Z - número de coordenação da rede.
- ξ - comprimento de correlação de agrupamentos de sítios ativos.
- ν, σ - expoentes críticos.
- τ, β, γ - expoentes críticos.

Letras gregas

- μ - viscosidade da água, (kg/m.s).
- μ_0 - viscosidade da água livre, (kg/m.s).
- θ - ângulo de contato, (graus).
- θ - grau de saturação ou conteúdo volumétrico da água, (m^3/m^3)
- ψ - potencial de sucção, (m).
- ν - viscosidade cinemática da água, (m^2/s)

ϕ_i	- potencial químico da água capilar, (N/m ²).
ε	- porosidade do material poroso.
ε_o	- potencial de interação na superfície, (J/kgmol).
ρ_l	- massa específica do líquido, (kg/m ³).
ρ_v	- massa específica do vapor, (kg/m ³).
ρ_{vs}	- massa específica do vapor saturado, (kg/m ³).
τ	- tortuosidade.
σ	- tensão interfacial, (N/m ²).
λ	- livre percurso médio das moléculas de vapor d'água no ar, (Å).
δ	- espessura da fissura, (m).
η	- transformada de Boltzmann, (m.s ^{-1/2})
$\Delta\eta_i$	- proporção de macroporos, (m ³ /m ³).
$\Delta\eta_o$	- proporção de cinzas, (m ³ /m ³).
Δx_i	- comprimento dos volumes de controle em x, (m).
Δy_i	- comprimento dos volumes de controle em y, (m).

LISTA DE FIGURAS

	p.
Figura 1.1 - Ascensão de um líquido em um tubo devido ao efeito de capilaridade	003
Figura 1.2 - Representação esquemática de uma seção. Cada uma das faces exibe uma distribuição de vários tamanhos de poros. Os poros estão representados com círculos na seção transversal.	006
Figura 1.3 - Redes bidimensionais de percolação, Fatt [7] (a) rede quadrada ($Z=6$), (b) rede hexagonal ($Z=4$) (c) rede hexagonal dupla ($Z=7$), (d) rede hexagonal tripla ($z=10$)	008
Figura 1.4 - (a) Distribuição de raios de tubo, (b) Características de permeabilidade relativa de uma rede tipo Figura 1.3 (d), com distribuição dada em (a), [8].	011
Figura 1.5 - Representação esquemática de um elemento unitário, Payatakes, Tien e Turian [11].	011
Figura 1.6 - Redes bidimensionais, Chatzis e Dullien [12]	012
Figura 1.7 - (a) Funções densidades dos diâmetros das ligações e dos sítios. (b) Funções densidades baseadas no volume, Chatzis e Dullien [13]	013
Figura 1.8 - Evolução da permeabilidade relativa ao mercúrio de arenitos, Chatzis e Dullien [13]	014
Figura 1.9 - Evolução da permeabilidade relativa ao óleo de uma areia, Chatzis e Dullien [13]	015
Figura 1.10 - Tipos de escoamento, Lenormand [21]	016

Figura 1.11	- (a) Comparação entre as curvas de permeabilidade relativas do fluido deslocado, k_{rd} , do fluido injetado, k_{ri} , e as curvas experimentais obtidas para o sistema ciclohexano-água, (b) Comparação das curvas de permeabilidade relativas da fase molhante, k_{rw} , e do óleo, k_{ro} , Singhal e Somerton [17]	018
Figura 1.12	- Geometria de um poro esférico, [22]	020
Figura 1.13	- Distribuição de volume de poros adotada por Saliba, [29]	023
Figura 1.14	- A condutividade em função do processo simulado (configuração LNDC, [29])	024
Figura 1.15	- A condutividade em função do processo simulado (configuração LDC, [29])	025
Figura 1.16	- Características da pressão capilar de uma rede triplo-hexagonal usando a distribuição da Figura 1.3 (b), [7]	026
Figura 1.17	- Características de pressão capilar para várias redes usando a distribuição da Figura 1.3 (b), [7]	027
Figura 1.18	- Curvas de pressão capilar mostrando o efeito da distribuição de tamanho de poros, [10]	028
Figura 1.19	- Curvas de pressão capilar mostrando o efeito de número de coordenação. (a) distribuição tipo 2, (b) distribuição tipo 1, [10].	029
Figura 1.20	- Comapração da curva de pressão capilar com a curva experimental de um arenito-Berea, [12]. (a) para $S_j \propto D_j^3$, (b) para $S_j \propto D_j$.	030
Figura 1.21	- Curvas de pressão capilar, [17]	031
Figura 1.22	- Resultados experimentais da injeção de mercúrio dentro dos micromodelos, [21]	032
Figura 1.23	- Curva de pressão capilar. A pressão é deduzida do nível de fluido molhante e a saturação é medida pelo molhamento contínuo, [38]	033
Figura 1.24	- Situação do menisco num tubo fde seção retangular quando p_c é a pressão limite $p_n = 2\sigma(1/x+1/y)$, [38]	034

Figura 1.25	- Curva de pressão capilar. Injeção de mercúrio dentro dos micromodelos de diferentes tamanhos. Comparação entre resultados teóricos e experimentais, [21].	035
Figura 1.26	- Elementos convergentes-divergentes constituindo uma rede, [34]	036
Figura 1.27	- Efeito da escolha aleatória sobre os coeficientes de transferência . (a) dessorção - configuração LNDC, (b) sorção - configuração LDC, [29]	036
Figura 1.28	- Efeito do tamanho da rede sobre o coeficiente de transferência em dessorção à 45°C, [29]	038
Figura 1.29	- O coeficiente de transferência em função do processo simulado (configuração LNDC), [29].	038
Figura 1.30	- Influência da difusão de vapor - configuração LNDC. (a) dessorção, (b) sorção, [29]	039
Figura 1.31	- Separação da difusão gasosa e transferência capilar (configuração LNDC, [29]).	041
Figura 1.32	- Coeficientes de transferência, [29]. (a) experimental em embebição e calculado em sorção; difusividades mássicas calculadas por balanço de massa sobre perfis médios (densidade A, Figura 1.33) (b) em embebição e (c) em drenagem	042
Figura 1.33	- Esquema do meio com fissuras usado por Saliba, [29]	044
Figura 1.34	- Coeficiente de transferência experimental e calculado em drenagem. Efeito da distribuição de volume de poros truncada, [29].	045
Figura 2.1	- Mistura de grãos condutores e não-condutores.	049
Figura 2.2	- Exemplos de redes de percolação.	051
Figura 2.3	- Configuração típica de um processo de percolação (a) de ligações (b) de sítios.	052
Figura 2.4	- Percolação de sítios sobre uma rede quadrada (a) $p < p_c$ (b) $p = p_c$ (c) $p > p_c$	055

Figura 2.5	- Parâmetro de ordem.	059
Figura 2.6	- Exemplo de agrupamentos de sítios ativos em uma rede 1-D.	060
Figura 2.7	- O tamanho de um agrupamento em uma rede 1-D.	063
Figura 2.8	- Função conectividade numa rede 1-D.	064
Figura 2.9	- (a) Rotina de designações dos rótulos para os sítios. (b) Rotina de classificação. Algoritmo extraído de Hoshen e Kopelman, [102].	072
Figura 2.10	- Efeito da escolha aleatória da disposição dos sítios dentro da rede. Rede 2-D.	079
Figura 2.11	- Efeito da escolha aleatória da disposição dos sítios dentro da rede. Rede 3-D.	080
Figura 2.12	- Efeito do tamanho da rede. (a) rede 2-D; (b) rede 3-D.	081
Figura 3.1	- Distribuição em volume dos poros da argamassa de cimento e cal usando as isotermas da adsorção e dados da microscopia eletrônica de varredura, Yunes [39].	085
Figura 3.2	- Lei de escala para a distribuição em volume dos poros da argamassa de cimento e cal. Philippi et alii, [45].	088
Figura 3.3	- Micrografia da argamassa de cimento e cal. Ampliação 50X. Escala 100 μ m. Amostra polida, [39].	093
Figura 3.4	- Micrografia da argamassa de cimento e cal. Ampliação 400X. Escala 10 μ m. Amostra polida, [39].	093
Figura 3.5	- Micrografia da argamassa de cimento e cal. Ampliação 200X. Escala 10 μ m. Fratura, [39].	094
Figura 3.6	- Micrografia da argamassa de cimento e cal. Ampliação 800X. Escala 10 μ m. Amostra polida, [39].	095
Figura 3.7	- Micrografia da argamassa de cimento e cal. Ampliação 3200X. Escala 1 μ m. Amostra polida, [39].	095

Figura 3.8	- Micrografia da argamassa de cimento e cal. Ampliação 6200X. Escala 1 μ m. Amostra polida, [39].	096
Figura 3.9	- Micrografia da argamassa de cimento e cal. Ampliação 12500X. Escala 1 μ m. Amostra polida, [39].	096
Figura 3.10	- Esquema mostrando os modelos representativos do meio poroso, para as três etapas de simulação.	097
Figura 3.11	- Esquema do sistema de referência da rede 3-D.	100
Figura 3.12	- Frequência em número.	104
Figura 3.13	- Modelo físico para a modelagem de microporos e macroporos.	106
Figura 3.14	- Modelo físico para a modelagem da estrutura porosa com fissuras.	107
Figura 4.1	- Deslocamento imiscível de dois fluidos.	109
Figura 4.2	- Esquema de um dispositivo para ensaio dos processos de invasão.	111
Figura 4.3	- Esquema do filme de líquido molhante dentro de um capilar cilíndrico.	113
Figura 4.4	- Esquema da direção do processo de invasão em relação à rede cúbica de sítios. Embebição.	114
Figura 4.5	- Curvas de pressão na embebição.	115
Figura 4.6	- Rede 18 x 18 simulando a frente de molhamento. Etapa de percolação. Os sítios em negrito representam os sítios ocupados pela fase molhante.	116
Figura 4.7	- Esquema da direção do processo de invasão em relação à rede cúbica de sítios. Drenagem.	117
Figura 4.8	- Interface sólido/líquido.	118
Figura 4.9	- Rede 18 x 18 simulando a frente de drenagem. Etapa de percolação. Os sítios em negrito representam os sítios ocupados pela fase não molhante.	119
Figura 4.10	- Curvas de pressão na drenagem.	120
Figura 4.11	- Efeito da escolha aleatória da disposição dos sítios da rede. Processo de drenagem. Rede 2-D.	122

Figura 4.12	- Efeito da escolha aleatória da disposição dos sítios da rede. Processo de drenagem. Rede 3-D.	123
Figura 4.13	- Efeito do tamanho de rede. Processo de drenagem. (a) rede 2-D; (b) rede 3-D.	124
Figura 4.14	- Curvas de pressão na embebição e drenagem.	126
Figura 4.15	- Rede 32X32 simulando a embebição. Etapa anterior à etapa de percolação. Cor azul: sítio cheio; cor verde: sítio possível; cor branca: sítio vazio.	127
Figura 4.16	- Rede 32X32 simulando a embebição. Etapa de percolação. Cor azul: sítio cheio; cor verde: sítio possível; cor branca: sítio vazio.	127
Figura 4.17	- Rede 16X16 simulando a frente de drenagem. Etapa anterior à etapa de percolação. Cor azul: sítio cheio; cor verde: sítio possível; cor branca: sítio vazio e/ou percolante.	128
Figura 4.18	- Rede 16X16 simulando a frente de drenagem. Etapa de percolação. Cor azul: sítio cheio; cor verde: sítio possível; cor branca: sítio vazio e/ou percolante.	128
Figura 4.19	- Rede 16X16 simulando a frente de drenagem. Etapa após a etapa de percolação. Cor azul: sítio cheio; cor verde: sítio possível; cor branca: sítio vazio e/ou percolante.	129
Figura 4.20	- Procedimento da simulação dos processos de invasão numa rede de sítios.	130
Figura 4.21	- Resultados experimentais e da simulação da injeção de mercúrio na rede de sítios. Macroporos desconectados.	131
Figura 4.22	- Resultados experimentais e da simulação da injeção de mercúrio na rede de sítios. Macroporos conectados.	132
Figura 5.1	- Volume elementar representativo.	137
Figura 5.2	- Transferência de vapor num meio poroso sujeito a duas atmosferas a diferentes umidades relativas.	140

Figura 5.3	- Transferência de massa através de uma ilha de líquido.	141
Figura 5.4	- Difusão de vapor em meio poroso.	144
Figura 5.5	- Esquema da simulação. Rede 18 X 18 simulando a drenagem. Etapa de percolação. Faces laterais impermeáveis.	149
Figura 5.6	- Tubo preenchido por água capilar.	150
Figura 5.7	- Geometria de um poro esférico.	151
Figura 5.8	- Tubo cujas as paredes são cobertas por uma camada de água adsorvida.	152
Figura 5.9	- Esquema da rede de resistências elétricas equivalentes, R_1 e R_2 : resistências dos sítios a e b respectivamente.	154
Figura 5.10	- Configuração do fluxo para a obtenção da rede de condutância.	156
Figura 5.11	- Esquema de um ponto (i,j,k) de cálculo.	157
Figura 5.12	- (a) Esquema do bloco equivalente a uma rede 2-D (b) Esquema do bloco equivalente a uma rede 3-D	159
Figura 5.13	- Matriz condutância. (a) rede 2-D, $N = 5$; (b) rede 3-D, $N = 4$.	161
Figura 5.14	- Modelo físico para incluir os macroporos. Modelo de Maxwell - De Vries, [4].	163
Figura 5.15	- Esquema do fluxo no sítio esférico quando o diâmetro da janela é igual ao diâmetro do sítio.	168
Figura 5.16	- Influência da configuração espacial aleatória dos poros sobre o coeficiente K , na embebição.	174
Figura 5.17	- Influência da configuração espacial aleatória dos poros sobre o coeficiente K , na drenagem.	175
Figura 5.18	- Influência do tamanho da rede sobre o coeficiente K , na drenagem.	176
Figura 5.19	- Influência do tamanho da rede sobre o coeficiente K , na embebição.	176
Figura 5.20	- A condutividade hidráulica, K , em função do processo simulado.	178
Figura 5.21	- O coeficiente de transferência D_p , em função do processo simulado.	179

Figura 5.22	- Influência da difusão de vapor sobre o coeficiente de transferência D_h na embebição.	180
Figura 5.23	- Influência da difusão de vapor sobre o coeficiente de transferência D_h na embebição evidenciando a região do limite de continuidade da fase líquida.	181
Figura 5.24	- Separação da difusão gasosa e da transferência capilar.	182
Figura 5.25	- Separação da difusão gasosa e da transferência capilar evidenciando a região no limite de continuidade da fase líquida.	183
Figura 5.26	- A condutividade K segundo o modelo de Childs e Collis-George.	185
Figura 6.1	- Experimento de infiltração de água - sonda térmica, [119].	187
Figura 6.2	- Valores experimentais da difusividade isotérmica de massa em função da saturação, [119]. As barras verticais indicam a incerteza de medição obtida teoricamente a partir da Eq.(6.47).	188
Figura 6.3	- a) Fratura vertical com condutividade finita num reservatório placa infinita; b) modelo de fluxo na fratura, [57].	190
Figura 6.4	-Modelo incluindo o fluxo horizontal nos blocos com a condição de fluxo constante na origem, [59].	190
Figura 6.5	- Modelo físico bidimensional para um meio poroso com fissuras.	192
Figura 6.6	- Seção mostrando a fissura.	193
Figura 6.7	- Canal com constrição representando a fissura.	194
Figura 6.8	- Domínio de solução.	196
Figura 6.9	- Colar de poros esféricos.	196
Figura 6.10	- Esquema do volume de controle para o balanço de massa na fissura.	198
Figura 6.11	- Esquema do volume de controle para o balanço de massa nos blocos.	199
Figura 6.12	- Esquema do volume de controle para o balanço de massa na bifurcação.	201
Figura 6.13	- Esquema do domínio de cálculo.	203
Figura 6.14	- Locações das faces dos volumes de controle, mostrando o contorno.	205

Figura 6.15	- Volume de controle elementar e as seções de fluxo.	206
Figura 6.16	- Esquema da distância entre os pontos nodais.	208
Figura 6.17	- Esquema do balanço de massa na bifurcação.	211
Figura 6.18	- Esquema da posição da frente na fissura impermeável quando $t = t_1$.	211
Figura 6.19	- Esquema do domínio de cálculo mostrando a distribuição de fissuras.	213
Figura 6.20	- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação $K_f = 7,15 \times 10^{-6}$ m/s - Canal. NPM = 100.	217
Figura 6.21	- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação $K_f = 3,60 \times 10^{-6}$ m/s - Canal com constrição. NPM = 100.	217
Figura 6.22	- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação $K_f = 4,23 \times 10^{-7}$ m/s - Colar. NPM = 100.	218
Figura 6.23	- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação $K_f = 7,15 \times 10^{-6}$ m/s - Canal. NPM = 150.	218
Figura 6.24	-Perfis de teor em água em vários instantes de simulação $K_f = 3,60 \times 10^{-6}$ m/s - Canal com constrição. NPM = 150.	219
Figura 6.25	-Perfis de teor em água em vários instantes de simulação $K_f = 4,23 \times 10^{-7}$ m/s - Colar. NPM = 150.	219
Figura 6.26	- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação $K_f = 7,15 \times 10^{-6}$ m/s - Canal. NPM 100.	220
Figura 6.27	- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação $K_f = 3,60 \times 10^{-6}$ m/s - Canal com constrição. NPM = 100.	220
Figura 6.28	- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação $K_f = 4,23 \times 10^{-7}$ m/s - Colar. NPM = 100.	221
Figura 6.29	-Perfis de teor em água em vários instantes de simulação $K_f = 7,15 \times 10^{-6}$ m/s - Canal. NPM = 150.(a) todo o domínio, (b) parte do domínio.	223
Figura 6.30	- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação $K_f = 3,60 \times 10^{-6}$ m/s - Canal com constrição. NPM = 150. (a) todo o domínio, (b) parte do domínio.	224

- Figura 6.31 - Perfis de teor em água em vários instantes de simulação $K_f = 4,23 \times 10^{-7}$ m/s - Colar. NPM = 150. (a) todo o domínio, (b) parte do domínio. 225
- Figura 6.32 - Perfis de teor em água em vários instantes de simulação $K_f = 4,23 \times 10^{-7}$ m/s - Colar. NPM = 100. O fator 1 representa um fator de flexibilidade igual a 100 e o fator 2 representa um fator de flexibilidade igual a 2000. 226
- Figura 6.33 - Difusividade de massa em função dos perfis médios. (a) NPM = 100, (b) NPM = 150. 227
- Figura 6.34 - Difusividade de massa em função dos perfis médios e do tamanho da amostra. $K_f = 7,15 \times 10^{-6}$ m/s, (canal). 228
- Figura 6.35 - Difusividade de massa em função dos perfis médios e do tamanho da amostra. $K_f = 3,60 \times 10^{-6}$ m/s, (canal com constrição). 228
- Figura 6.36 - Difusividade de massa em função dos perfis médios e do tamanho da amostra. $K_f = 4,23 \times 10^{-7}$ m/s, (colar). 229
- Figura 6.37 - Difusividade isotérmica de massa. 231

LISTA DE TABELAS

	p.
Tabela 2.1 - Valores de p_c para o problema de precolação, [90,101]	066
Tabela 2.2 - Valores dos expoentes críticos para o problema de percolação de sítios, [97]	071
Tabela 3.1 - Distribuição de diâmetro de poros obtida a partir da análise manual das micrografias obtidas pela microscopia eletrônica, Yunes [39]	086
Tabela 3.2 - Distribuição de diâmetro de fissuras obtida a partir da análise manual das micrografias obtidas por microscopia eletrônica, Yunes [39]	087
Tabela 3.3 - As classes de diâmetros de poros utilizadas na geração da rede de sítios	101
Tabela 4.1 - Tempos de processamento para simulação da rede de sítios	125
Tabela 5.1 - Classes de diâmetros de poros com $D > 10000 \text{ \AA}$	165
Tabela 5.2 - Tempos de processamento para a modelagem da drenagem e embebição através de redes 3-D de sítios ($1000 \text{ \AA} < D < 10000 \text{ \AA}$)	184
Tabela 6.1 - Tempos de processamento para a simulação	230

RESUMO

Modela-se geometricamente a estrutura porosa de um tipo de argamassa de cal e cimento, como a utilizada no revestimento interno de edificações, com o objetivo de simular os fenômenos de transferência. O objetivo do modelo é fornecer uma idealização razoável da estrutura complexa do material poroso de forma que os processos de transporte possam ser tratados matematicamente.

A faixa de diâmetros dos poros da argamassa analisada abrange poros com diâmetros entre 200 e 140000 Å. A distribuição em volume de poros utilizada foi obtida usando-se as isotermas de adsorção para os poros com diâmetros menores que 2000 Å, e a microscopia eletrônica para os poros com diâmetros maiores que 2000 Å. Além disso, as micrografias obtidas com microscópio eletrônico de varredura evidenciaram, na estrutura da argamassa, a presença de uma extensa rede de fissuras em volta dos grãos de areia, constituindo uma fonte de canais preferenciais de acesso ao interior do material. Mostraram ainda que os poros com diâmetros superiores à 10000 Å estão desconectados e separados uns dos outros.

Numa primeira etapa modela-se, através de uma rede de percolação, somente os poros com diâmetros entre 1000 e 10000 Å. Admite-se, neste trabalho, que os poros com diâmetros inferiores à 1000 Å estão continuamente preenchidos de líquido e não interferem nos processos de invasão.

Para os poros acima de 10000 Å, excluindo as fissuras, aplica-se um modelo similar ao de Maxwell-De Vries, inspirado num modelo para determinar a condutividade térmica em meios granulares.

As fissuras são simuladas através de um modelo bidimensional plano, consistindo de uma rede de blocos com canais, dispostos de forma regular. Os blocos representam o material homogêneo e os grãos de areia mais a alumina, e os canais representam as fissuras.

Simulam-se os processos de invasão tais como, a embebição e a drenagem. Com o modelo para as fissuras simula-se a embebição e os resultados são comparados com dados experimentais da literatura.

A simulação dos processos de embebição e drenagem mostra as curvas dos coeficientes de transferência D_h e da condutividade hidráulica K , em função do grau de saturação, com uma evolução bastante acentuada comparada como os resultados da literatura. É observado ainda que a história das curvas de D_h e K , em função do grau de saturação, está diretamente ligada ao agrupamento percolante para a rede utilizada. O modelo para as fissuras fornece resultados qualitativos bastante coerentes com o fenômeno de embebição em comparação com os resultados experimentais da literatura.

ABSTRACT

The porous structure of a lime and cement mortar (like the one used for plastering internal building walls) is geometrically modeled in order to simulate the transfer phenomena. The objective is to supply a reasonable idealization of the complex structure of porous material to make possible to deal mathematically with transport processes.

The mortar pores diameters range from 200\AA to 140000\AA . The pore distribution in volume was obtained using adsorption isothermal curves for pores of diameters smaller than 2000\AA and using electronic microscopy for larger ones. Micrographies obtained from the scanning electronic microscope showed a vast net of cracks around the sand grains in the mortar structure. This cracks are preferential channels of admittance into the mortar interior. They also showed that pores of diameters larger than 10000\AA are disconnected and separated from each other.

In the first part only the pores of diameters between 1000\AA and 10000\AA are modeled, through a percolation network. It is admitted herein that pores of diameters smaller than 1000\AA are continuously filled with liquid and they do not interfere in invasion processes.

A model similar to Maxwell-De Vries' one, and inspired in a model used to determine thermal conductivity in granular media, is applied for pores larger than 10000\AA , excluding cracks.

Cracks are simulated through a plain bi-dimensional model that is a net of blocks and channels in a regular distribution. Blocks represent the homogeneous material plus sand grains and alumina. Channels represent the cracks.

The invasion processes like imbibition and drainage are simulated. The imbibition is simulated using the model for the cracks. The results are compared with experimental data from the literature.

The results of imbibition and drainage processes show the curves for the transfer coefficients D_h and the hydraulic conductivity K , in function of the saturation, with an evolution quite abrupt compared with data obtained in the literature. It is observed that the history of D_h and K curves in function of saturation is directly associated with the percolant cluster for the network used here. The model for the cracks supplies coherent results with the imbibition process as compared with experimental data in the literature.

1 - INTRODUÇÃO

1.1 - Colocação do problema

A distribuição de umidade afeta o desempenho de elementos das edificações, contribuindo à transferência de calor, para a formação de dilatações térmicas diferenciadas e fissuras, ao estado de tensões em que se encontra o material e à formação de microorganismos, alterando a durabilidade. A importância deste efeito está associada ao teor de umidade contida nos poros e, desse modo, às características de sorção e transferência de umidade nos materiais porosos utilizados em edificações. Dessa forma, o estudo e o conhecimento da distribuição de umidade dentro do material poroso é bastante importante, sendo tratado na análise dos processos dinâmicos isotérmicos que ocorrem nos materiais porosos quando sujeitos a gradientes de umidade relativa e pressão.

O escoamento de um fluido deslocando um outro, particularmente em meios porosos, é muito frequente na natureza. A embebição da água dentro do solo, deslocando o ar, durante a irrigação agrícola ou a formação de aquíferos. A infiltração da chuva no solo, nas paredes de edificações, a secagem de grãos são alguns dos exemplos encontrados e estão associados ao escoamento de água e ar.

Os fenômenos de transferência de umidade que ocorrem no seio do material poroso são bastante influenciados pela geometria porosa. A estrutura dos materiais contém uma fase vazia conexa, chamada espaço poroso, no interior de uma fase sólida. Os poros têm formas e tamanhos bastante irregulares e desiguais de modo que qualquer tentativa de modelar matematicamente um fenômeno de transferência torna-se uma tarefa muito difícil.

O estudo do movimento dos fluidos em meios porosos iniciou-se com modelos bastante simples. A nível macroscópico deve-se destacar o trabalho de Henry Darcy de 1856 que dá origem à equação básica da migração de líquido num meio poroso saturado [1,2],

$$q = -\frac{k}{\mu} \nabla(p_l + \rho g z), \quad (1.1)$$

onde q é o fluxo volumétrico de líquido, k é a permeabilidade do meio [1,2], μ é a viscosidade do líquido, ρ é a massa específica do líquido, p_l é a pressão no líquido e $\rho g z$ é o potencial gravitacional.

De outra forma,

$$q = -K \nabla \left(\frac{p_l}{\rho g} + z \right), \quad (1.2)$$

onde $K = (k \rho g / \mu)$ é a condutividade hidráulica [1,2].

Para um meio poroso não saturado, Buckingham em 1907 [1,2,3], atentou para o fato de que a pressão da água é mais baixa que a pressão atmosférica; introduziu assim, o conceito de potencial de sucção. Desse modo,

$$q = -K \nabla(\psi + z), \quad (1.3)$$

onde ψ é o potencial de sucção, $\psi = (p_l - p_g) / \rho g$, onde p_g é a pressão da fase gasosa.

O potencial de sucção está relacionado à energia potencial da água presente nos interstícios da matriz sólida sendo que o seu gradiente é o responsável pela tendência da água de escoar através do material poroso. É o potencial das forças que surgem das interações locais entre o líquido e a matriz sólida.

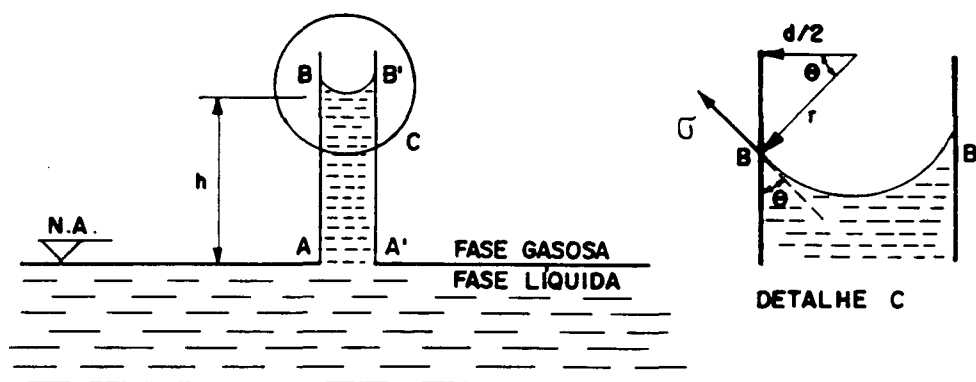


Figura 1.1 - Ascensão de um líquido em um tubo devido ao efeito de capilaridade.

Fisicamente o potencial de sucção pode ser compreendido através da análise de um fenômeno bastante simples, conforme mostra a Figura 1.1. Na Figura, h é a ascensão do líquido, d é o diâmetro do tubo, r é o raio do menisco e θ o ângulo de contato.

Quando se insere um pequeno tubo em um líquido, forma-se um menisco como resultado do ângulo de contato da água com as paredes do tubo. A ocorrência de curvatura provoca uma diferença de pressão na interface líquido-gás de tal forma que a pressão abaixo do menisco p_l , é menor que a pressão do ar p_g , acima do menisco. Assim, a água dentro do tubo, inicialmente localizada na posição correspondente ao nível AA', é deslocada para cima até que a diferença de pressão inicial seja totalmente contrabalanceada pela pressão hidrostática da coluna d'água no tubo capilar.

A lei de Darcy, originalmente concebida para meio saturado somente, foi estendida por Richards, em 1931, para meio poroso não saturado, considerando a condutividade hidráulica como função do potencial de sucção ψ [3].

Com o objetivo de simular os fenômenos de transferência, como por exemplo, a embebição e a drenagem, modela-se o material poroso geometricamente. Modelos de meio poroso são representações matemáticas simplificadas de meios porosos reais. O objetivo do modelo é fornecer uma idealização razoável da estrutura complexa do material poroso de forma que os processos de transporte de interesse, possam ser tratados matematicamente. Permite assim, uma melhor compreensão dos fenômenos físicos que ocorrem no seio do mesmo e também possibilita uma formulação e obtenção de suas propriedades dinâmicas, tal como a condutividade hidráulica.

Neste trabalho modela-se o material poroso geometricamente e faz-se um estudo dos processos de transferência isotérmica de líquido e vapor em materiais porosos não saturados.

Estes modelos constituem-se fundamentalmente de redes representando o espaço poroso, e são modelos estatísticos interessados nos detalhes da estrutura local. Assim, são capazes de prever os fenômenos de fluxo baseados numa estrutura porosa, representada estatisticamente.

O trabalho pode ser dividido em três etapas. A primeira etapa abrange a concepção da rede de sítios e ligações através de dados da microscopia eletrônica, isotermas de equilíbrio e dados da porosimetria a mercúrio, para uma argamassa de cimento e cal. Estuda-se a rede através das técnicas de percolação, considerando os processos de embebição e drenagem. Neste estudo, avalia-se o comportamento da rede obtida em relação a estes processos, determinando-se as ilhas de sítios e ligações não condutoras e conseqüentemente o conteúdo irreduzível de líquido. Simula-se assim, os processos de embebição e drenagem no meio poroso, dentro de um sistema de fase molhante (água) e fase não molhante (ar).

Valendo-se de uma analogia com uma rede de resistências elétricas, calcula-se o potencial motor da migração em cada ponto nodal da rede. Calculando-se o potencial equivalente, pode-se determinar a condutividade hidráulica em função do potencial de sucção e do conteúdo de umidade.

Nesta primeira etapa, a modelagem através de uma rede de sítios e ligações, abrange apenas uma faixa de diâmetros de poros da distribuição total.

Numa segunda etapa modela-se a estrutura porosa através de um modelo físico inspirado naquele proposto por De Vries [4] para o cálculo da condutividade térmica de materiais granulares. A utilização de rede 3-D e do modelo físico semelhante ao de De Vries, permite efetuar a simulação da condutividade hidráulica em função do grau de saturação.

A terceira etapa destina-se ao estudo macroscópico da argamassa de cimento e cal. Um cálculo transiente por volumes finitos sobre um meio com fissuras é apresentado. O cálculo da difusão capilar dentro de uma fissura, dadas a densidade, a condutividade equivalente e a pressão capilar, é acoplado ao cálculo da difusão não linear dentro de um meio não saturado, que engloba a zona homogênea que circunda a fissura.

Analisa-se a sensibilidade à condutividade e à densidade de fissuração dentro do processo de embebição. Calcula-se a difusividade mássica e compara-se com dados experimentais.

1.2 - Revisão Bibliográfica

Na revisão bibliográfica que se segue abordam-se trabalhos associados ao estudo das propriedades dinâmicas e estáticas do meio poroso. Assim sendo, esta revisão compreende numa primeira etapa os trabalhos sobre a modelagem da condutividade hidráulica, numa segunda etapa os trabalhos sobre a distribuição de umidade em meios porosos e finalmente os trabalhos sobre obtenção da difusividade mássica.

1.2.1 - Modelagem da condutividade hidráulica

Nesta seção são apresentados os trabalhos que mostram os modelos para a determinação da condutividade hidráulica em meios porosos.

Os primeiros modelos para materiais porosos foram escritos usando uma distribuição de tamanho de partículas ao invés de tratá-los em termos de uma dada distribuição de poros. Em consequência são obtidas muitas expressões relacionando a permeabilidade com o tamanho de partículas. A maioria dos trabalhos apresenta curvas de permeabilidade relativa (razão entre a permeabilidade e a permeabilidade de saturação).

Nã década de quarenta, o desenvolvimento de métodos para a medição da distribuição de tamanho de poros trouxe a possibilidade do uso do tamanho do poro como base para o cálculo da permeabilidade do meio , ao invés da distribuição de partículas [5, 6].

Childs e Collis-George [5] desenvolvem uma equação para a permeabilidade , que leva em conta várias sequências de poros de tamanhos diferentes, quando esses poros são aleatoriamente distribuídos como num sistema poroso. Eles obtêm essa expressão para a permeabilidade do seguinte modo: uma seção transversal do meio poroso, de área A , exibe duas faces similares que mostram uma função distribuição de raios de tubos, $f(r)$, similar, Figura 1.2. Considerando uma justaposição aleatória dessas duas faces obtêm a probabilidade de diferentes sequências de poros. A resistência ao fluxo viscoso é atribuída ao menor poro na sequência.

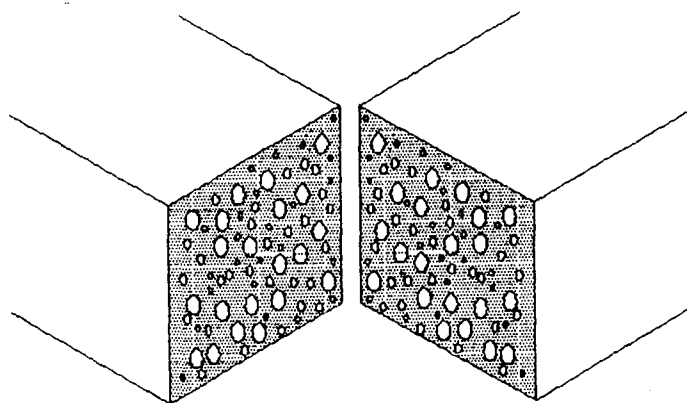


Figura 1.2 - Representação esquemática de uma seção. Cada uma das faces exibe uma distribuição randômica de vários tamanhos de poros. Os poros estão representados como círculos na seção transversal.

Então segue que:

$$k(u) = \xi \frac{\rho g}{\mu} \sum_{r_i=0}^R \sum_{r_j=0}^R r_i^2 f(r_i) \delta r f(r_j) \delta r, \quad (1.4)$$

onde ξ é uma constante de proporcionalidade; ρ é a densidade do fluido; μ é a viscosidade do fluido; g é a aceleração da gravidade; r_i e r_j são os raios de dois tubos formando a sequência, r_i sendo o menor; $f(r_i)\delta r$ e $f(r_j)\delta r$ são as frações da seção transversal tomada pelos tubos de raio entre r e $r+dr$ e R é o raio do maior tubo. A constante ξ é determinada experimentalmente. O cálculo é executado sucessivamente para diferentes valores de umidade, e em cada caso o somatório vai até o poro de tamanho R , associado ao maior raio de poro que permanece cheio de líquido na umidade especificada.

Os autores, na concepção da expressão, se limitam a uma fração da seção transversal e ignoram o efeito dos diferentes comprimentos dos tubos. Embora a expressão não forneça uma previsão completa da permeabilidade, ela leva a uma melhor correlação de dados experimentais do que os modelos baseados nas propriedades das partículas [5].

Nesta mesma linha Marshall [6] também deriva uma equação para a relação entre a permeabilidade e a distribuição de tamanho de poros em materiais isotrópicos. Ele representa o raio médio dos poros em cada uma das n frações iguais do espaço poroso total, em ordem decrescente de tamanho por r_1, r_2, \dots, r_n [cm] respectivamente e calcula a permeabilidade pela expressão,

$$k = \varepsilon^2 n^{-2} [r_1^2 + 3r_2^2 + 5r_3^2 + \dots + (2n-1)r_n^2] / 8, \quad (1.5)$$

onde ε é a porosidade do material poroso e k está em unidades L^2 .

A concordância dos resultados obtidos com os dois modelos se mostrou bastante satisfatória para vários tipos de areias e para o pó de ardósia.

A literatura apresenta vários estudos [7-20], onde estes modelos geométricos são redes representando os poros interconectados e onde as formas reais dos poros são geralmente modeladas por formas geométricas simples, sendo a forma cilíndrica a escolha mais comum.

Fatt[7,8,9] utiliza uma rede de tubos na qual cada um deles representa um poro no meio poroso. Ele propõe uma rede regular bidimensional de tubos de raios aleatoriamente distribuídos como modelo para avaliar as propriedades dinâmicas do meio poroso, tal como a condutividade hidráulica. Mostra também que as propriedades de fluxo multifásico são funções da forma da rede e da distribuição de tamanho de poro utilizada e que a estrutura da rede determina todo o comportamento dos sistemas reais. Estuda quatro tipos de redes, Figura 1.3.

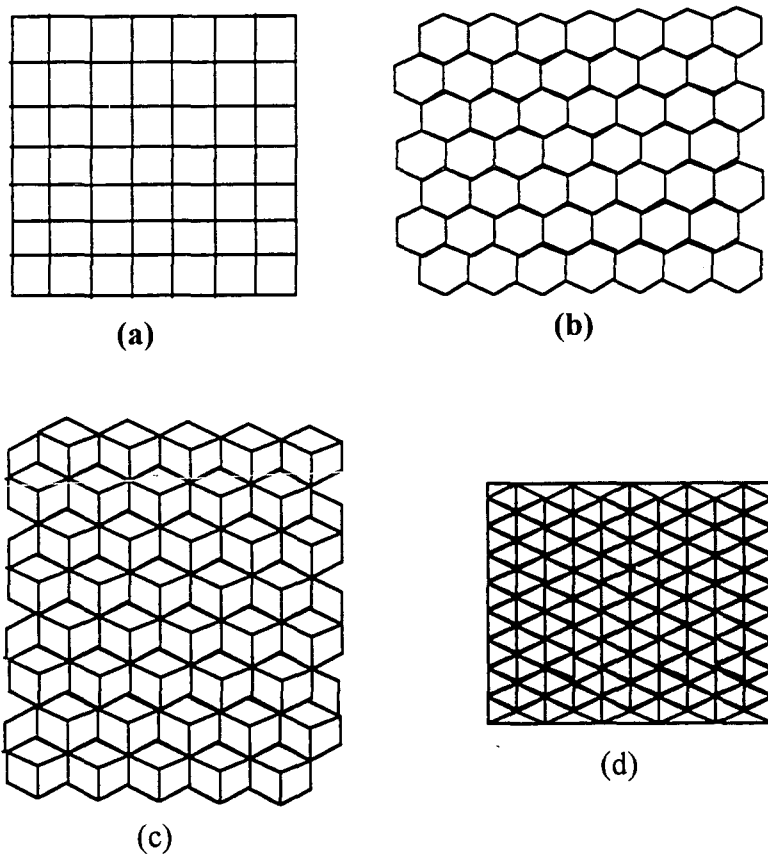


Figura 1.3 - Redes bidimensionais de percolação, Fatt[7]

(a) rede quadrada ($Z=6$), (b) rede hexagonal ($Z=4$),
 (c) rede hexagonal dupla ($Z=7$), (d) rede hexagonal tripla ($Z=10$).

Cada uma destas redes é caracterizada pelo seu número de coordenação, Z , que indica o número de vizinhos de cada elemento da rede. Admite que uma rede bidimensional pode substituir uma rede tridimensional, aumentando-se o número de interconexões, caracterizado pelo número de coordenação.

Os modelos clássicos utilizados no passado, a saber: o pacote de esferas e o feixe de tubos, simplificam bastante a estrutura e o modelo teórico representativo do meio poroso, por outro lado produzem resultados muito imprecisos. Uma das desvantagens do feixe de tubos é a falta de interconexão entre os tubos, o que o afasta da estrutura real do meio poroso. O modelo de pacote de esferas apresenta esta interconexão entre os poros, mas a forma dos poros se torna muito complexa, dificultando sua análise.

Pensando em simplificar as operações com a rede, Fatt[7] opta por redes bidimensionais. Fatt, [8], observa também que as propriedades dinâmicas do meio poroso, tal como a condutividade hidráulica, são mais sensíveis à estrutura e à distribuição de tamanho de poros do que as propriedades estáticas, tais como as características de pressão capilar. Em relação à distribuição de tamanho de poros, Fatt[9], especifica raio e comprimento de tubo através de dois métodos, a saber: (a) pela combinação aleatória de raio e comprimento para alcançar o volume de cada tubo; (b) pela fixação de uma relação entre raio e comprimento, eliminando desse modo o comprimento como uma variável. A relação fixada entre raio do tubo e comprimento é assumida da forma,

$$l = C r^\alpha, \quad (1.6)$$

onde C e α são constantes. As junções são assumidas com volume zero.

As leis de escoamento dos fluidos são esquematizadas pelas hipóteses seguintes: (a) um dado poro contém fase molhante ou fase não molhante, mas não ambas ao mesmo tempo; (b) a fase não molhante invade um poro (tubo) quando a pressão capilar, $p_g - p_l$, é menor do que $2\sigma/r$

(o ângulo de contato é suposto nulo); (c) a continuidade da fase líquida é suposta se estabelecer através dos filmes de líquido que avançam junto à parede e não existe aprisionamento de ar.

Utilizando a analogia entre a lei de Poiseuille e a lei de Ohm, Fatt [8] obtém as permeabilidades relativas sobre uma rede elétrica, onde a cada resistência elétrica corresponde um diâmetro de tubo. A Figura 1.4 (b) mostra os resultados para uma rede triplo-hexagonal e a lei de distribuição dos diâmetros correspondente é apresentada na Figura 1.4 (a). Fatt [9] estuda a influência dos parâmetros α e Z comparando os resultados obtidos pelas redes com resultados experimentais. O coeficiente Z é o número de coordenação da rede e representa o número de tubos conectados às duas extremidades de cada tubo e o parâmetro α representa a constante definida pela Equação (1.6). Para $\alpha = -1,0$, ou seja, tubos com comprimento inversamente proporcional ao raio, obteve curvas de permeabilidade relativa, para várias distribuições de raios, comparáveis àquelas observadas em meios porosos reais. Em relação ao parâmetro Z , Fatt [8,9] conclui que o mesmo teve pouca influência sobre os resultados obtidos.

A rede sugerida por Fatt [7,8,9] foi modificada por Dodd e Kiel [10] a fim de permitir o aprisionamento do fluido molhante durante um processo de drenagem. Estes autores utilizam redes quadradas e estudam os efeitos da distribuição de tamanhos de poros, do número de coordenação e do tamanho da rede.

Um modelo de célula unitária para meios porosos granulares isotrópicos foi formulado por Payatakes, Tien e Turian [11]. No modelo proposto, cada célula unitária corresponde a um poro tendo duas gargantas coaxiais, uma de entrada e de outra de saída, contraídas, assemelhando-se a um pedaço de tubo contraído. O meio poroso é representado por uma série de elementos unitários. Cada elemento unitário consiste de um dado número de células conectadas em paralelo, Figura 1.5

Chatzis e Dullien [12,13] fazem a modelagem da estrutura porosa através de redes bi e tridimensionais. Caracterizam as redes por um número de coordenação médio Z , definido como

$$Z = \sum_r Z_r f_r, \tag{1.7}$$

e,

$$Z_r = \frac{(\sum m)_r}{2} + 1, \tag{1.8}$$

onde $(\sum m)_r$ é o número de poros conectados ao poro do tipo r em ambos os lados e f_r é a frequência relativa de tais poros na rede. O valor de Z é um indicativo do número de coordenação da rede, Figura 1.6.

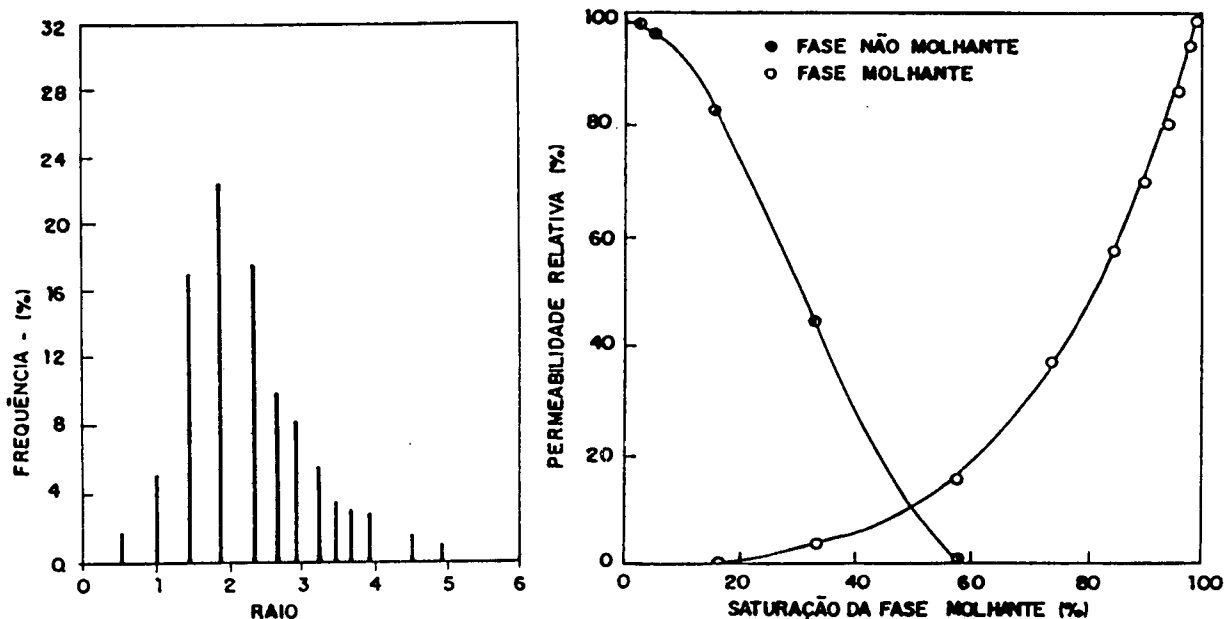


Figura 1.4 - (a) Distribuição de raios de tubo , (b) Características de permeabilidade relativa de uma rede tipo Figura 1.3- (d) com a distribuição dada em (a), [8].

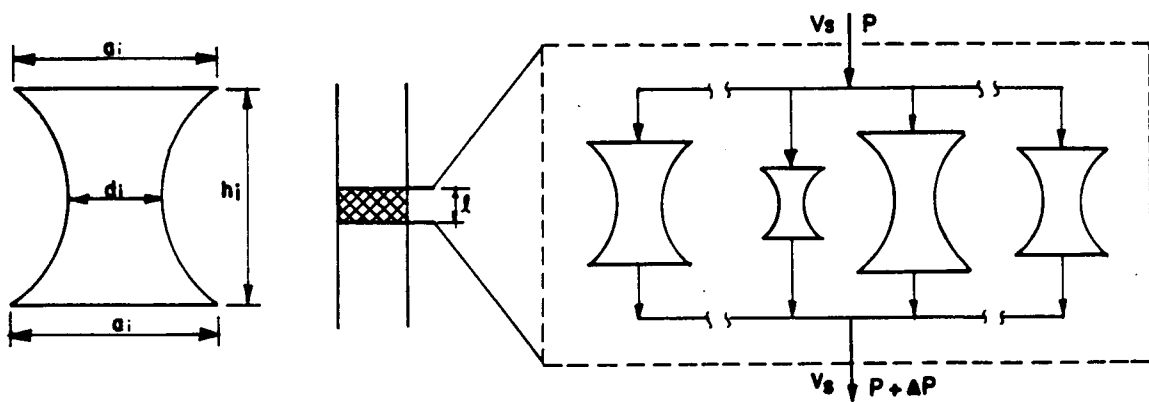


Figura 1.5 - Representação esquemática de um elemento unitário.

Payatakes, Tien e Turian [11].

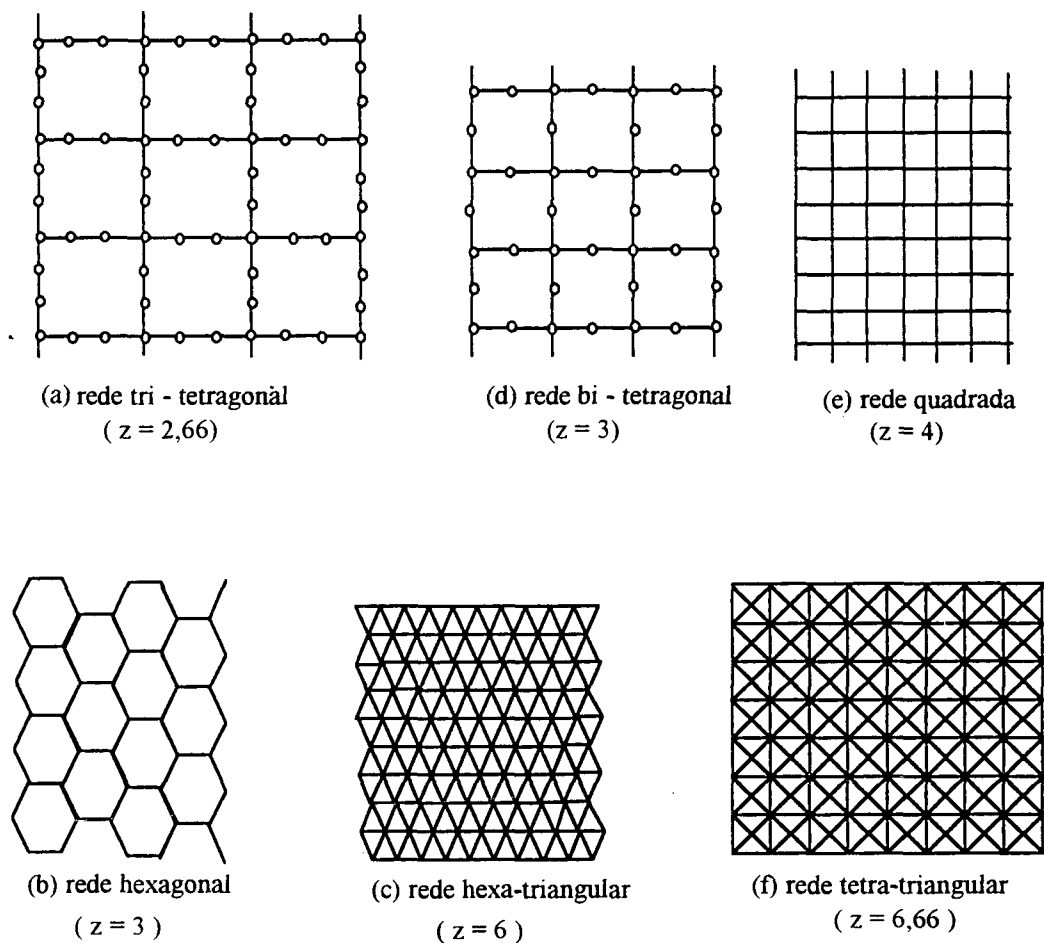


Figura 1.6 - Redes bidimensionais , Chatzis e Dullien [12].

Utilizando as técnicas da percolação de sítios e/ou de ligações Chatzis e Dullien [12,13] estudam o comportamento de várias redes e modelam a drenagem e a permeabilidade relativa a um líquido não molhante injetado. Supõem ligações e sítios em forma de dutos cilíndricos de seção angulosa (o cilindro é a superfície determinada por um conjunto de retas paralelas se apoiando sobre uma curva fechada). Contrariamente ao caso de redes com poros cilíndricos de seção circular, as ligações e os sítios angulosos são cheios completamente por um líquido não molhante somente à uma pressão capilar infinita, [14].

Os autores supõem que a forma das funções densidades $f_b(D_b)$ e $f_s(D_s)$, que representam a frequência das ligações de diâmetro D_b e dos sítios de diâmetro D_s , respectivamente, são dados por uma função beta, Figura 1.7 (a). A partir destas curvas eles obtêm a distribuição completa dos poros, Figura 1.7 (b).

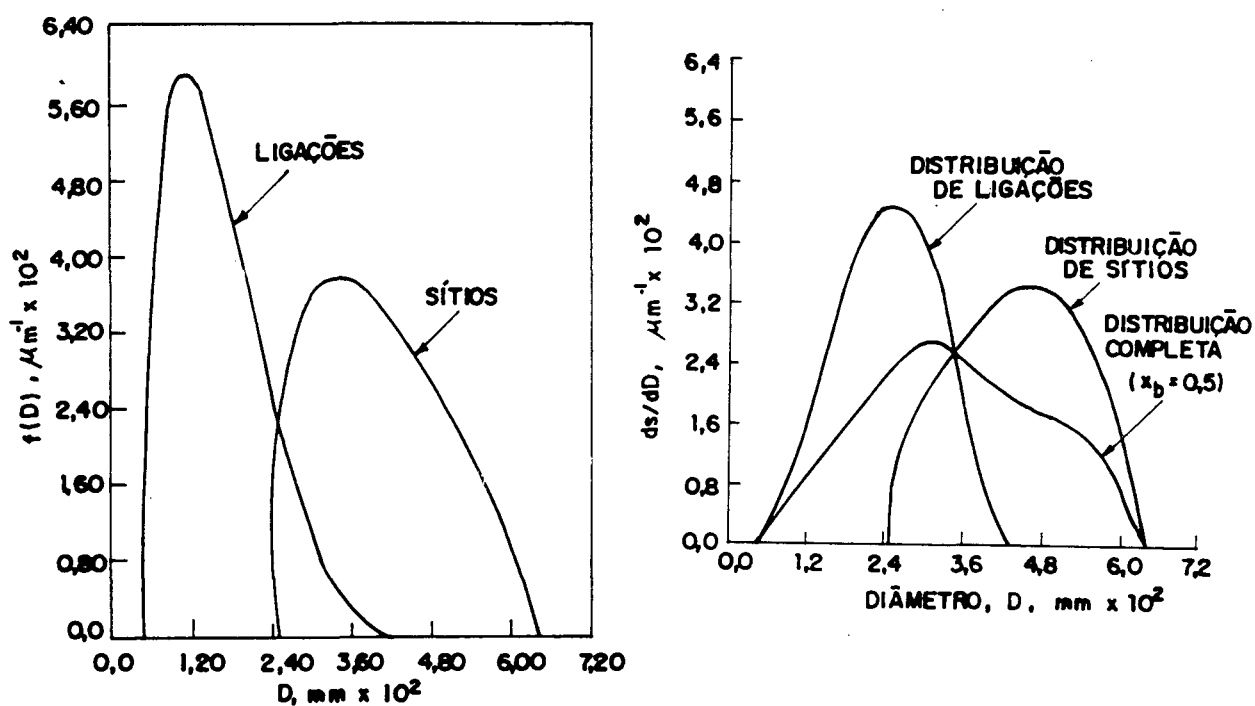


Figura 1.7 - (a) Funções densidades dos diâmetros das ligações e dos sítios.

(b) Funções densidades baseadas no volume, Chatzis e Dullien [13].

Chatzis e Dullien [13] calculam a permeabilidade relativa da fase não molhante e obtêm boa concordância com os resultados experimentais, Figura 1.8. Os resultados obtidos por Chatzis e Dullien [13] para arenitos de diferentes origens, Figura 1.8, estão bastante próximos dos dados experimentais em função das hipóteses e dos parâmetros de ajuste utilizados. No método de obtenção da função distribuição de diâmetros de poros, baseada no volume, Figura 1.8, Chatzis e Dullien designam ao conjunto de ligações uma fração X_b do volume de vazios total e atribuem aos poros a forma de um cilindro de seção angulosa, cujo comprimento é constante e da ordem

do braço de rede. A fração do volume poroso ocupada por cada sítio é admitida ser proporcional ao quadrado do seu diâmetro. A mesma hipótese é válida para as ligações. A correlação entre os diâmetros dos sítios e das ligações é estabelecida de forma que a curva de porosimetria a mercúrio calculada fique bem próximo da curva experimental.

O cálculo da permeabilidade relativa de um líquido não molhante em presença de um outro líquido molhante é complicado pelo efeito do aprisionamento do líquido molhante. Para o cálculo da permeabilidade relativa de um líquido não molhante em presença de um outro líquido molhante, todas as ligações são caracterizadas pelo mesmo diâmetro D_b , representando canais cilíndricos de seção circular, e os sítios são esféricos com o mesmo diâmetro D_s , Figura 1.9.

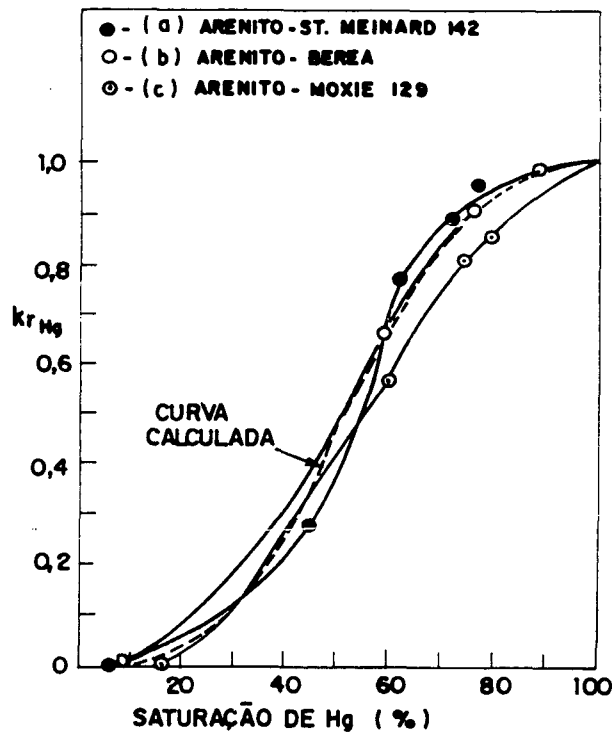


Figura 1.8 - Evolução da permeabilidade relativa ao mercúrio de arenitos, Chatzis e Dullien [13].

Esta hipótese admite que todas as ligações têm a mesma condutividade relativa, segundo o método de Kirkpatrick [15]. Os valores calculados apresentam boa concordância com os dados experimentais.

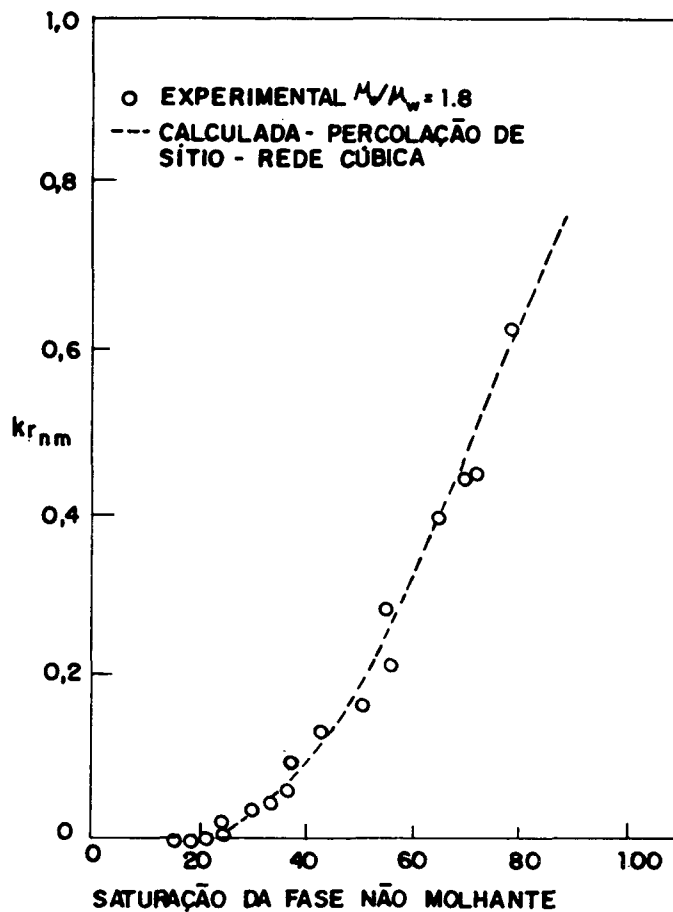


Figura 1.9 - Evolução da permeabilidade relativa ao óleo de uma areia, Chatzis e Dullien [13].

Na Figura 1.9, k_{rnm} representa a permeabilidade relativa da fase não molhante e S_{nm} representa a saturação da fase não molhante.

Van Brakel [16] apresenta um abrangente resumo dos vários modelos matemáticos utilizados para caracterizar o meio poroso. No estudo dos fenômenos de transporte, dá ênfase especial ao transporte capilar de líquido.

Singhal e Somerton [17] utilizam uma rede de 110 canais cilíndricos de seção não circular, aleatoriamente distribuídos, para representar a matriz porosa e simulam quatro regimes de fluxo para o escoamento simultâneo de dois fluidos dentro de cada canal. O fluxo em cada poro, a

baixos números de Reynolds, foi considerado ser de quatro tipos básicos, Figura 1.10- (a) fluxo de uma fase única, (b) fluxo pendular, (c) fluxo em bolhas e (d) deslocamento de um fluido por outro. Os dados experimentais foram obtidos para uma amostra de pó de teflon, consolidada e completamente saturada com água destilada através de um procedimento de saturação a vácuo. Um líquido orgânico (fase molhante) foi injetado deslocando a água destilada (fase não molhante) na temperatura ambiente. Os resultados obtidos para a permeabilidade relativa são mostrados na Figura 1.11.

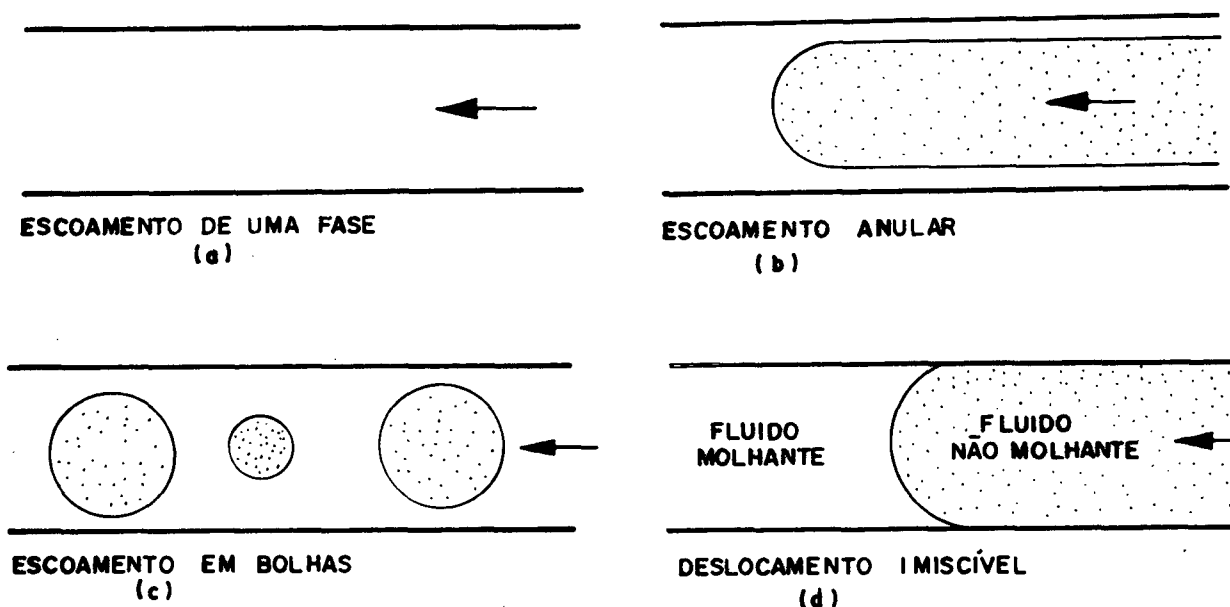


Figura 1.10 - Tipos de escoamento, Lenormand [21].

A rede (modelo) está inicialmente saturada em óleo (fase não molhante). A água (fase molhante) é injetada até que o teor da fase não molhante fique abaixo de 0,1% do seu volume inicial. Este fluido não molhante residual está associado ao aprisionamento de fluidos que ocorre em certos poros e que é observado nas diferentes etapas do avanço da frente de molhamento.

As causas do aprisionamento de fluidos em meios porosos são a natureza irregular dos poros, principalmente a ocorrência de alargamentos e gargantas ao longo do comprimento do

poro e a histerese do ângulo de contato. O aprisionamento também é governado pela relação entre as forças capilares e as forças viscosas, as quais são influenciadas pela irregularidade e rugosidade dos poros. Em geral, o aprisionamento ocorre quando o gradiente de pressão que causa o fluxo num poro não consegue vencer a resistência oferecida pela interface no interior do poro. Para evitar o aprisionamento de fluidos num poro, o gradiente de pressão deve vencer as resistências ao fluxo numa situação onde estão presentes duas fases. Estas resistências adicionais podem ser causadas pelas flutuações no fluxo devido a natureza irregular dos poros. Os autores simulam o mecanismo de aprisionamento através de um parâmetro da forma $c/\mu_i\mu_d$, onde c é um coeficiente determinado empiricamente e μ_i e μ_d são as viscosidades das fases injetada e deslocada. Nos cálculos, a resistência a ser superada, numa situação de fluxo de duas fases, foi multiplicada por este fator para levar em conta a resistência adicional.

Na Figura 1.11 (a), k_{rd} representa a permeabilidade relativa do fluido deslocado, k_{ri} representa a permeabilidade relativa do fluido injetado e as curvas experimentais são obtidas para o sistema ciclohexano-água. A Figura 1.11-(a) mostra uma comparação das curvas de permeabilidades relativas de uma fase molhante deslocando uma fase não molhante. Uma discordância ocorre na curva da permeabilidade relativa da fase molhante que representa uma evolução mais acentuada para baixos graus de saturação em relação à curva experimental. A Figura 1.11(b) mostra a razão entre a permeabilidade relativa da fase molhante, k_{rw} , e a permeabilidade relativa do óleo, k_{ro} , em função da saturação em água. As curvas mostradas foram obtidas para uma rede (modelo) e para uma amostra de teflon (experimento), inicialmente saturadas com um fluido não molhante, injetando-se um fluido molhante até alcançar a continuidade da fase molhante. A partir deste ponto interrompe-se o fluxo da fase molhante fazendo o processo inverso com a fase não molhante até alcançar a continuidade da fase não molhante. Este procedimento ocasiona uma histerese nas curvas de permeabilidade relativa em função do grau de saturação, tanto para o modelo como para o experimento.

A combinação de fatores tais como a distribuição do fluido, a distribuição de poros e a histerese de ângulo de contato causa o fenômeno da histerese observado. A distribuição do fluido

depende fortemente da história dos processos anteriores e está intimamente ligada à estrutura porosa. Um problema prático associado ao conceito do ângulo de contato é o fato de que o ângulo de contato de avanço é frequentemente maior que o ângulo de contato de retrocesso. Além disso, a histerese do ângulo de contato pode ser devido à contaminação do líquido ou da superfície sólida e à rugosidade da superfície sólida [18,19,20].

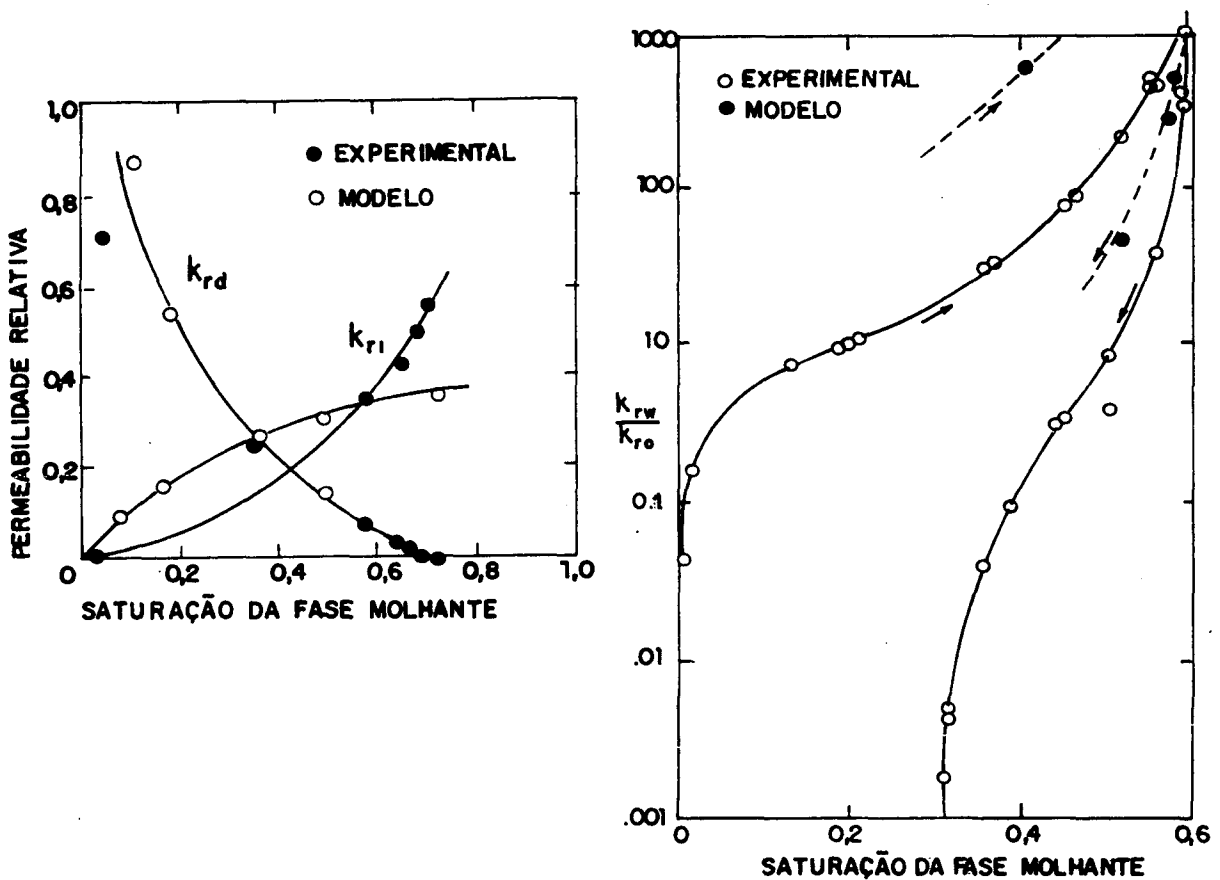


Figura 1.11 - (a) Comparação entre as curvas das permeabilidades relativas do fluido deslocado, k_{rd} , do fluido injetado, k_{ri} , e as curvas experimentais obtidas para o sistema ciclohexano-água. (b) Comparação das curvas das permeabilidades relativas da fase molhante, k_{rw} e do óleo, k_{ro} .

Singhal e Somerton [17].

O modelo apresenta problemas na simulação da geometria do poro, devido à falta de uma caracterização adequada ou descrição da estrutura porosa. Isto está associado à dificuldade de

representar um poro irregular por um poro de geometria regular, designando um parâmetro geométrico ou um raio que pode simultaneamente satisfazer o volume do poro, a resistência da garganta e a resistência ao fluxo. Um segundo problema é a alocação de volume zero nos nós da rede. A alocação de volumes reais das zonas de junção para vários poros acarreta problemas no tempo de cálculo computacional. Embora o modelo apresente essas falhas os autores conseguem obter alguns resultados conclusivos, tais como, a influência do número de coordenação da rede, e a importância do mecanismo de aprisionamento de fluidos nas curvas de permeabilidade relativa.

Lenormand [21] utiliza redes análogas àquelas propostas por Fatt [7,8,9] ou Dodd e Kiel [10]. Suas redes são bem maiores do que as citadas. Aplica os recursos de percolação de ligação, introduzidos por Chatzis e Dullien [12,13], e simula o comportamento das redes em relação aos processos de transferência de fluido no meio poroso. Ele representa os quatro regimes de fluxo admitidos por Singhal e Somerton [17], Figura 1.10.

O autor faz um estudo teórico e experimental de diversos deslocamentos de fluidos, na drenagem e na embebição, dentro de domínios bidimensionais, principalmente dutos de seção transversal retangular, quando os efeitos capilares são preponderantes.

Koplik [22] utiliza uma rede semelhante àquela utilizada por Fatt consistindo de um arranjo regular de junções ou poros conectados por canais ou gargantas. Poros e gargantas são caracterizados por seus diâmetros com funções de distribuição de probabilidade independentes. O modelo constitui-se então de câmaras esféricas de tamanho aleatório, conectadas por gargantas cilíndricas de tamanho também aleatório. A rede tem número de coordenação aleatório e gargantas entrelaçadas de forma que a rede é topologicamente não plana.

A idéia básica do seu trabalho é dividir a rede em poros e gargantas e igualar os campos de velocidade e pressão onde ocorre a junção. Com esta simplificação torna-se possível uma solução analítica do problema.

Numa região bidimensional $|\vec{x}| \leq R$, Figura 1.12, o estudo aproximado do fluxo no poro é feito resolvendo as equações de Stokes,

$$\mu \nabla^2 \cdot \mathbf{u} = \nabla p, \quad (1.9)$$

e,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.10)$$

com condições de contorno em $|\vec{x}| = R$,

$$\mathbf{u} = \frac{3Q_1}{4r_1^3} (r_1^2 - y^2) \vec{x} [|\theta - \theta_i| \leq \arcsen(r_1 / R)] \quad (1.11)$$

 $\mathbf{u} = 0$ fora dessa região,

onde Q_1 é o fluxo através da garganta 1 e r_1 é o raio da garganta.

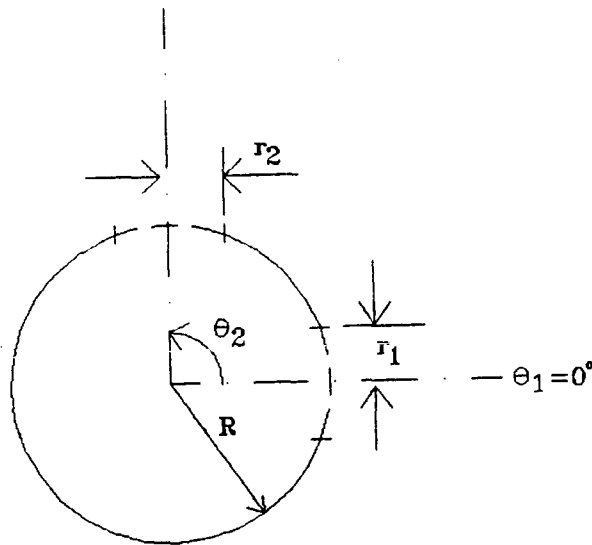


Figura 1.12 - Geometria de um poro esférico., [22].

A função de corrente é utilizada e o problema resulta numa equação biarmônica,

$$\nabla^4 \psi = 0, \quad (1.12)$$

onde $\psi(x)$ é a função de corrente, definida anteriormente e cuja solução é obtida usando técnicas de variáveis complexas [24].

O problema também é reduzido a um problema linear análogo e é resolvido numericamente por inversão de matriz. O autor utiliza ainda a teoria da média-efetiva, que é uma aproximação comum na física dos meios microscopicamente desordenados [23].

Na teoria da média-efetiva procura-se substituir os parâmetros microscópicos aleatórios por um certo valor médio, escolhido de forma que o campo produzido pelos parâmetros médios é o mesmo que aquele produzido quando todos os parâmetros têm este valor médio [15].

A permeabilidade é dada como um fator dependendo da topologia local, da distribuição de tamanho microscópico e da topologia global da rede.

Quiblier [25] desenvolve uma simulação em três dimensões do meio poroso e obtém um modelo geometricamente realístico e completamente determinado. Assume que uma seção fina de um material poroso pode ser caracterizado por duas funções: uma função distribuição de diâmetros de poros e uma função de auto-correlação. O modelo permite a análise de aplicações estáticas e dinâmicas ligadas ao meio poroso e seu manuseio está limitado à complexidade ou não das funções que caracterizam o meio.

Yanuka e outros [26] utilizam um modelo tridimensional de meio poroso e subsequentemente geram propriedades topológicas e geométricas de vários meios porosos. O modelo consiste da intersecção de elipsóides colocados aleatoriamente num espaço limitado. O autor [27] combina as distribuições de tamanho de poro obtidas com resultados da teoria de percolação, para calcular as curvas de pressão capilar nos processos de drenagem e embebição e para prever a curva de histerese capilar [28]. Na simulação da drenagem e da embebição leva em conta o mecanismo de aprisionamento de um fluido por outro (sistema água-ar).

Saliba [29] adota uma estrutura cúbica, cujos vértices são ocupados pelos sítios e os lados pelas ligações. Os sítios e as ligações são elementos cilíndricos caracterizados pelos diâmetros D_s e D_l respectivamente, obedecendo uma correlação entre eles,

$$D_{si} = \lambda_i \cdot D_{li}, \quad (1.13)$$

onde λ_i representa a razão entre o diâmetro D_{si} dos sítios da classe i e o diâmetro D_{li} das ligações da classe i e é função de i (classe de diâmetros).

As características morfológicas da distribuição de volume dos poros do espaço poroso são determinadas a partir das isotermas experimentais de adsorção e de dessorção, assim como da curva de injeção de mercúrio. Cada elemento de rede, sítio ou ligação, representa um feixe de poros. A acessibilidade de cada poro dentro da rede é levada em conta. Para Saliba, [29], todos os feixes de poros têm o mesmo volume. Desse modo o feixe de cilindros paralelos, que representa cada sítio ou ligação, é mais numeroso quando o diâmetro é menor. Assim as proporções em volume identificam-se às proporções em número: a fração em volume dos sítios de classe inferior a k é $X_s p_{sk}$ e a fração em volume das ligações de classe inferior a k é $(1-X_s) p_{lk}$. Neste caso p_{sk} representa a proporção dos sítios das classes de índice inferior a k , p_{lk} representa a proporção de ligações das classes de índice inferior a k e X_s representa a proporção de volume ocupado pelos sítios.

Utilizando um procedimento iterativo, Saliba [29] chega à uma distribuição final de poros, conforme mostra a Figura 1.13. O método de Saliba não fixa, a priori, qualquer forma para a distribuição dos diâmetros, procedimento comum encontrado em outros trabalhos [12,13,14]. O método iterativo consiste em otimizar os parâmetros de cálculo (X_s, K, C', λ_k) de forma obter o laço de histerese nas isotermas de adsorção e dessorção o mais próximo possível das isotermas experimentais.

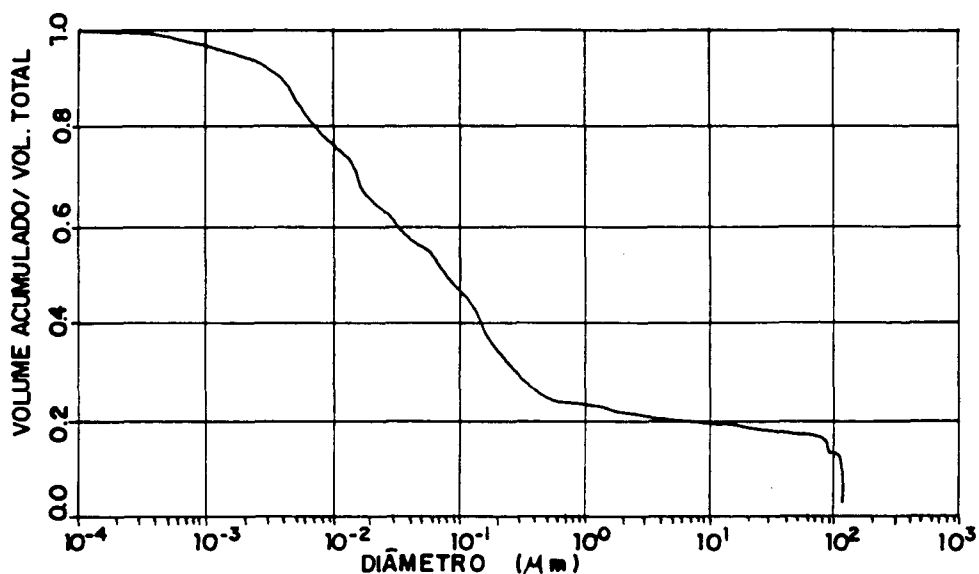
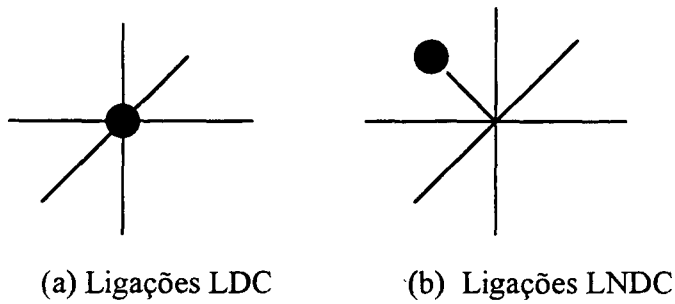


Figura 1.13 - Distribuição de volume de poros adotada por Saliba [29].

Para obter a distribuição completa de diâmetros de poros, Saliba, [29], faz uma hipótese sobre a razão entre os diâmetros de sítios e ligações, λ_k , Equação (1.13). Este procedimento é aplicado com a finalidade de completar, dentro do domínio dos poros de diâmetro superior a 500 Å, a distribuição em volume de diâmetros obtida a partir das isotermas de adsorção e dessorção. O mesmo valor de X_S e a mesma função λ_k , usados nas isotermas, foram também adotados para interpretar a porosimetria a mercúrio.

Na Figura 1.13 mostra-se a distribuição final de poros usada por Saliba, calculada em parte pela porosimetria a mercúrio (diâmetros superiores à 500 Å) e a outra parte (diâmetros inferiores à 500 Å) pelo tratamento das curvas de adsorção e dessorção. Esta distribuição contém uma proporção de sítios de 0,60 ($X_S=0,60$) e a razão de diâmetros entre sítios e ligações, λ_k , varia logaritmicamente com o diâmetro das ligações de 15 à 1. O autor utiliza dois tipos de conexões dos poros dentro da rede: ligações diretamente conectadas (LDC) e ligações não diretamente conectadas (LNDC),



As Figuras 1.14 e 1.15 mostram os resultados para a condutividade hidráulica. A curva mostra que a condutividade é praticamente função só do teor em água no interior do material, no caso da configuração em série, Figura 1.14. Por outro lado, para a configuração LDC, a condutividade é função, às vezes do teor em água e do processo de transferência, Figura 1.15. Saliba [29] adota o mesmo tipo de rede de Chatzis e Dullien [13,30], mas cada elemento da rede (sítio e/ou ligação) representa um feixe de poros. Este procedimento faz com que a importância dos poros pequenos seja reduzida durante a simulação dos processos de transferência.

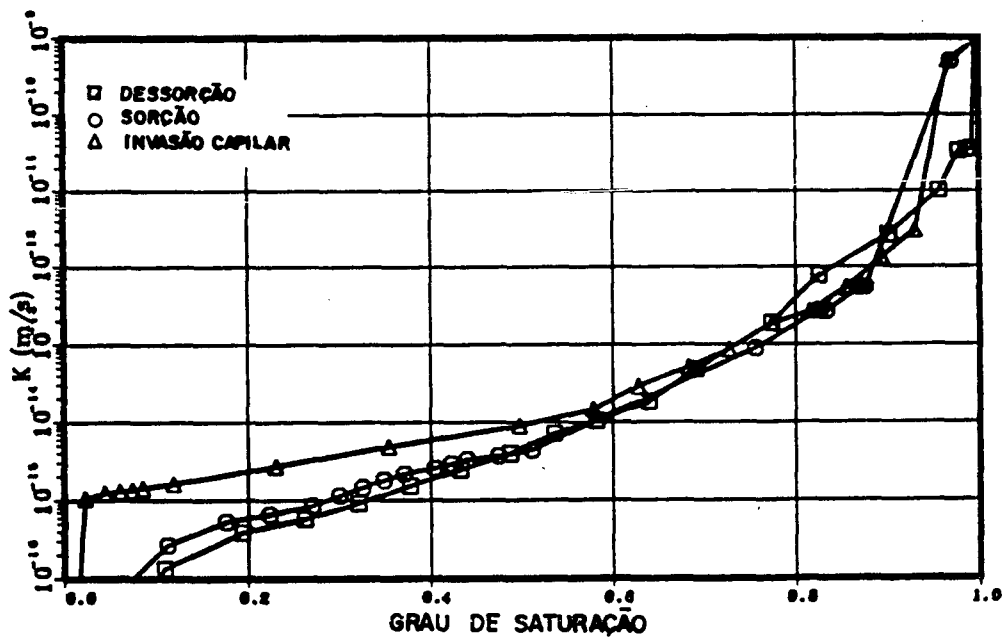


Figura 1.14 - A condutividade em função do processo simulado (configuração LNDC, [29])

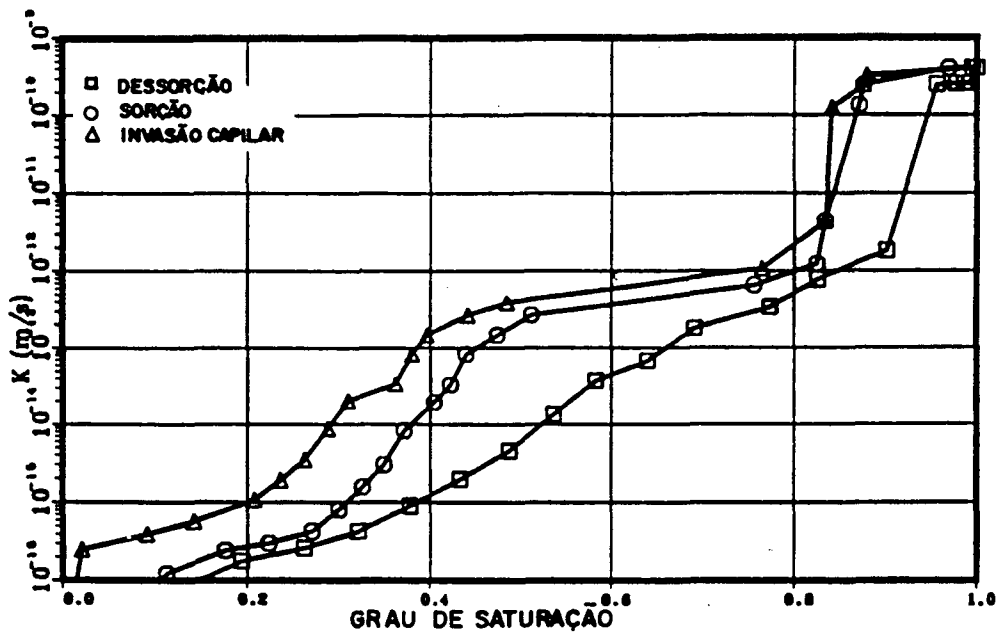


Figura 1.15 - A condutividade em função do processo simulado (configuração LDC, [29])

Os modelos da condutividade hidráulica mostram uma forma única da condutividade em função do teor em água, $K(\theta)$, onde a histerese se manifesta somente sobre as curvas de pressão capilar em função do teor em água, $p_c(\theta)$. Desse modo a configuração LNDC se adequa mais à modelagem de K .

1.2.2 - Distribuição de umidade em materiais porosos

Nesta seção mostra-se os trabalhos que estudam as características de pressão capilar. O uso de modelos de rede para o estudo das características de pressão capilar foi introduzido por Fatt [7] em 1956. Ele usa redes bidimensionais do tipo rede elétrica, Figura 1.3, onde dois nós adjacentes estão sempre conectados por um capilar de diâmetro uniforme.

Fatt [7] obtém curvas de pressão capilar seguindo, passo a passo, a progressão do fluido injetado através da rede, segundo à condição de pressão, $p_i = 2\sigma/r_i$ (ângulo de contato nulo). A rede é assumida estar inicialmente saturada e envolvida pela fase não molhante. Uma vez que

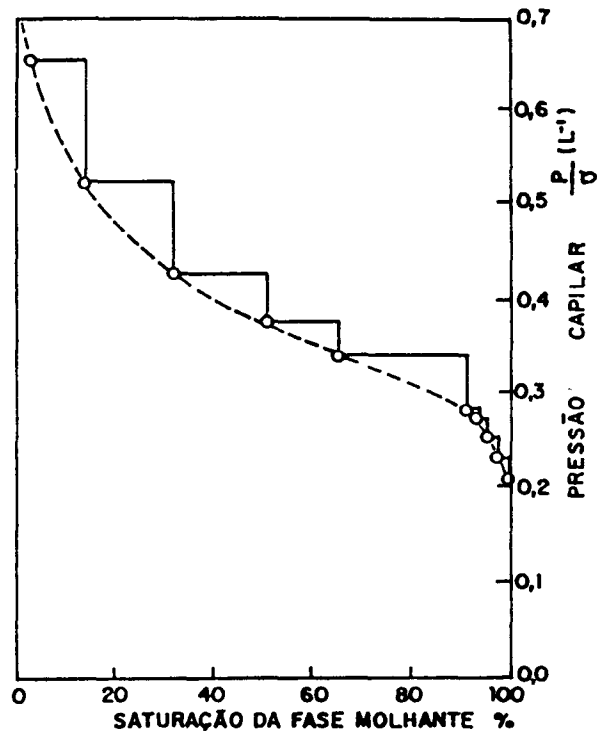


Figura 1.16 - Características da pressão capilar de uma rede triplo-hexagonal usando a distribuição da Figura 1.3-(b), [7].

todos os tubos estão interconectados e a fase molhante é assumida ser sempre contínua, uma conexão simples de um dos tubos à face de saída permite a expulsão da fase molhante. Na Figura 1.16 mostra-se a curva de drenagem de uma rede triplo-hexagonal. A lei correspondente das distribuições dos diâmetros é representada na Figura 1.4(a). A curva é dada passo a passo porque a distribuição dos raios é discreta.

Para uma dada distribuição dos raios dos tubos Fatt [7] conclui que a curva de pressão capilar não é muito sensível às mudanças no tipo de rede (variação de Z), Figura 1.17

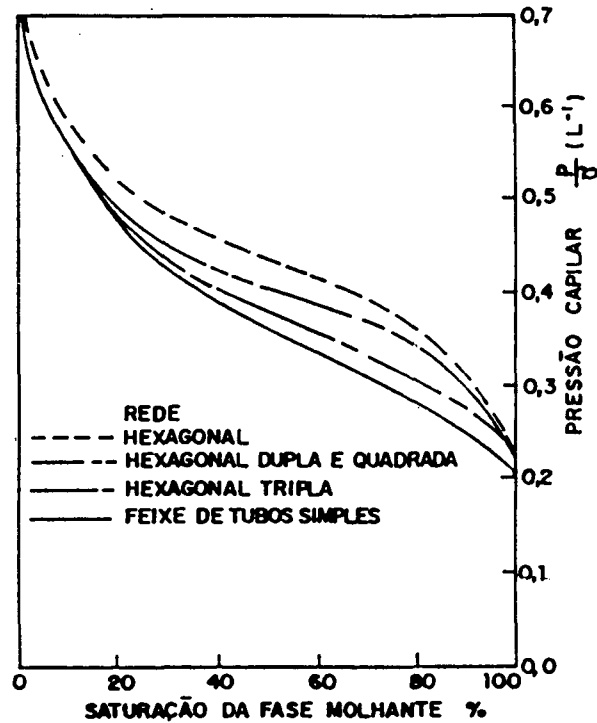


Figura 1.17- Características de pressão capilar para várias redes usando a distribuição da Figura 1.3 (b), [7].

A distribuição de raios de tubo influencia sobre a curva de pressão capilar. Desta forma, a curva de pressão capilar pode ser usada para estimar a distribuição de tamanho de poros de um meio poroso real.

Dodd e Kiel [10] modificam a rede sugerida por Fatt [7,8,9] a fim de permitir o aprisionamento do fluido molhante durante um processo de drenagem nos poros menores da rede. Os efeitos de gravidade foram desconsiderados para simplificar o problema. As tensões interfaciais nas interfaces fluido-fluido dentro da rede foram assumidas constantes. Com essas simplificações e suposições foi possível expressar a pressão capilar na maneira clássica como uma função do valor inverso do raio do poro. Os autores observam a influência do número de coordenação da rede e também da distribuição aleatória dos tamanhos dos poros, Figura 1.18 e 1.19.

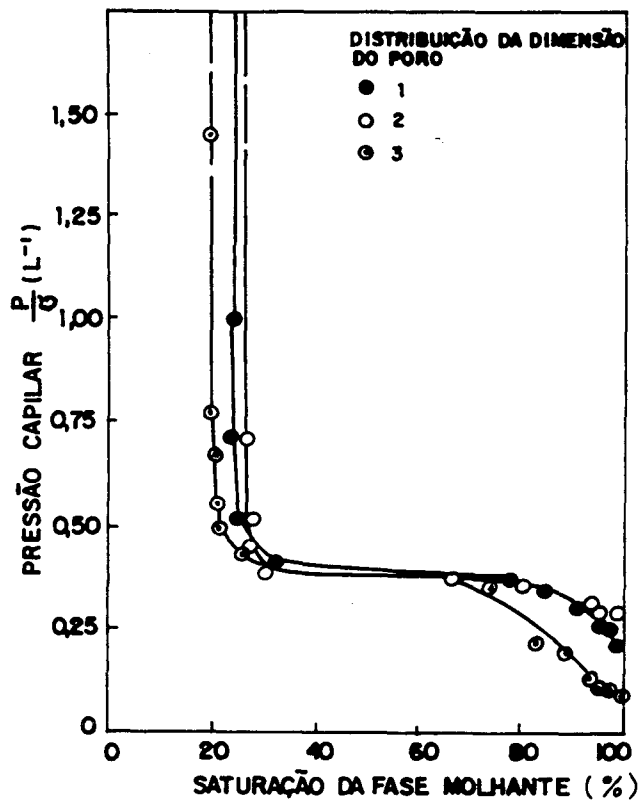


Figura 1.18 - Curvas de pressão capilar mostrando o efeito da distribuição de tamanho de poros [10].

Na Figura 1.18 mostra-se o efeito de três distribuições de tamanho de poros para um modelo com número de coordenação seis. O efeito do número de coordenação para as distribuições de tamanho de poros dos tipos 1 e 3 são apresentadas na Figura 1.19 (a) e (b). O efeito do número de coordenação não é facilmente separável do efeito de outros parâmetros, tais como, o tipo de distribuição de diâmetros e a relação comprimento/diâmetro dos tubos. É necessário somente uma variação pequena no tamanho e disposição dos poros na obtenção da configuração geométrica para um dado número de coordenação da rede. O efeito predominante mostrado na Figura 1.19 acredita-se ser resultado das mudanças no número de coordenação. Comparando dois tipos de distribuições de tamanho de poros, usados na geração da rede, houve

uma maior sensibilidade à distribuição da rede, nos modelos tendo um menor número de coordenação. As distribuições de tamanho poros usadas estão associadas àquelas citadas por Fatt [7], onde a distribuição do tipo 1 representa uma faixa estreita de diâmetros de poro, a distribuição tipo 2 representa uma faixa intermediária e a distribuição 3 representa uma faixa mais ampla de diâmetros de poros.

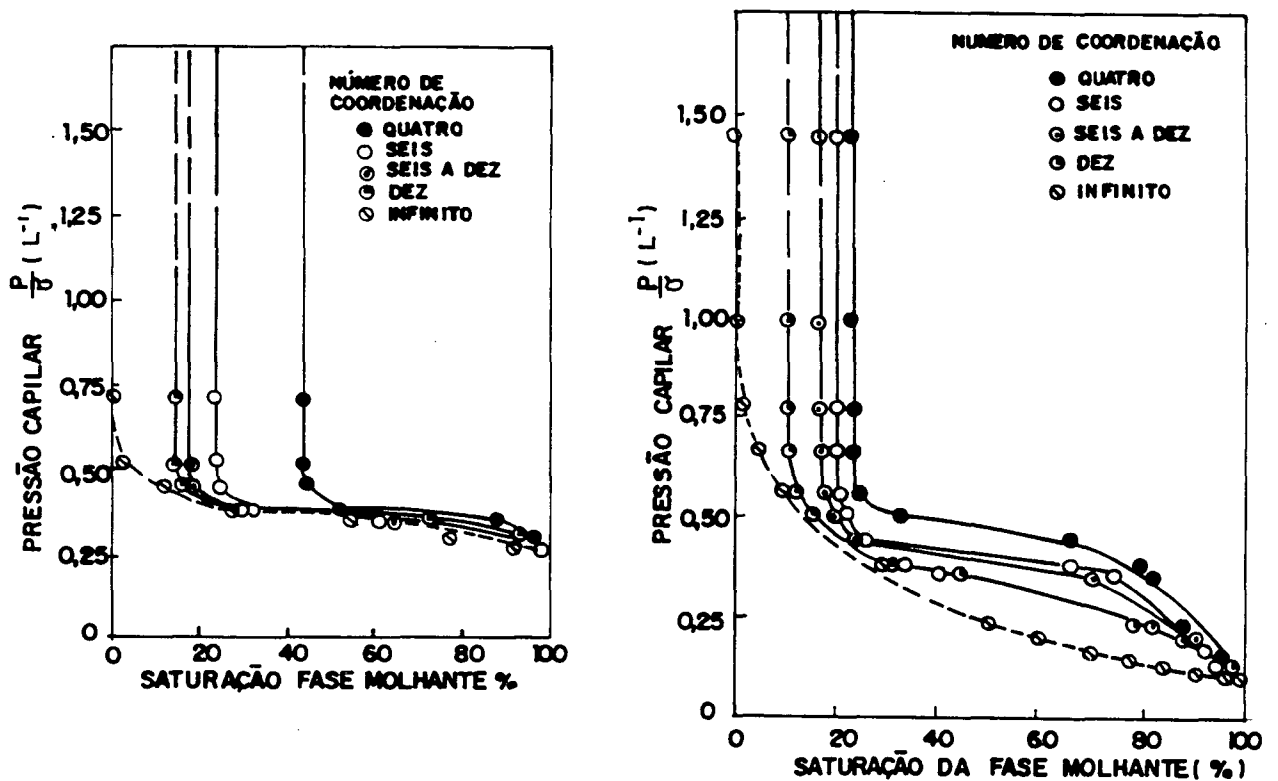


Figura 1.19 - Curvas de pressão capilar mostrando o efeito do número de coordenação. (a) distribuição tipo 2, (b) distribuição tipo 1, [10].

Usando os resultados da análise da rede, Chatzis e Dullien [12] simulam a curva de pressão capilar, assumindo várias relações entre l_j (comprimento do poro) e D_j (diâmetro do poro), Figura 1.20.

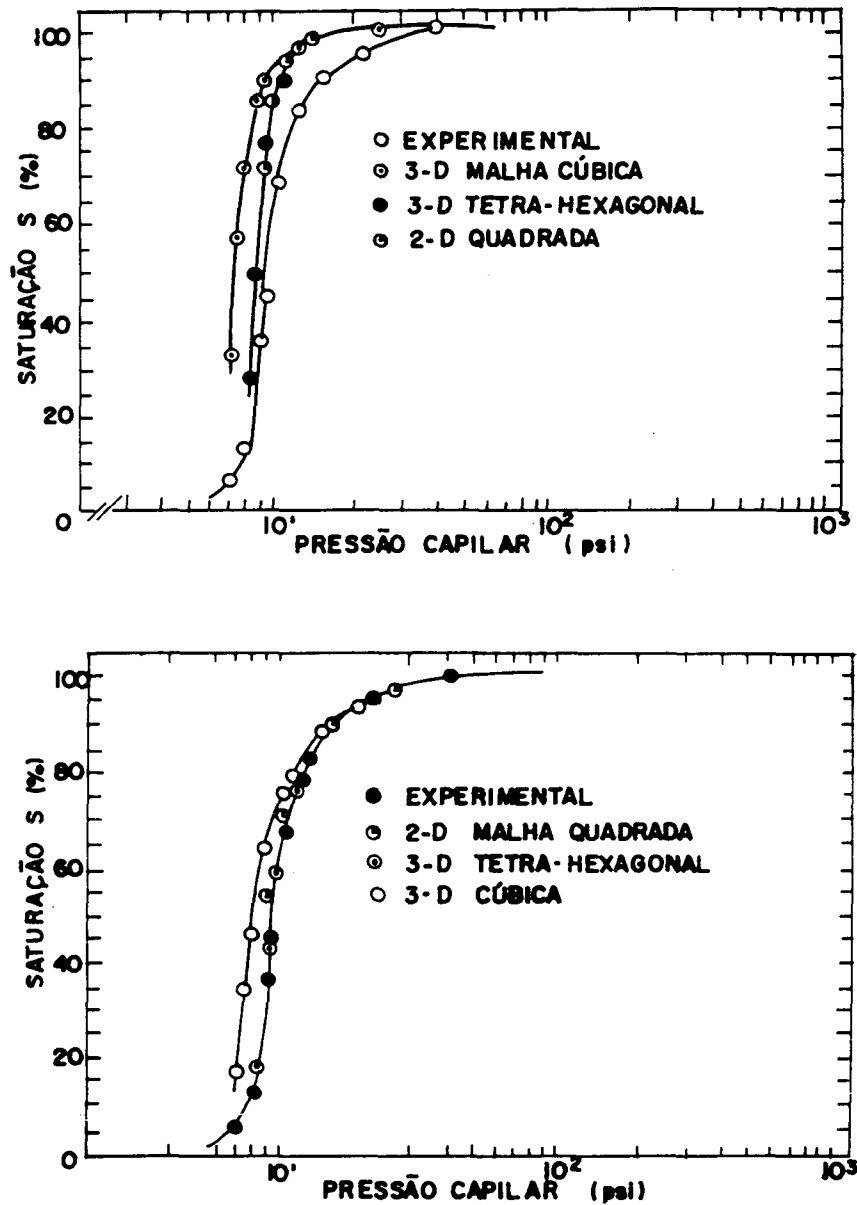


Figura 1.20 - Comparação da curva de pressão capilar com a curva experimental de um arenito - Berea, [12]. (a) para $S_j^o \propto D_j^3$, (b) para $S_j^o \propto D_j$.

Para uma relação $l_j / D_j = \text{constante}$, o volume do capilar e também S_j^o (fração em volume dos poros de $D = D_j$ na amostra) são proporcionais a D_j^3 . As curvas de pressão capilar previstas para as redes bi e tridimensionais para este caso mostram discordâncias com os dados experimentais, Figura 1.20 (a). As curvas das pressões capilares simuladas estão ligeiramente acima das curvas experimentais. A utilização da rede na simulação do processo de invasão de uma

fase não molhante pode corresponder aos dados experimentais quando se assume que o segmento capilar é composto de garganta-cabeça-garganta. Para condição onde S_j° é proporcional à D_j , $S_j^\circ \propto D_j$, os dados simulados se mostram mais consistentes com os dados experimentais. Esta confrontação dos resultados teóricos com os resultados experimentais da injeção a vacuo de mercúrio em arenitos, Figura 1.20 (b), determina a lei que associa o volume de um poro a seu diâmetro.

O modelo de Singhal e Somerton [17] simula também as curvas de pressão capilar, Figura 1.21. O modelo usa técnicas diferentes para a distribuição de tamanho de poro e observa a influência do número de coordenação da rede sobre as curvas de pressão capilar. A distribuição de tamanhos de poros foi obtida da curva de pressão capilar para uma amostra consolidada de teflon e os demais parâmetros, como a tensão interfacial e as viscosidades foram escolhidos de forma que os dados de entrada do modelo coincidisse com os dados experimentais. Observa-se pela Figura 1.21 que o modelo, permitindo as suposições e aproximações em relação ao

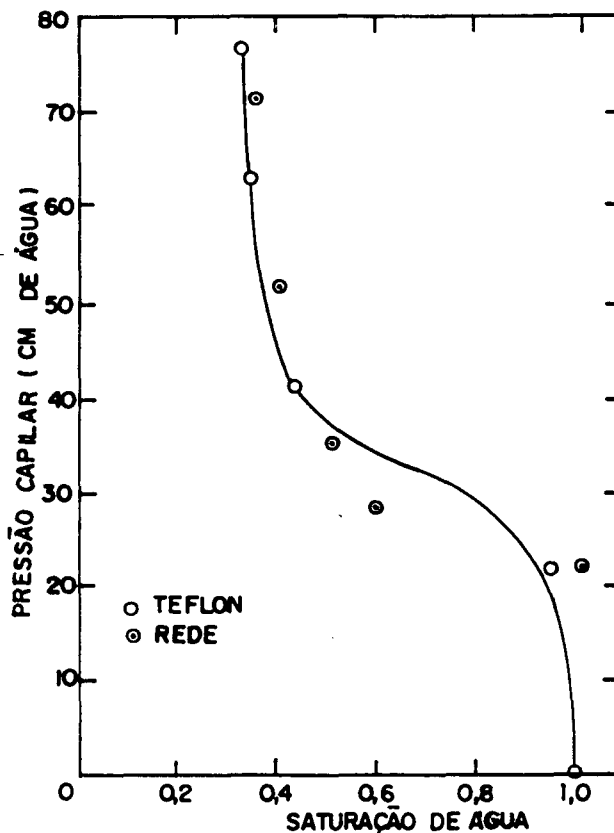


Figura 1.21 - Curvas de pressão capilar, [17].

mecanismo de deslocamento e ao fenômeno de aprisionamento de ar, simula com sucesso a curva pressão capilar no caso do teflon.

Para obter as curvas de pressão capilar e observar os fenômenos de transferência no interior do meio poroso, simultaneamente, Lenormand [21], utiliza micromodelos, de material transparente e representa tamanhos diferentes de redes de canais, Figura 1.22.

A Figura 1.22 mostra as curvas de pressão capilar obtidas para micromodelos de tamanhos diferentes. As curvas de pressão capilar em função do grau de saturação evidenciam a influência do tamanho da rede sobre a forma das mesmas.

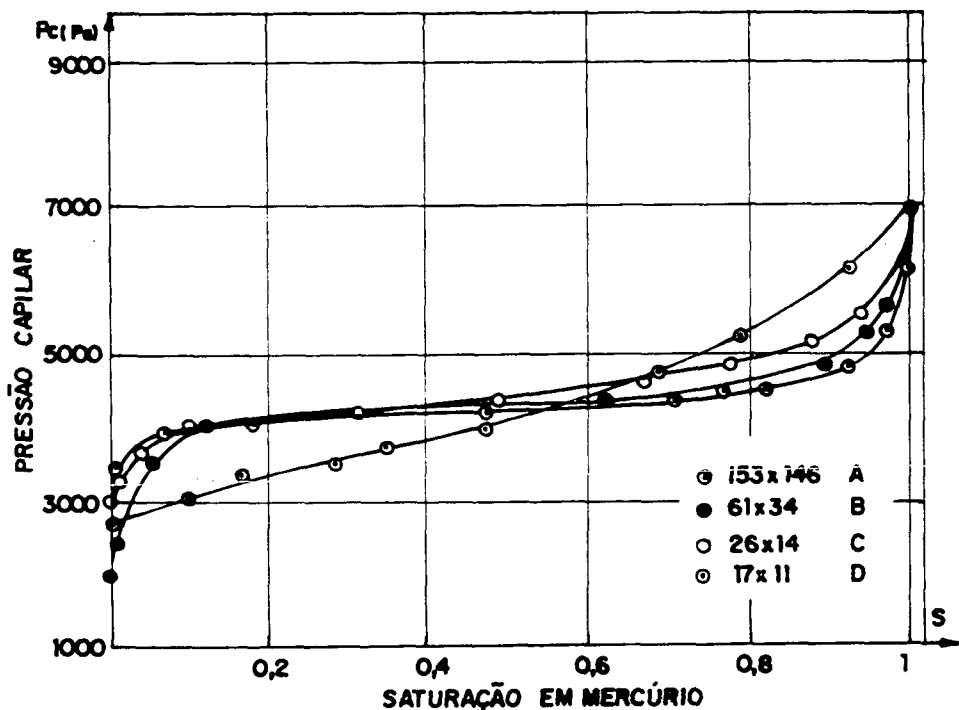


Figura 1.22 - Resultados experimentais da injeção de mercúrio dentro dos micromodelos,[21].

Lenormand [21] obtém resultados de drenagem e embebição para uma rede plana bidimensional, Figura 1.23. A experimentação mostra que no final da drenagem grande parte do

fluido molhante permanece aprisionada na rede. O autor admite dois tipos de deslocamento para a fase molhante durante a drenagem. O fluido pode se deslocar pela seção inteira dos dutos quando há um caminho contínuo até a face de saída ou por um fluxo contínuo ao longo dos cantos (fluido não molhante estagnado num nó da rede evita a continuidade de líquido nos dutos cheios com fluido molhante), Figura 1.24. Esta última forma de fluxo é geralmente muito lenta para permitir que um ou muitos dutos se esvaziem de forma que a maioria deles permanece cheia no final do processo.

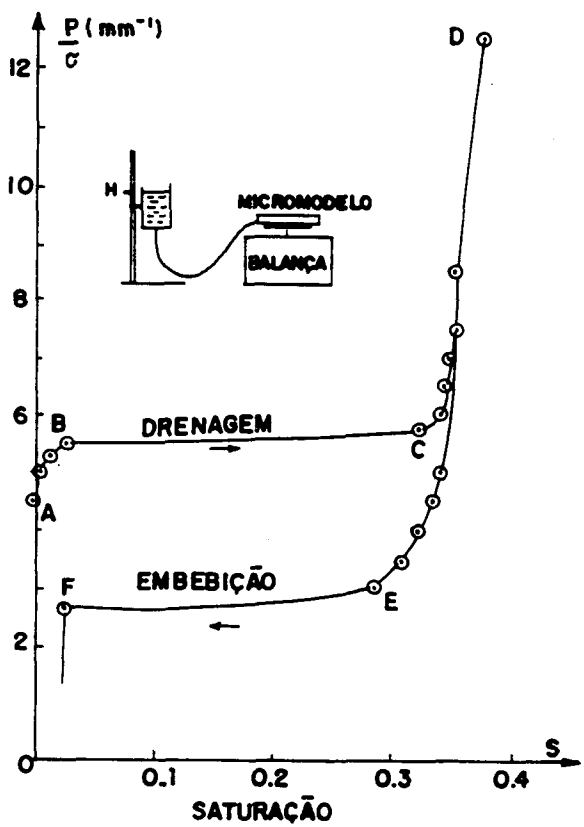


Figura 1.23 - Curva de pressão capilar. A pressão é deduzida do nível de fluido molhante e a saturação é medida pelo molhamento contínuo, [38].

As curvas de embebição e drenagem evidenciam o fenômeno da histerese. As causas deste fenômeno podem estar associadas a uma histerese sobre as pressões, tipo *ink-bottle* (diferença entre a pressão na ida durante o processo de drenagem e a pressão na volta durante o processo de

embebição) e a uma histerese sobre a saturação em função do aprisionamento de líquido não molhante.

Na Figura 1.25 mostra-se os resultados experimentais obtidos pelo autor e as curvas teóricas calculadas em função da dimensão da rede e do número de canais dentro dos micromodelos. Os resultados mostram que o tamanho da rede tem uma influência muito forte sobre a forma das curvas de pressão capilar. Os patamares sucessivos da curva teórica relativas ao feixe de capilares correspondem às 7 classes de canais. As redes menores apresentam um comportamento mais próximo do feixe de capilares mostrando que redes pequenas têm um comportamento bastante diferente das redes infinitas. Mesmo a maior rede simulada, curva 1, se afasta da curva de percolação para uma rede infinita.

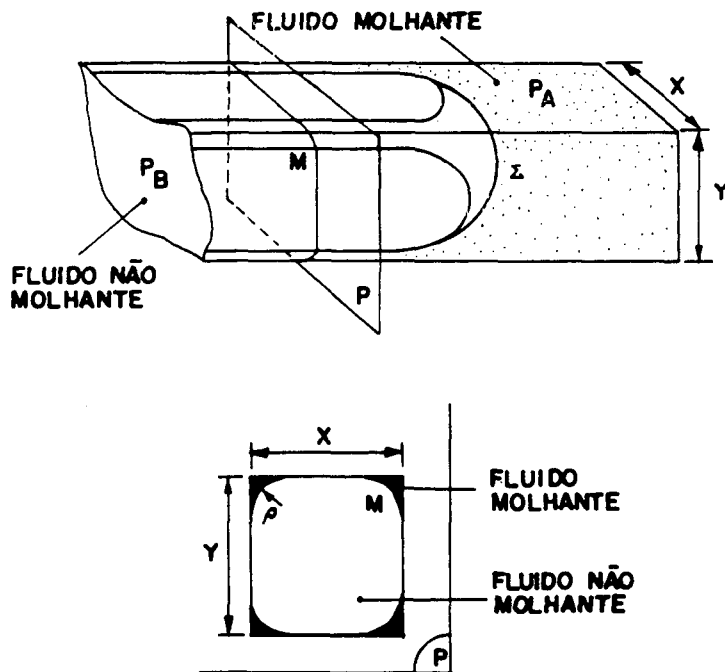


Figura 1.24 - Situação do menisco num duto de seção retangular quando

$$p_c \text{ é a pressão limite } p_p = 2\sigma (1/x + 1/y), [38].$$

Para redes constituídas de canais de seção não circular, Figura 1.24, o cálculo da pressão é bastante difícil [33,36,38], e o fluido não é inteiramente deslocado, ficando uma camada ao

longo das bordas do canal. Nesta linha destacam-se também os modelos propostos por Payatakes e outros, [31,32,34,35], que incluem o caráter convergente-divergente dos canais de fluxo, a dimensão e orientação aleatórias dos poros e constrições, Figura 1.26.

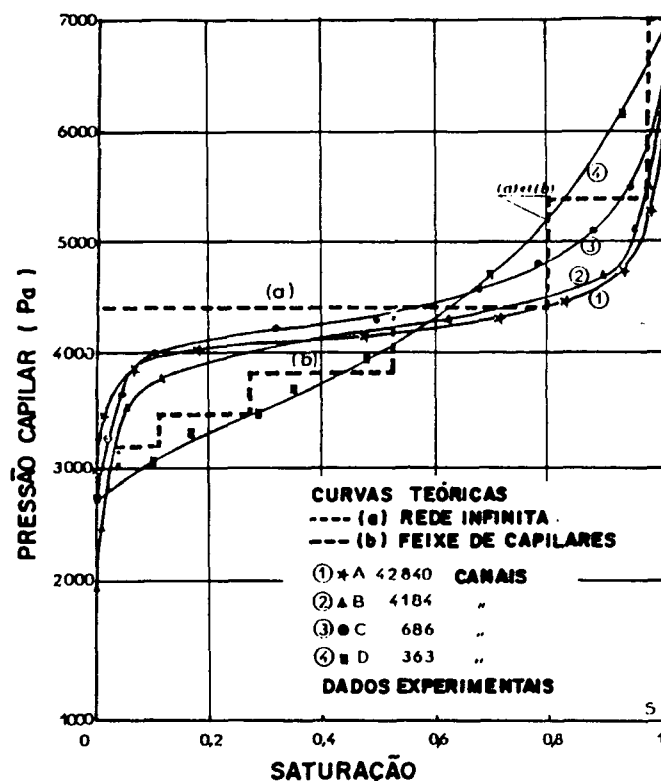


Figura 1.25 - Curva de pressão capilar. Injeção de mercúrio dentro dos micromodelos de diferentes tamanhos. Comparação entre os resultados teóricos e experimentais, [21].

1.2.3 - Modelagem da difusividade mássica.

Saliba [29, 30] simula a migração isotérmica de umidade por difusão de vapor e escoamento de líquido simultâneos utilizando uma rede de sítios e ligações, como modelo representativo da argamassa. O autor simula os processos de sorção e dessorção e compara com resultados experimentais de drenagem e embebição, Figuras 1.27 à 1.34.

Na Figura 1.27 mostra-se as curvas para o coeficiente de transferência D_h em função do grau de saturação para os processos de sorção e dessorção. É mostrado a influência da posição aleatória dos sítios e ligações e das configurações utilizadas, ligando sítios e ligações dentro da rede.

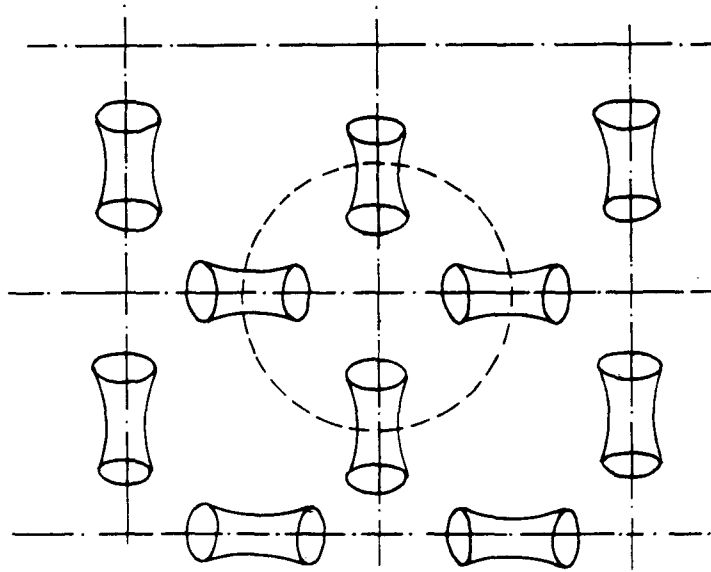


Figura 1.26 - Elementos convergente-divergentes constituindo uma rede, [34].

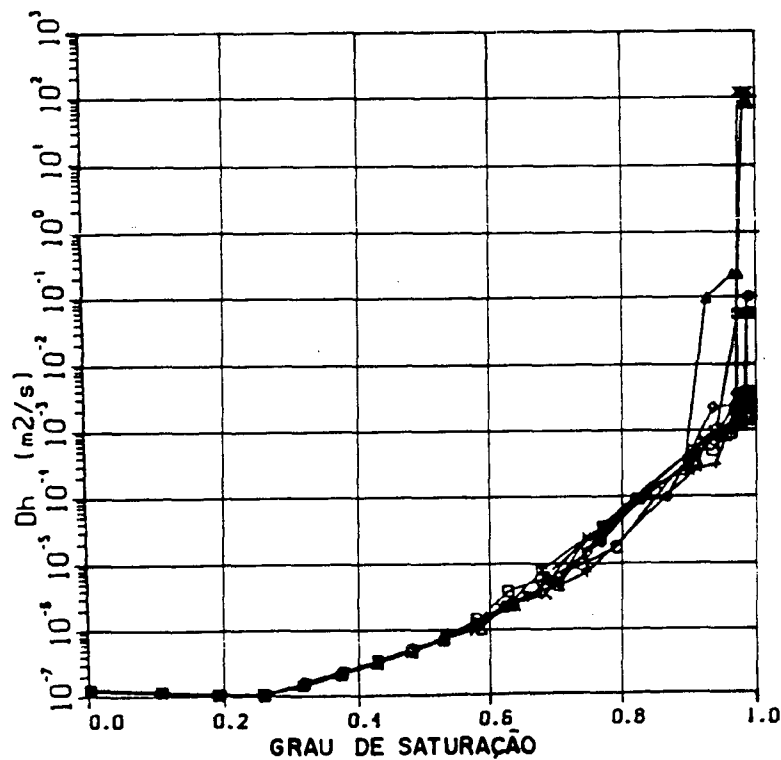


Figura 1.27 - Efeito da escolha aleatória sobre os coeficientes de transferência.

(a) dessorção - configuração LNDC, [29].

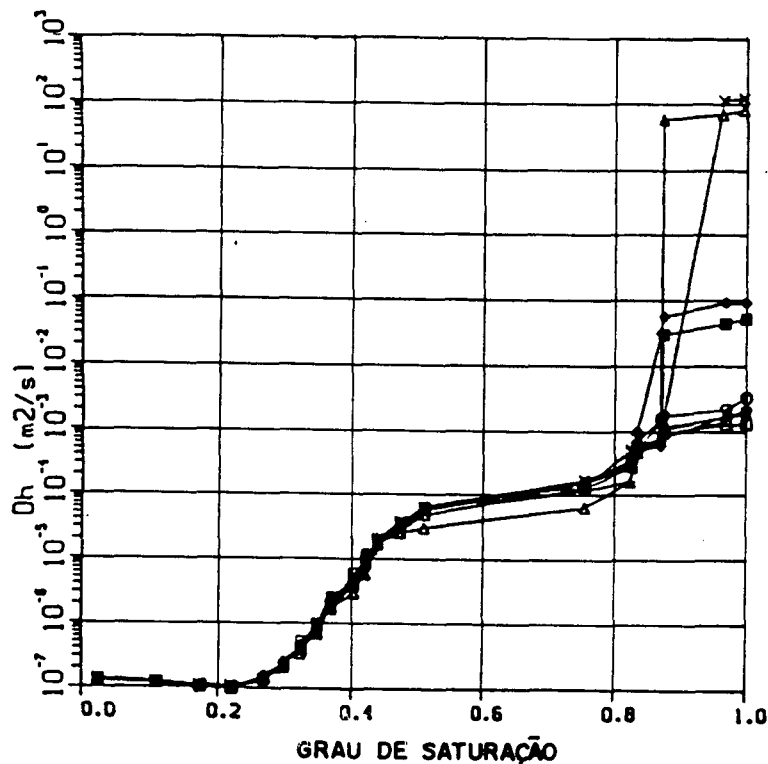


Figura 1.27 - Efeito da escolha aleatória sobre os coeficientes de transferência.

(b) sorção - configuração LDC, [29].

Saliba [29] calcula o coeficiente D_h , com a configuração LNDC, para redes de tamanho 10^3 e 20^3 , Figura 1.28. Os resultados mostram que o tamanho da rede tem pouca influência sobre as curvas do coeficiente de transferência D_h em função do grau de saturação, para a distribuição de diâmetros de poros e configuração geométrica utilizadas pelo autor.

Em relação aos mecanismos simulados, sorção e dessorção, os resultados obtidos mostram que não há muita diferença do comportamento das curvas do coeficiente D_h em função do grau de saturação, Figura 1.29.

No modelo de Saliba, [29], a rede simula todo o espectro de valores de diâmetros de poros do meio utilizado (500 Å à 200 μm). Cada elemento da rede (sítio e/ou ligação) representa um feixe de poros. Desse modo os poros pequenos não interferem individualmente durante a

simulação da sorção e dessorção e sim um feixe deles, designado por um diâmetro característico. Com este procedimento o autor obtém as curvas dos coeficientes de transferência K e D_h em função do grau de saturação, mostrando uma evolução relativamente branda.

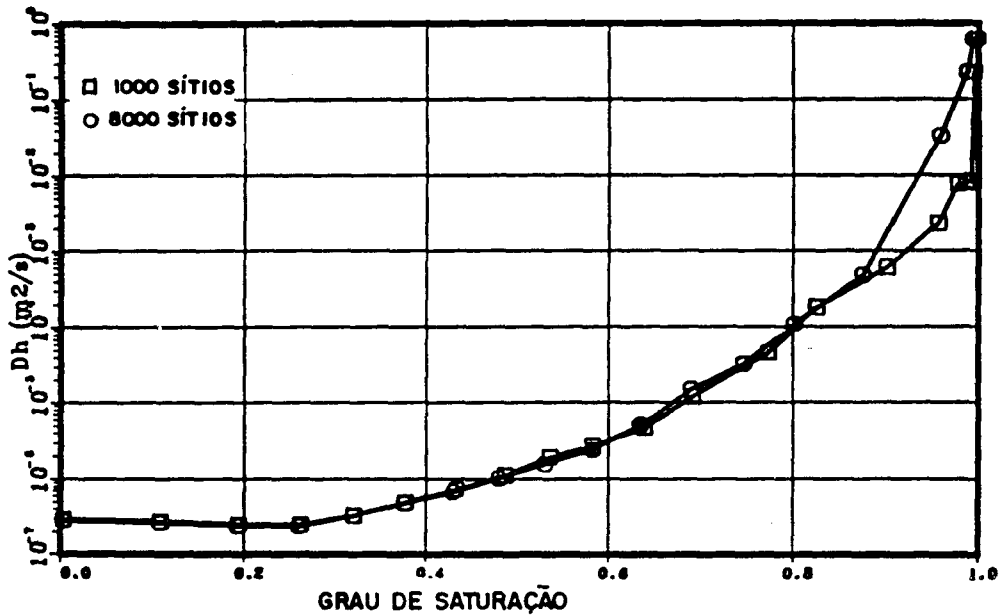


Figura 1.28 - Efeito do tamanho da rede sobre o coeficiente de transferência em dessorção à 45°C, [29].

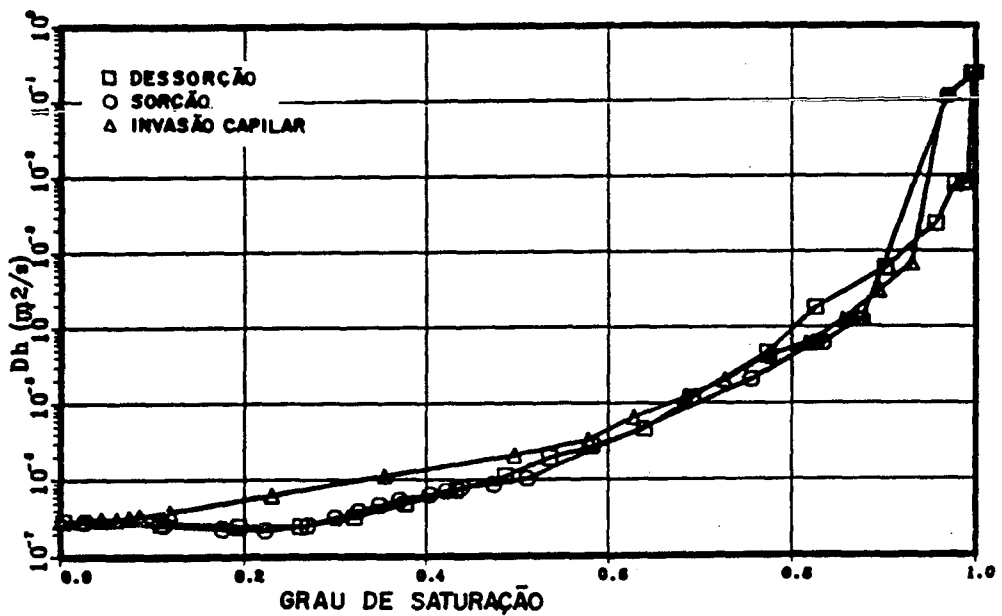


Figura 1.29 - O coeficiente de transferência em função do processo simulado (configuração LNDC), [29].

Em todas as curvas de K e D_h observa-se uma maior variação com o grau de saturação na região da saturação. Este fato pode ser explicado pela presença de classes de poros grandes comparado às demais classes de diâmetros.

Para tentar isolar a contribuição da difusão de vapor e da migração de líquido, Saliba [29] calcula o coeficiente D_h anulando o coeficiente de difusão de vapor. A Figura 1.30 mostra o coeficiente D_h comparado a um outro coeficiente D_{hl} , representando somente a migração de líquido. Até um grau de saturação de 0,6 a contribuição da fase líquida é nula. De acordo com Saliba isto possivelmente ocorre devido a uma mobilidade reduzida do líquido dentro dos poros pequenos, sendo necessário atingir um grau de saturação mais elevado para que se formem outros caminhos contornando os poros pequenos e o líquido possa se deslocar.

No entanto, isto não fica bem claro uma vez que para o autor, cada classe de diâmetro representa um feixe de poros, com a mesma proporção em volume na rede, reduzindo assim a importância dos poros pequenos. Além disso o ponto de percolação na rede ocorre após as 6 primeiras classes, grau de saturação em torno de 0,40, indicando a continuidade da fase líquida na rede. Desse modo após alcançado o limite de percolação os poros já permitem o deslocamento da fase líquida.

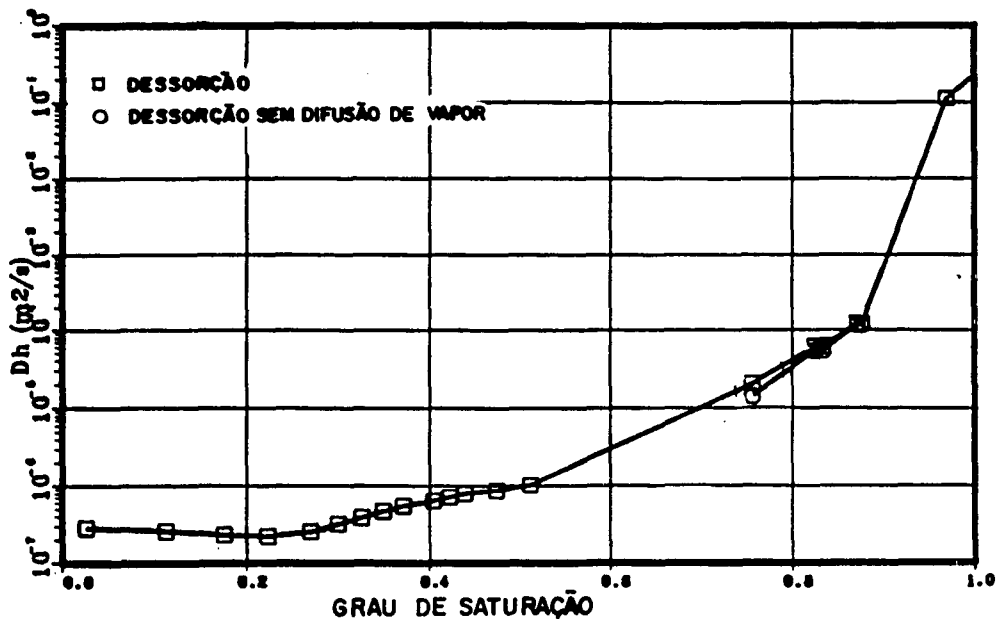


Figura 1.30 - Influência da difusão de vapor - configuração LNDC.

(a) dessecção, [29].

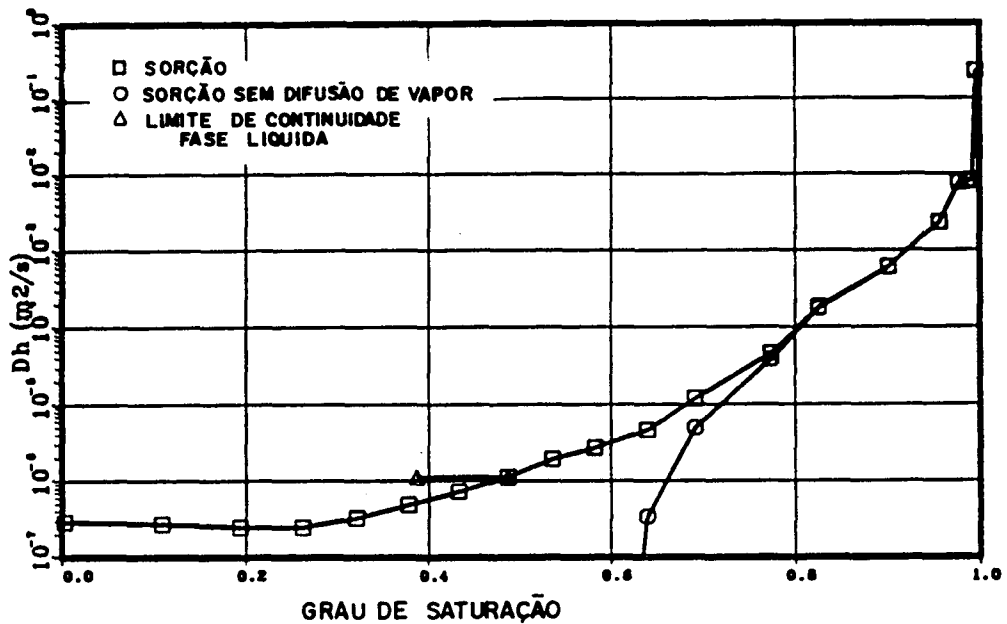


Figura 1.30 - Influência da difusão de vapor - configuração LNDC.

(b) sorção, [29].

Saliba [29] examina a contribuição aditiva das duas fases calculando um novo coeficiente D_{hv} . O coeficiente D_{hv} representa a contribuição da difusão de vapor e é calculado anulando a condutância dos poros ocupados pela água capilar. Na Figura 1.31 mostra-se que a soma dos dois mecanismos, difusão de vapor e migração de líquido, fica abaixo da curva que representa o processo de difusão global, dentro de um grande domínio de saturação. Isto mostra a grande importância da interação entre as duas fases nos mecanismos de evaporação-condensação dentro dos poros cheios por água capilar. O processo de difusão global corresponde à contribuição da migração do líquido mais o vapor que muda de fase durante a ocorrência do fenômeno. Em função disso, o processo global torna-se maior que a soma dos dois fenômenos, difusão de vapor e migração de líquido, ocorrendo separadamente.

Observa-se uma boa concordância entre os coeficientes de transferência medidos e simulados em relação ao fenômeno de drenagem. A modelagem não é satisfatória para descrever

a embebição, considerada por Saliba como um fenômeno comparável a um processo de sorção ou a uma invasão capilar pura, dependendo se ocorre ou não condensação de vapor durante o processo de embebição (seção 4.2).

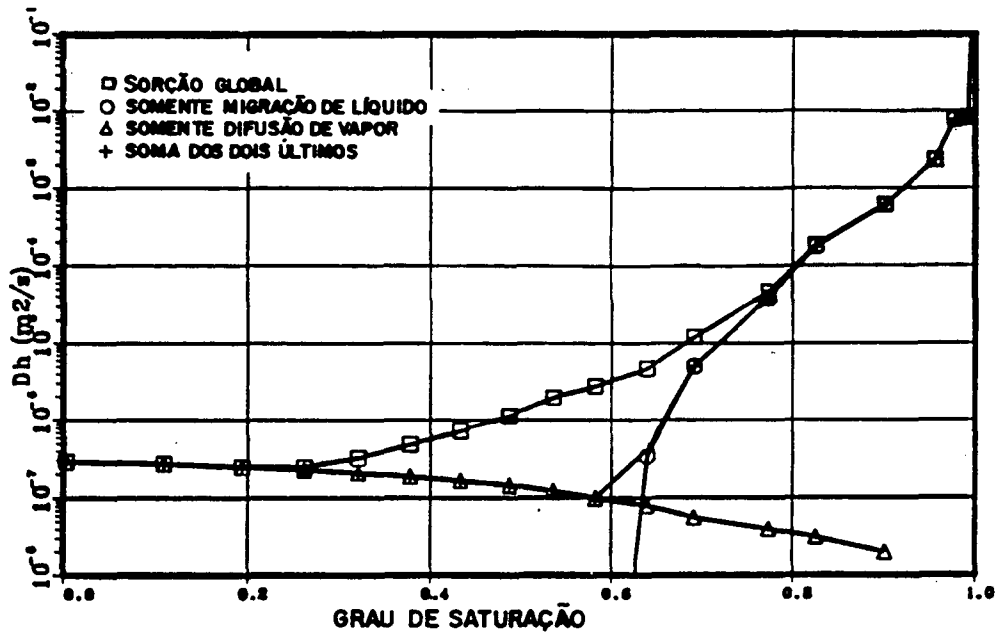


Figura 1.31 - Separação da difusão gasosa e transferência capilar
(configuração LNDC, [29]).

Saliba [29] compara os coeficientes de transferência obtidos por simulação com dados experimentais do coeficiente D_θ para drenagem e embebição. Para confrontar os resultados simulados e experimentais ele converte o coeficiente D_h no coeficiente D_θ pela expressão:

$$D_\theta = \frac{\rho_{vs}}{\rho_l} \frac{\partial h}{\partial \theta} D_h, \quad (1.14)$$

onde $\frac{\partial h}{\partial \theta}$ é obtida das isothermas de sorção e dessorção.

As curvas mostradas, na Figura 1.32, indicam uma boa concordância com os dados experimentais de drenagem, considerada pelo autor como um processo comparável ao processo de desorção, dentro da rede com configuração LNDC, Figura 1.32(c).

As Figuras 1.32(a) e (b) mostram que para a embebição não são obtidos resultados satisfatórios dentro da maior parte do domínio de saturação.

Saliba [29] simula um meio poroso com fissuras através de um modelo bidimensional plano, Figura 1.33 e estuda os processos transitórios de secagem, condensação e embebição.

Para obter uma comparação entre a simulação e os dados experimentais dos coeficientes de transferência, Saliba [29] calcula os coeficientes de transferência aparentes em relação aos perfis médios de saturação. Ao calcular os perfis hídricos médios o autor transforma o domínio

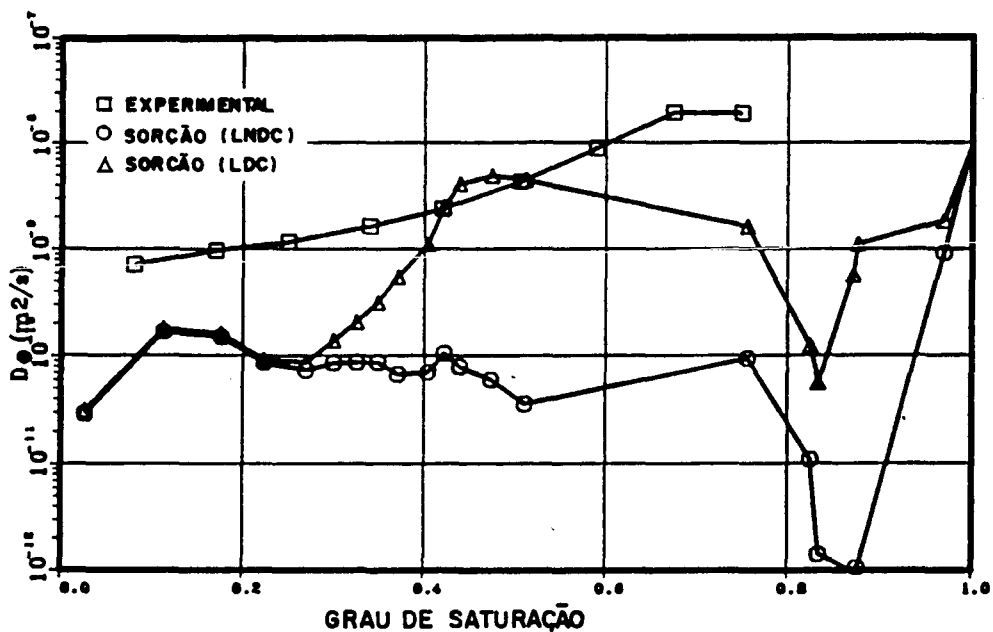


Figura 1.32 - Coeficiente de transferência, [29]

(a) experimental em embebição e calculado em sorção; difusividades mássicas calculadas por balanço de massa sobre perfis médios (densidade A, Figura 1.33)

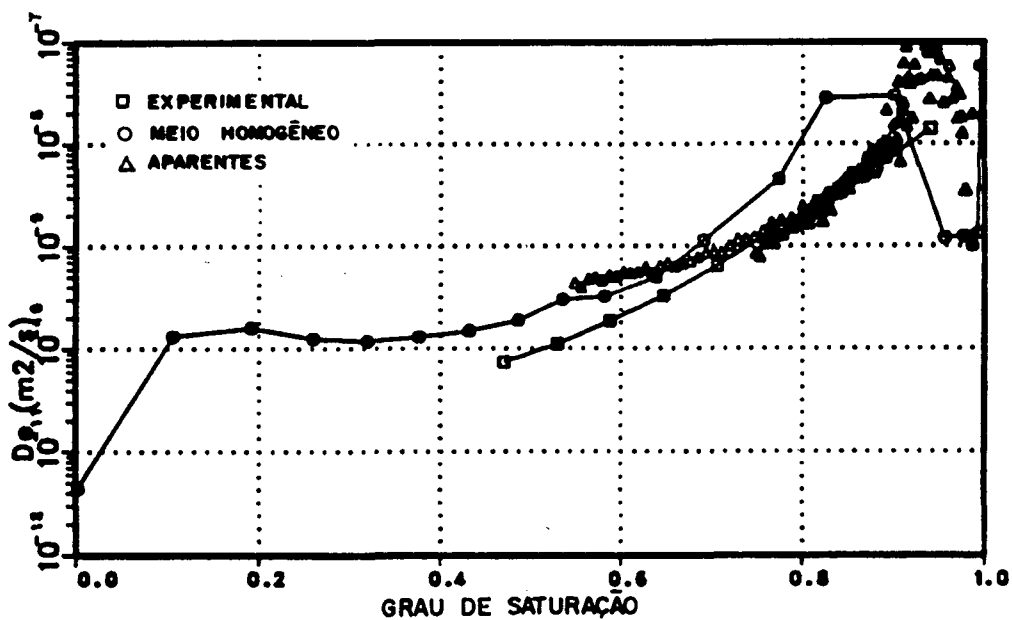
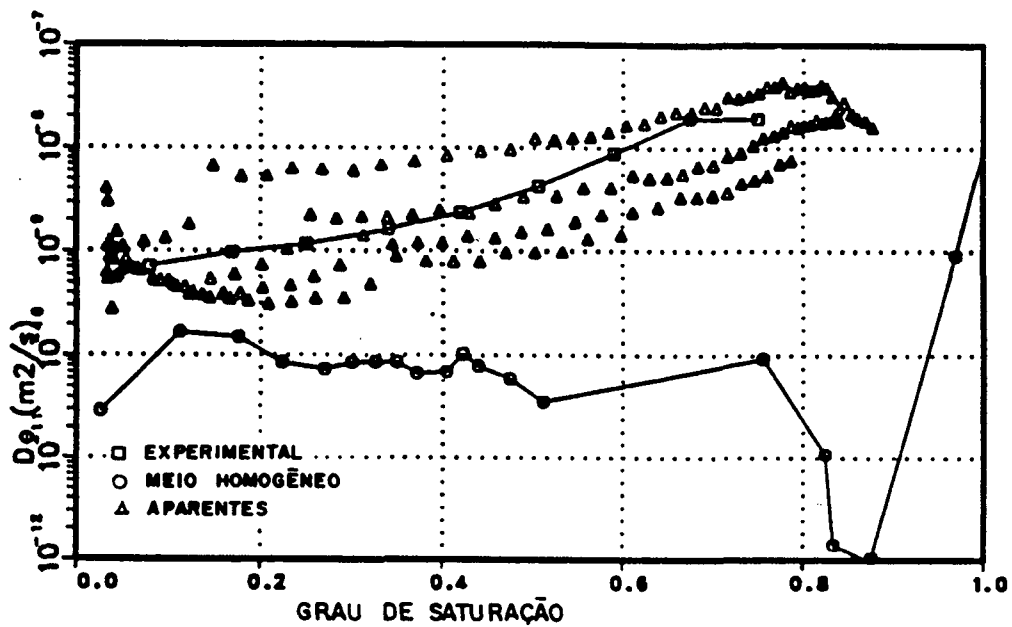


Figura 1.32 - Coeficiente de transferência, [29]

difusividades mássicas calculadas

por balanço de massa sobre perfis médios (densidade A, Figura 1.33)

(b) em embebição e (c) em drenagem.

2-D em um domínio 1-D. Os coeficientes de transferência de massa D_0 são denominados de aparentes pois, segundo Saliba, sua definição é justificável somente dentro de meios homogêneos. Novamente para a drenagem houve boa concordância com os resultados experimentais. Os coeficientes aparentes, Figura 1.32, são maiores que os coeficientes simulados considerando o meio homogêneo sem fissuras. Para a embebição os coeficientes aparentes resultam fortemente dispersos. Segundo o autor isto indica que o processo de embebição, num meio com fissuras, não pode ser representado por uma transferência numa dimensão, regida por uma equação de difusão unidirecional.

Saliba [29] obtém uma nova distribuição de diâmetros de poros excluindo os poros com diâmetros grandes ($D > 5 \mu\text{m}$). Os parâmetros de ajuste otimizados, tais como, os parâmetros da curva de água adsorvida (K, C', e_0), a fração de volume ocupado pelos sítios em relação ao volume total (X_s), a função ligando os diâmetros das ligações ao diâmetros dos sítios (λ_k) são mantidos. A partir desta nova distribuição, chamada de distribuição truncada, Figura 1.34 (a)

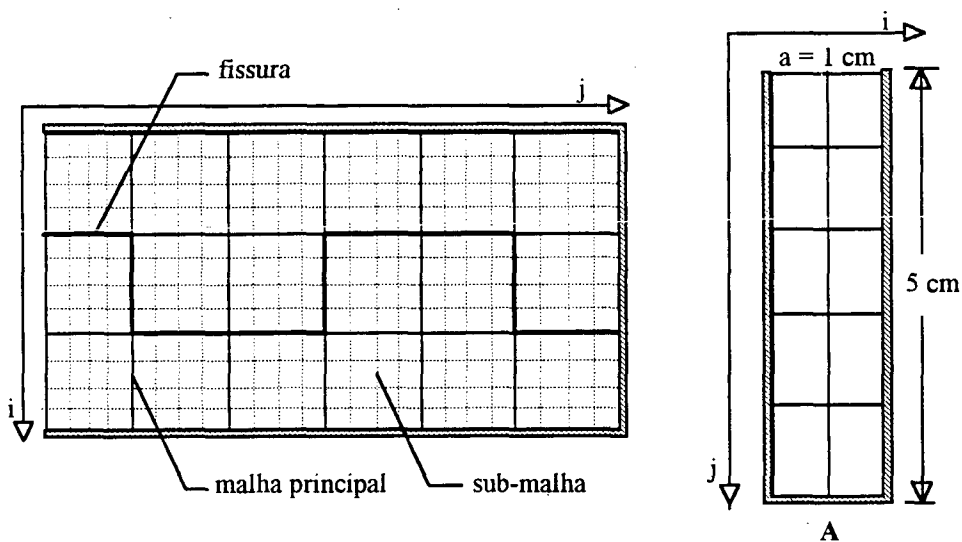


Figura 1.33 - Esquema do meio com fissuras usado por Saliba [29].

simula as isotermas de sorção e dessorção experimentais obtendo resultados coincidentes. Segundo Saliba isto era esperado pois a modificação foi somente em relação aos poros com

diâmetros grandes cujo efeito sobre as isotermas se manifesta somente à uma umidade relativa próxima de 100%. A modelagem do coeficiente de transferência D_{θ} mostra que a influência da exclusão dos poros grandes é importante somente próximo da saturação, Figura 1.34 (b).

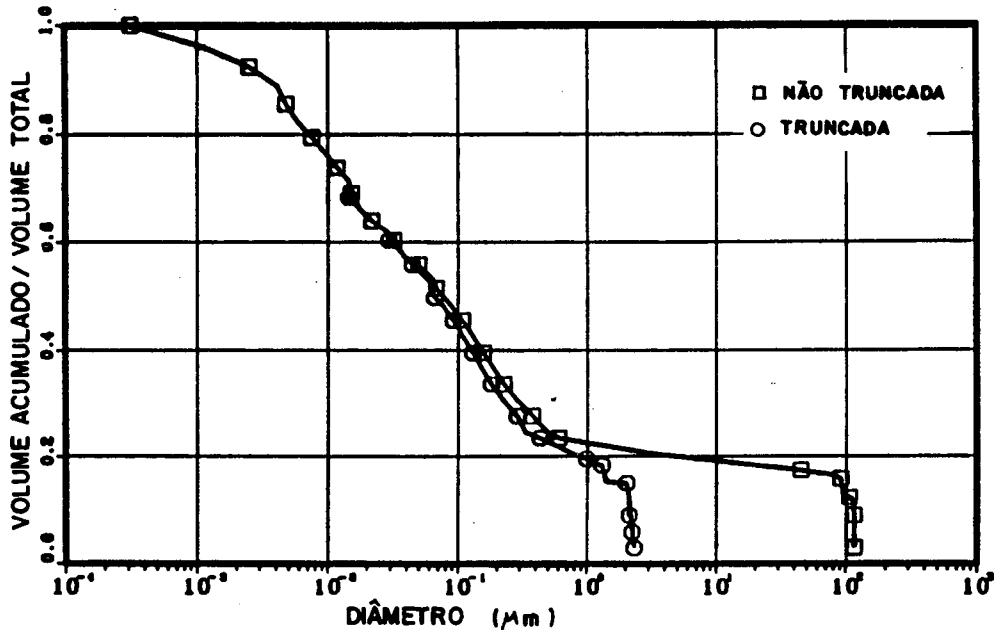


Figura 1.34. (a) - Distribuição de volume de poros truncada, [29].

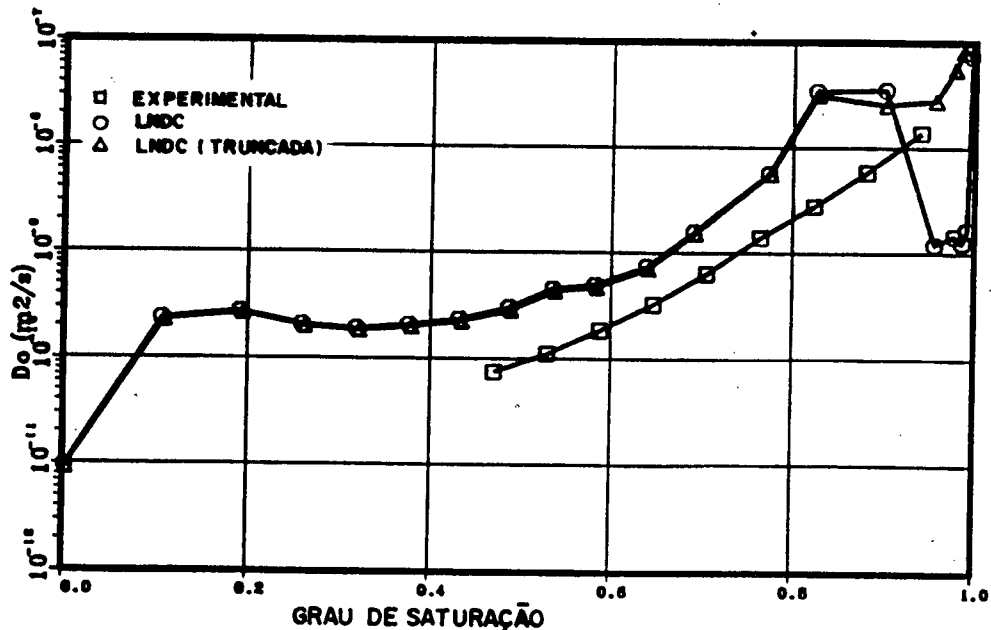


Figura 1.34. (b) - Coeficiente de transferência experimental e calculado em drenagem.

Efeito da distribuição de volume de poros truncada, [29].

2 - FUNDAMENTOS - TEORIA DA PERCOLAÇÃO

2.1 - Introdução

Os fenômenos físicos que ocorrem no interior dos meios porosos são profundamente influenciados pela estrutura porosa. A acessibilidade aos poros tem bastante importância dentro dos processos de transferência. A teoria da percolação associada a uma concepção de estrutura porosa é um instrumento que pode fornecer uma resposta a essas questões de acessibilidade dos poros.

A estrutura de um meio poroso contém uma fase vazia multiplamente conexa, chamada poros, no interior de uma matriz sólida completamente conectada. O conhecimento da estrutura da matriz sólida é indispensável para a determinação do comportamento mecânico do meio poroso. O conhecimento da estrutura do espaço poroso é necessário para estudar o comportamento do meio poroso em relação ao deslocamento de fluidos.

A estrutura porosa de um meio poroso real é bastante complexa limitando as possibilidades de estudo do comportamento de um fluido, através de simplificações e hipóteses convenientes com relação à forma, às dimensões e ao modo de conexão dos poros. Este fato mostra a importância do conhecimento de parâmetros geométricos tais como o grau de conectividade dos poros, a forma e o tamanho dos poros.

Na literatura encontra-se vários trabalhos onde o meio poroso é concebido através de uma rede geométrica (2-D ou 3-D) de elementos capilares interconectados [2,13,22,31,32]. Através destes modelos geométricos, representativos do meio poroso, estuda-se os fenômenos físicos que ocorrem no interior dos mesmos, seja por simulações numéricas tipo Monte Carlo [22,46,47] seja por aproximações estatísticas tipo percolação[13,21,26,27,28,34,35].

Dentro deste capítulo trata-se da teoria da percolação e de sua aplicação na modelagem dos fenômenos de fixação e de transporte de umidade no interior dos meios porosos.

2.2 - Definição e histórico

O termo percolação evoca a noção de difusão dentro de um meio aleatório parcialmente interconectado tal como um meio poroso. Matematicamente, no entanto, a teoria da percolação é mais difícil de ser tratada pois o espalhamento de um fluido num meio aleatório é influenciado por este meio. Em contraste, no processo de difusão este espalhamento do fluido depende das partículas fluidas e não do meio.

A teoria da percolação estuda as relações entre um grande número de pontos, na condição de que a ligação de cada um deles com seus vizinhos tenha carácter aleatório. Entretanto deve-se estabelecer um procedimento absolutamente determinado, por exemplo, mediante um gerador de números aleatórios dotado de propriedades previamente definidas.

Segundo Stauffer [101] a teoria da percolação historicamente surgiu com Flory e Stockmayer durante a Segunda Guerra Mundial para descrever como pequenas moléculas formavam grandes macromoléculas quando muitas ligações químicas existiam entre as moléculas originais. No entanto, o primeiro estudo de percolação é geralmente associado ao início do ano de 1954 pelo matemático Broadbent. Em 1957 Broadbent e Hammersley [81] utilizaram o termo processos de percolação para descrever a passagem de um fluido dentro de um filtro parcialmente obstruído, a partir do problema concreto da transferência de um gás através dos grãos de carbono de uma máscara de gás. A partir daí estes autores desenvolveram muitos trabalhos sobre a teoria da percolação e introduziram os conceitos da geometria e probabilidade para explicá-la. Esta teoria descreve as propriedades estatísticas do meio poroso.

A descrição matemática da percolação está associada à noção de limite ou valor crítico de um parâmetro descrevendo a conectividade. Esta noção pode ser ilustrada através de um exemplo simples [101]: considere uma mistura, dentro de uma caixa, de grãos condutores e não condutores. Os grãos são bastante pequenos e preenchem de forma compacta um volume grande. É evidente que, se uma mistura tem poucos grãos condutores ela comporta-se como um isolante.

Ao contrário, utilizando-se poucos grãos isolantes para um mesmo volume de mistura, obtém-se um meio condutor. Uma representação bidimensional disto é mostrado na Figura 2.1. Os círculos escuros são supostamente condutores e a corrente pode passar de um para o outro grão em contato. O caráter original da percolação reside no fato de que a passagem de um estado para outro se faz bruscamente para um valor preciso da percentagem de grãos condutores dentro da mistura. Esta percentagem fixa o limite de percolação.

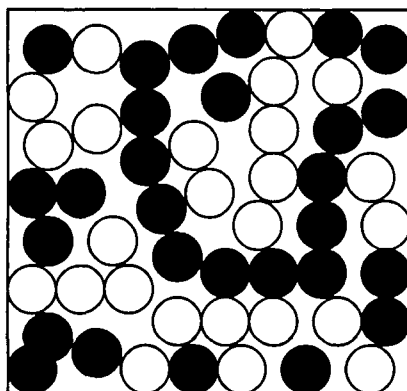


Figura 2.1 - Mistura de grãos condutores e não-condutores.

Segundo Hammersley[99], P. W. Anderson em 1958 foi o primeiro autor a apontar as implicações físicas da percolação. Os artigos de revisão de Shante e Kirkpatrick [90] e Kirkpatrick[15] têm servido de introdução à percolação a um número crescente de físicos interessados pelo problema, dentro destas duas últimas décadas [82-89,92-98,100,101]. Os fenômenos críticos em redes estudados ao longo de muitos anos por Domb [98] juntamente com seus colaboradores do Departamento de Física do King's College de Londres [82,83,84,87,92,93,97,99], têm contribuído em muito no desenvolvimento e aplicação dos processos de percolação. Dentro deste grupo destacam-se os trabalhos de M. F. Sykes [82,83,87,92], M. E. Fisher [84] e J. W. Essam [84,87,97]. Mais recentemente destaca-se a revisão de Stauffer [101], que se apoia sobre as estatísticas dos agrupamentos (ilhas)

percolantes, e a de Essam [97] que emprega os pontos de vista complementares expostos na revisão de Kirkpatrick [15,90], baseados em experiências numéricas e analógicas, explicando como os limites de percolação para redes simples podem ser obtidos matematicamente.

O interesse atual despertado pela teoria da percolação é justificado pelo fato de que percolação se trata de um conceito unificador [91] que permite estabelecer ligações entre os fenômenos físicos dentro de sistemas desordenados bastante diferentes. Assim, existe uma grande analogia entre o problema da permeabilidade de um meio poroso e o problema da passagem de corrente elétrica dentro de um meio desordenado.

A teoria da percolação tem aplicação em vários sistemas reais. No comportamento de ligas ferro-magnéticas diluídas: um bloco de ferro à temperatura ambiente estará imantado desde que haja um agrupamento bastante grande de átomos com seus momentos magnéticos alinhados. A substituição gradativa e aleatória de átomos de ferro por átomos de outro material não magnético forma um liga diluída. A partir de uma certa concentração crítica de átomos de ferro já substituídos o material perderá suas propriedades magnéticas, pois estará destruído o agrupamento de átomos de ferro. Na propagação de pragas numa plantação: dependendo da distância entre duas plantas vizinhas, do arranjo geométrico e de eventuais alternâncias entre plantas vizinhas de diferentes espécies, pode-se controlar a probabilidade de percolação de uma praga. Na filtragem do café, na prospecção do petróleo, no agrupamento de impurezas e defeitos de cristais, na química de polímeros, na colônia de bactérias, no escoamento através de meios porosos dentre outros.

2.3 - Terminologia

Na terminologia da teoria da percolação, rede ou grade representa um conjunto infinito de pontos chamados sítios. Estes sítios são interconectados entre si pelas ligações. O número de ligações deixando cada sítio representa o número de coordenação da rede, Z , Figura 2.2.

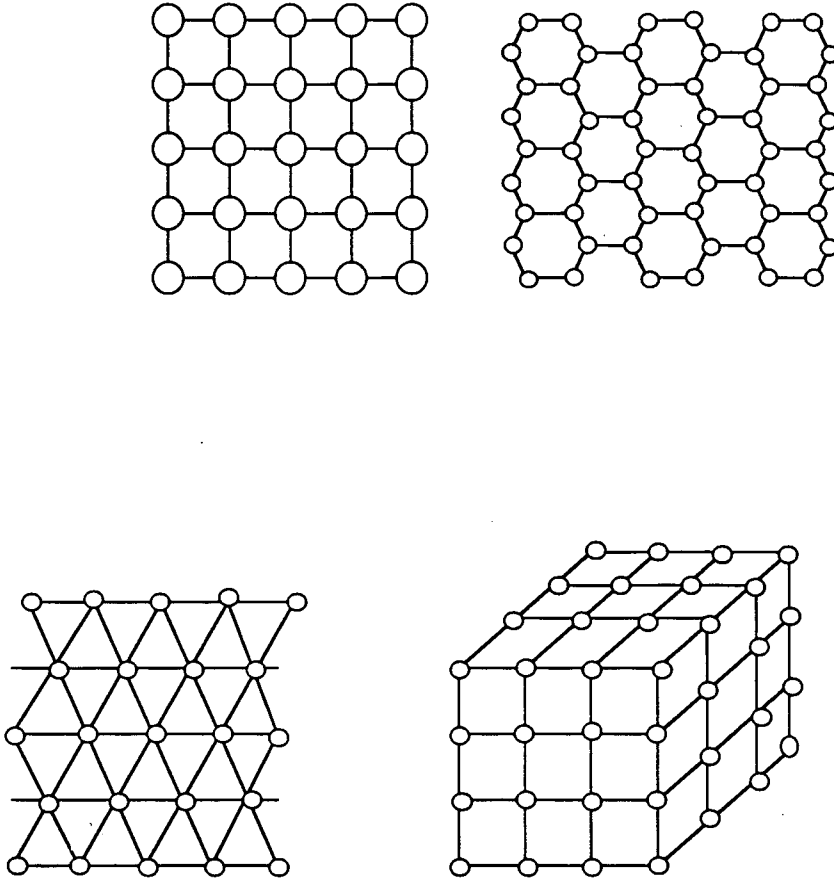


Figura 2.2 - Exemplos de redes de percolação

Um sítio é dito ativo ou não bloqueado quando o seu diâmetro satisfaz a condição de invasão a nível do elemento (sítio) e ele pode ser invadido ou ocupado por um líquido molhante ou não molhante, dependendo do processo de transporte a ser simulado. Um grupo de sítios ativos ligados uns aos outros através de ligações também ativas é denominado de agrupamento ou ilha (*amas* em francês, *cluster* em inglês).

Considere as redes mostradas na Figura 2.3. Nas redes os sítios e/ou ligações estão associados a símbolos que os identificam dentro da rede, por exemplo, o diâmetro, ou o comprimento ou ainda a relação comprimento/diâmetro dos poros do meio real que representam. As ligações podem também indicar apenas a forma de união entre os poros. Cada elemento da

rede, sítio ou ligação, tem uma probabilidade finita, p , de ser ativo e uma probabilidade, $1-p$, de ser não ativo.

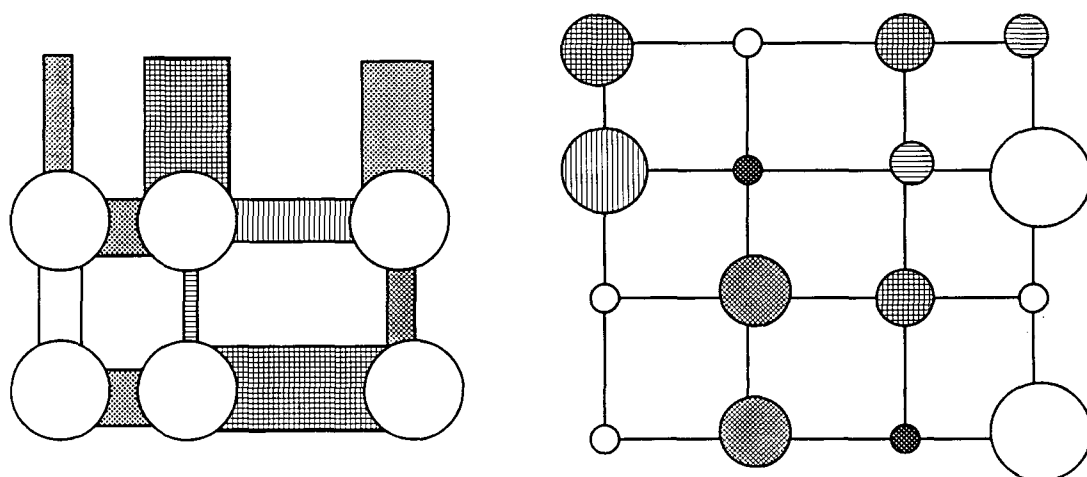


Figura 2.3 - Configuração típica de um processo de percolação:

(a) de ligações

(b) de sítios.

O termo percolação de ligações, Figura 2.3 (a), é normalmente usado para denotar a percolação que depende da probabilidade de uma ligação estar ou não ativa e onde todos os sítios são ativos. Neste caso os sítios indicam apenas o ponto de encontro das ligações.

A percolação de sítios, Figura 2.3 (b), denota a percolação onde todas as ligações indicam apenas a forma de união entre os sítios.

Quando tanto os sítios quanto as ligações caracterizam restrições, mais ou menos importantes, ao processo de invasão, o problema é dito percolação de sítios e ligações.

A concentração na qual um agrupamento de sítios e/ou ligações, constituindo um caminho contínuo que liga a face de entrada à face de saída da rede, denominado de agrupamento infinito, aparece é chamada probabilidade crítica, p_c ($0 < p_c < 1$), ou limite de percolação. O limite de

percolação, p_c , está associado ao número de coordenação Z (conectividade), e à dimensão d da rede. Das estimativas de Monte Carlo para o caso de percolação de ligações é para todas as redes [90],

$$p_c \approx \frac{d}{(d-1)Z}, \quad (2.1)$$

e, desse modo, para uma rede quadrada onde $Z = 4$, $d = 2$ resulta $p_c \approx 0,5$.

Define-se também os demais parâmetros que caracterizam uma rede de percolação. Assim a probabilidade de percolação, $P(p)$, é a probabilidade de que um sítio arbitrário esteja ativo e pertença a um agrupamento infinito de sítios ativos conectados entre si. Esta grandeza é nula abaixo do limite de percolação.

O parâmetro, $n_s(p)$, representa o número de agrupamentos constituídos por s sítios ativos isolados em relação ao número total de sítios e define a probabilidade de que um agrupamento qualquer de sítios contenha exatamente s sítios ativos isolados.

A função conectividade $g(r,p)$ define a probabilidade de um sítio arbitrário encontrar um sítio ativo a uma distância r , pertencente ao mesmo agrupamento ou ilha. Esta função está associada à estrutura dos agrupamentos de sítios ativos exigindo que os dois sítios extremos estejam conectados por um caminho de sítios ativos.

O comprimento de correlação, ξ , de agrupamentos de sítios ativos é formalmente definido como:

$$\xi^2 \equiv \frac{\sum_r r^2 g(r,p)}{\sum_r g(r,p)}. \quad (2.2)$$

2.4 - Probabilidade crítica

As probabilidades críticas, p_c , para um grande número de redes têm sido estimadas através do método numérico de Monte Carlo e do método de expansões de séries [82,90,101].

O método de Monte Carlo é o procedimento mais difundido na solução dos problemas da teoria da percolação e constitui qualquer procedimento matemático em que se utiliza um gerador de números aleatórios. Em geral, o gerador tem um programa padrão que gera os números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo de 0 a 1, isto é, um gerador que sorteia os valores da variável aleatória infinita que adotam com igual probabilidade, todos os valores no intervalo de 0 a 1.

O método de expansão em séries foi sugerido por Domb [98] em 1959 e é um método que apresenta boa concordância com as estimativas por Monte Carlo. Este método dá a informação sobre o comportamento crítico do tamanho médio do agrupamento. Investiga-se a probabilidade crítica pela expansão do tamanho médio dos agrupamentos finitos, $S(p)$, como uma série de potência em p . Isso resulta numa série de termos positivos e portanto o raio de convergência da expansão é identificado como a probabilidade crítica de percolação, p_c .

Na Figura 2.4 mostra-se um modelo de percolação de sítios sobre um rede quadrada cujo limite de percolação é de 0,59. Os pontos escuros representam os sítios ocupados. A figura mostra o sistema para três valores de p . Enquanto $p < p_c$, observa-se somente os sítios isolados ou agrupamentos cuja extensão é inferior ao tamanho da rede. Assim o meio continua impermeável, pois não há interligação. Quando p cresce, estes agrupamentos crescem e se unem até que, para um valor particular de p ($p_c = 0,59$), um dos agrupamentos atinge a face oposta da rede, formando uma fase contínua (percolante). Associando-se este exemplo ao caso de uma simulação sobre uma amostra cujo tamanho tende para o infinito, a formação de um agrupamento se dá indefinidamente dentro de diferentes direções do espaço, para um valor crítico p_c , que é a característica essencial do fenômeno de percolação.

Um objetivo da teoria da percolação é a determinação de uma lei geral que permita prever o valor crítico p_c , em função da conectividade, da dimensão e do tamanho da rede.

Apresenta-se a seguir o método para o cálculo exato de p_c para redes quadradas planas. É conveniente, como em muitos outros problemas, considerar N sítios na rede, com $N \rightarrow \infty$, para evitar efeitos de fronteira. Considerando um sítio particular com a probabilidade p de estar ocupado (ativo) e os seus quatro vizinhos vazios, a probabilidade de se encontrar este sítio isolado na rede será: $p(1-p)^4$.

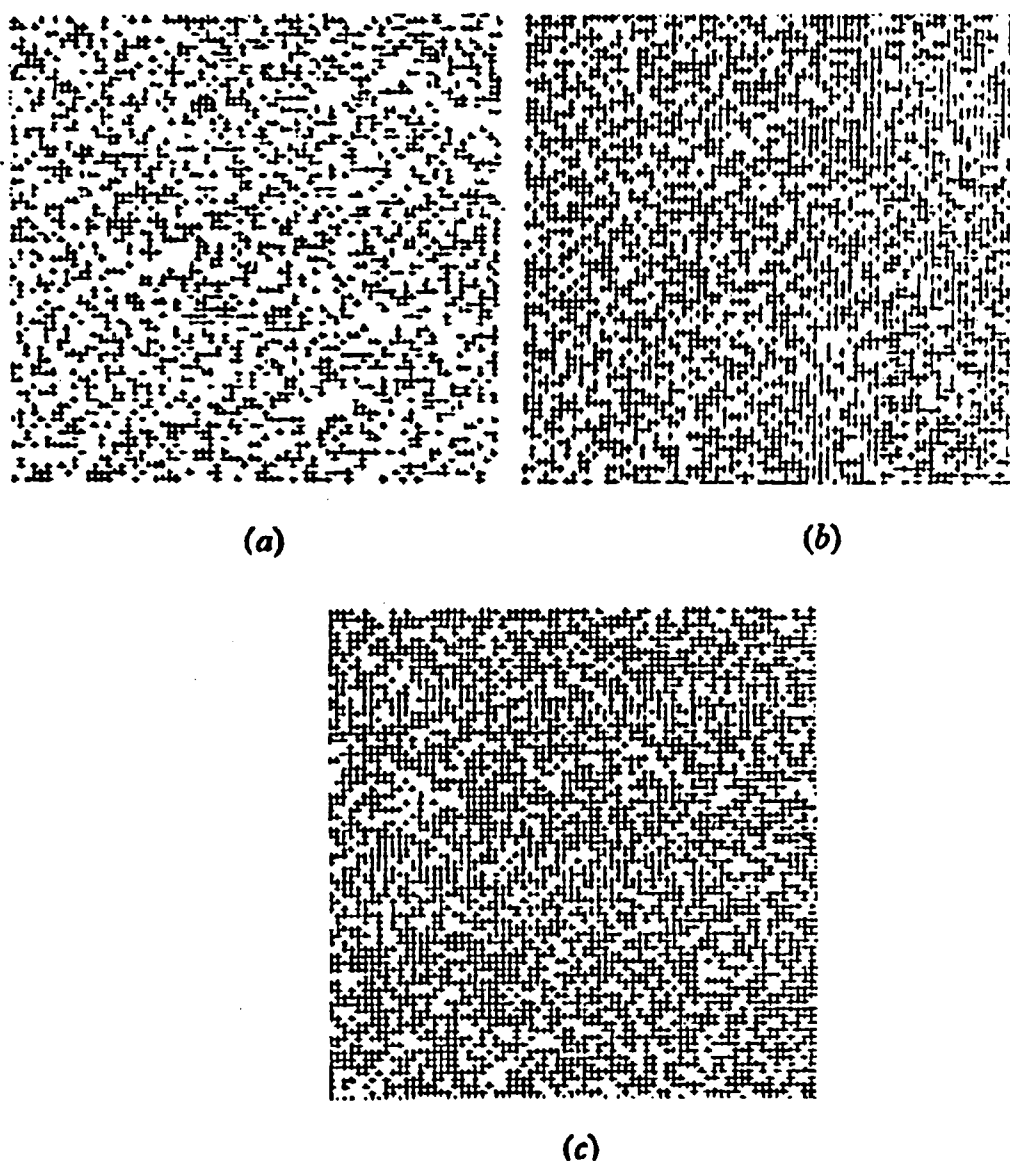
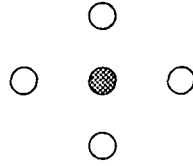


Figura 2.4 - Percolação de sítios sobre uma rede quadrada.

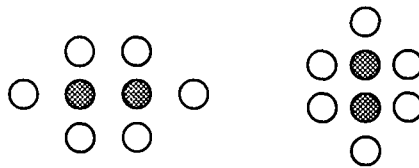
(a) $p < p_c$ (b) $p = p_c$ (c) $p > p_c$.



O parâmetro $n_s(p)$, para $s=1$, representa a proporção de agrupamentos constituídos por 1 sítio ativo, em relação ao número total de sítios. Desse modo, $n_1(p)$, pode ser escrito como:

$$n_1(p) = p(1-p)^4. \quad (2.3)$$

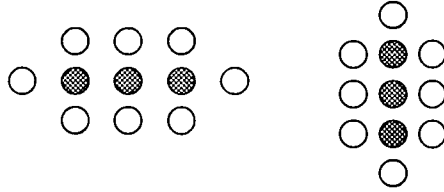
Agora considerando dois sítios adjacentes com probabilidade p de estarem ocupados, a probabilidade correspondente é $p^2(1-p)^6$. Mas esta configuração pode estar orientada em duas direções na rede.



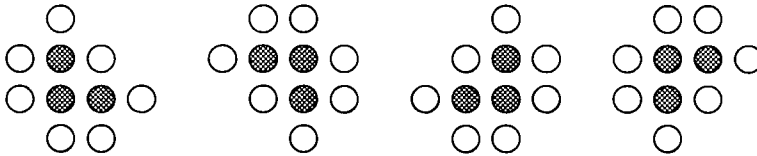
Assim,

$$n_2(p) = 2p^2(1-p)^6. \quad (2.4)$$

Para três sítios há duas diferentes formas possíveis. A primeira forma,



tem probabilidade $p^3(1-p)^8$ e apresenta duas configurações diferentes na rede. A segunda forma,



tem probabilidade $p^3(1-p)^7$ e apresenta quatro configurações diferentes na rede. Desta forma,

$$n_3(p) = 2p^3(1-p)^8 + 4p^3(1-p)^7. \quad (2.5)$$

Assim pode-se enumerar todos os diferentes agrupamentos de sítios conectados que podem ser construídos com somente s sítios de uma rede infinita.

Em geral,

$$n_s(p) = \sum_t g_{st} p^s (1-p)^t, \quad (2.6)$$

onde s é o tamanho do agrupamento, t representa o número de vizinhos não ativos (perímetro do agrupamento) e g_{st} representa o número de configurações.

Se não há um agrupamento infinito, o que corresponde a $p < p_c$, é possível a seguinte relação:

$$\sum_s s n_s(p) = p, \quad (2.7)$$

onde $s.n_s(p)$ representa a probabilidade que um sítio arbitrário pertença a um agrupamento de s condutores.

Quando $p > p_c$, existe pelo menos um agrupamento infinito e a Equação (2.7) pode ser substituída por:

$$\sum'_s s n_s(p) = p - P(p), \quad (2.8)$$

onde $P(p)$ é a probabilidade de um sítio arbitrário pertencer a um agrupamento infinito de sítios ativos, conectados entre si. Na Equação (2.8) Σ' indica uma soma sobre todas as ilhas ou agrupamentos finitos. Assim,

$$P(p) = p - \sum_s s n_s(p). \quad (2.9)$$

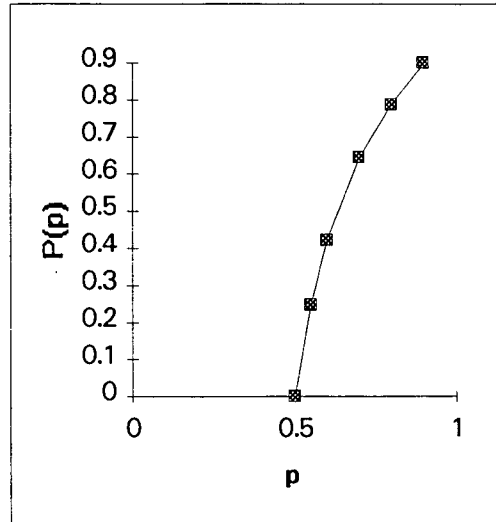


Figura 2.5 - Parâmetro de ordem

Usando o conceito do tamanho médio dos agrupamentos de sítios ativos, $S(p)$, nas regiões abaixo de p_c ,

$$S(p) = \sum_s s w_s(p) = \frac{\sum_s s^2 n_s(p)}{\sum_s s n_s(p)}, \quad (2.10)$$

onde $w_s(p) = s n_s(p) / (\sum_s s n_s(p))$ é a proporção de elementos contidos em agrupamentos com s sítios ativos em relação ao número total de sítios ativos.

Considere agora como exemplo o caso de percolação de sítios sobre uma cadeia linear infinitamente longa, onde os sítios da rede são colocados em distâncias fixadas, Figura 2.6 [95,96,101]. Cada um destes sítios é randomicamente ocupado com probabilidade p .

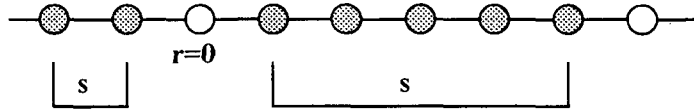


Figura 2.6 - Exemplo de agrupamentos de sítios ativos em uma rede 1-D.

A probabilidade de cada sítio estar ativo ou ocupado é p . Uma vez que todos os sítios são ocupados randomicamente, a probabilidade de dois sítios arbitrários estarem ativos é p^2 , para três sítios estarem ativos é p^3 e para quatro sítios estarem ativos é p^4 . A probabilidade de que um sítio esteja não ativo é $1-p$. Assim,

$$n_1(p) = p(1-p)^2,$$

$$n_2(p) = p^2(1-p)^2,$$

$$n_3(p) = p^3(1-p)^2,$$

$$n_s(p) = p^s(1-p)^2, \quad (2.11)$$

Para $p = 1$, todos os sítios da cadeia são ativos, e a cadeia inteira constitui um único agrupamento de sítios ativos. Para cada $p < 1$, existirá alguns pontos na rede onde um sítio não é ativo e uma rede de comprimento L terá em média $(1-p)L$ sítios não ativos. Para um L tendendo ao infinito e p fixo, $(1-p)L$ também tenderá ao infinito. Assim não haverá um agrupamento percolante para $p < 1$. Então,

$$p_c = 1. \quad (2.12)$$

Na rede 1-D não é possível observar a região para $p > p_c$.

A probabilidade que um sítio pertença a um agrupamento de tamanho s é $s \cdot n_s(p)$, como discutido anteriormente. Cada sítio ativo, numa rede 1-D, pertence a um agrupamento uma vez que sítios ativos circundados por vizinhos não ativos formam agrupamentos de tamanho unitário. Como visto anteriormente, a probabilidade que um sítio arbitrário pertença a qualquer agrupamento é portanto igual a probabilidade p de ser ativo. Assim,

$$\sum_{s=1}^{\infty} s \cdot n_s(p) = p, \quad p < p_c. \quad (2.7)$$

Esta lei pode também ser verificada diretamente da Equação (2.11),

$$\begin{aligned} \sum_s s \cdot p^s (1-p)^2 &= (1-p)^2 \sum_s p \frac{d(p^s)}{dp} \\ &= (1-p)^2 p \frac{d\left(\sum_s p^s\right)}{dp} \\ &= (1-p)^2 p \frac{d\left(\frac{p}{(1-p)}\right)}{dp} \\ &= p \end{aligned}$$

O comprimento médio de um agrupamento, $S(p)$, é para uma rede 1-D:

$$S_s(p) = \sum_s s \cdot w_s(p),$$

onde

$$w_s(p) = \frac{s \cdot n_s(p)}{\sum_s s \cdot n_s(p)} = \frac{s \cdot p^s (1-p)^2}{\sum_s s \cdot p^s (1-p)^2}, \quad p < p_c \quad (2.13)$$

e, é a proporção de elementos contidos em agrupamentos com s sítios ativos em relação ao número total de sítios ativos.

$$\begin{aligned} S_s(p) &= \frac{\sum_s s^2 p^s (1-p)^2}{\sum_s s p^s (1-p)^2} = \frac{\sum_s s^2 p^s}{\sum_s s p^s} \\ &= \frac{p \frac{d}{dp} \left(p \frac{d}{dp} \sum_s p^s \right)}{p \frac{d}{dp} \left(\sum_s p^s \right)} \\ &= \frac{p \frac{d}{dp} \left[p \frac{d}{dp} \left(\frac{p}{1-p} \right) \right]}{p \frac{d}{dp} \left(\frac{p}{1-p} \right)} = \frac{1+p}{1-p}, \quad p < p_c \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde a soma vai de $s = 1$ ao infinito. O tamanho médio de agrupamento diverge quando se aproxima do limite de percolação, Figura 2.7.

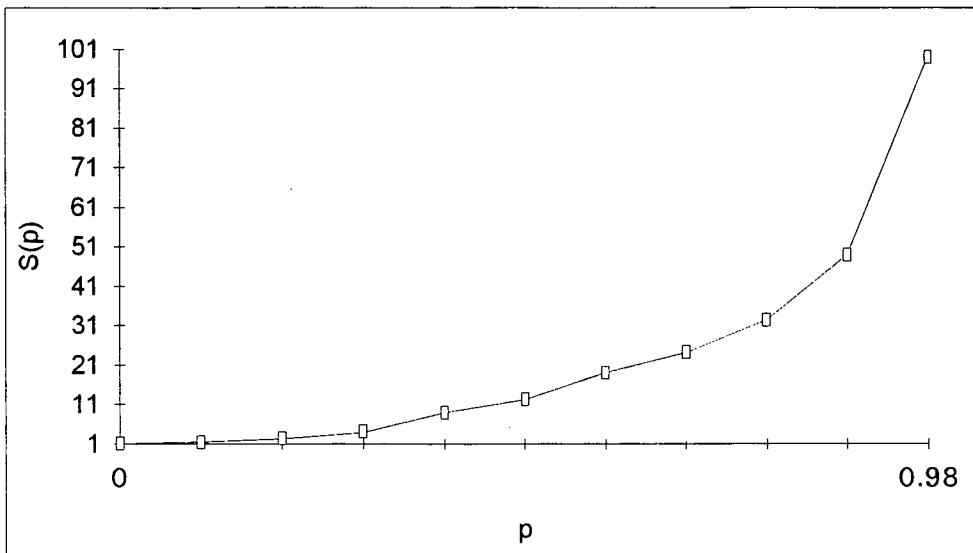


Figura 2.7 - O tamanho médio de um agrupamento em uma rede 1-D.

Em relação à função conectividade, $g(r,p)$, para a rede 1-D, tem-se para $r = 0$ que a probabilidade $g(0,p)$ é igual a unidade, pela definição. Para $r = 1$ o sítio vizinho pertence ao mesmo agrupamento se e somente se ele estiver ativo, isto é, o caso com probabilidade p .

$$g(1, p) = p,$$

$$g(-1, p) = p,$$

$$g(2, p) = p^2,$$

$$g(-2, p) = p^2, \tag{2.15}$$

Para uma distância r , este sítio e os $(r-1)$ sítios entre este sítio e a origem $r = 0$ devem estar ativos sem exceção, o que acontece com probabilidade $p^{|r|}$. Assim, em geral,

$$g(r, p) = p^{|r|}, \quad (2.16)$$

para todo p e r . Para $p < 1$ a função conectividade tende a zero exponencialmente se a distância r tende para o infinito, Figura 2.8,

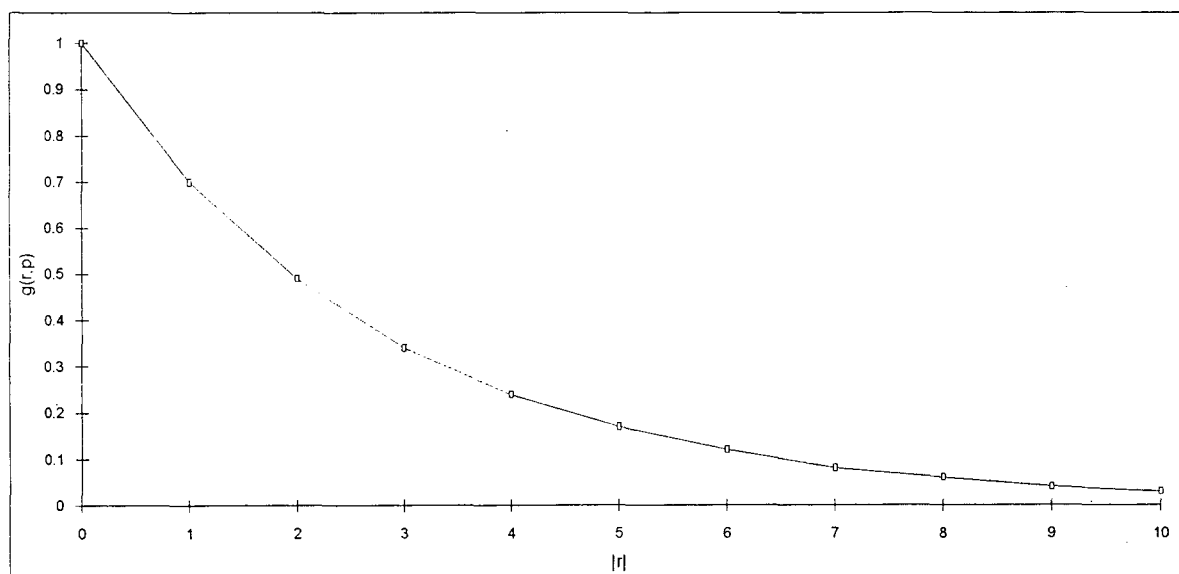


Figura 2.8 - Função conectividade numa rede 1-D.

$$\begin{aligned} g(r, p) &= \exp(r \ln p) \\ &= \exp(-r / -(1/\ln p)). \end{aligned} \quad (2.17)$$

O comprimento de correlação, ξ , de agrupamentos de sítios ativos, da Equação (2.2) é dado por:

$$\xi^2 = \frac{0 \cdot 1 + 2 \cdot 1^2 \cdot p + 2 \cdot 2^2 \cdot p^2 + \dots}{1 + 2p + 2p^2 + \dots} = \frac{2 \sum_k k^2 p^k}{1 + 2 \sum_k p^k} = \frac{2p}{(1-p)^2}, \quad (2.18)$$

observando-se que o somatório, Equação (2.2), envolve os vizinhos da direita e da esquerda, por isso a multiplicação por 2. Para p próximo a $p_c = 1$,

$$\xi \approx \frac{1}{p_c - p} = (p_c - p)^{-1}. \quad (2.19)$$

que constitui uma relação geral, obtida para diversas rede.

Expandindo $\ln p$ segundo uma série de Taylor, em torno de $p = p_c$,

$$\ln p \approx \ln p_c + (p - p_c) \left[\frac{d \ln p}{dp} \right]_{p_c} + \dots \quad (2.20)$$

e para $p \sim p_c = 1$,

$$\ln p \approx 0 + 1(p - p_c) + \dots, \quad (2.21)$$

resulta

$$\xi \approx -\frac{1}{\ln p}, \quad (2.22)$$

e

$$g(r, p) = \exp(-r / \xi). \quad (2.23)$$

O comprimento de correlação, ξ , também diverge no limite de percolação. Observa-se da solução exata para uma dimensão, que certas quantidades divergem no limite de percolação, e que esta divergência pode ser descrita por uma lei de potência como $1/(p_c - p)$, quando $p \sim p_c$. O mesmo parece verdadeiro para outras dimensões onde os problemas não têm sido resolvidos exatamente, Tabela 2.1.

Tabela 2.1 - Valores de p_c para o problema de percolação[90,101].

REDE	Z	p_c^s (sítios)	p_c^b (ligações)
quadrada	4	0,59275	0,50
triangular	5	0,50	0,34729
hexagonal	3	0,6962	0,65271
cúbica	6	0,3117	0,2492

2.5 - Leis de escala para sistemas infinitos e expoentes críticos

A transição de um estado não percolante para um estado percolante é um tipo de transição de fase. A transição ocorre numa probabilidade crítica definida, p_c . Isto significa que o modelo de percolação tem muitas características em comum com outros modelos mostrando uma fase de

transição[82,98]. A teoria da transição de fase sugere que o comportamento de vários sistemas, como os descritos anteriormente, seja comumente descrito por uns poucos parâmetros universais na vizinhança da probabilidade crítica. Estes parâmetros são chamados expoentes críticos.

Stauffer [101]propõe:

$$n_s(p) \approx s^{-\tau} f(z), \quad (2.24)$$

com

$$z = (p - p_c) s^\sigma, \quad (2.25)$$

onde os parâmetros τ e σ são constantes para cada rede. Para a rede 1-D a proposição é:

$$f(z) = z^2 e^z, \quad (2.26)$$

e assim,

$$\begin{aligned} n_s(p) &\approx s^{-\tau} f(z) = s^{-\tau} z^2 e^z = s^{-\tau} (p - p_c)^2 s^{2\sigma} e^{(p-p_c)s^\sigma} \\ &= s^{2\sigma-\tau} (p - p_c)^2 e^{(p-p_c)s^\sigma}, \end{aligned} \quad (2.27)$$

que é a lei de escala para a rede unidimensional quando $\sigma = 1$ e $\tau = 2$.

2.5.1 - Lei de escala para $S(p)$

Para uma rede que satisfaz a lei de escala, Equação (2.24), quando $p \approx p_c$, $p < p_c$:

$$\begin{aligned}
 S(p) &= \frac{\sum s^2 n_s(p)}{p} \approx \sum_s s^2 n_s(p) = \sum_s s^2 s^{-\tau} f(z) \\
 &\approx \int_0^{\infty} s^{2-\tau} f(z) ds
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

com $z = -(p - p_c)s^\sigma$, $s = \frac{z^{\frac{1}{\sigma}}}{(p - p_c)^{\frac{1}{\sigma}}}$, $dz = \frac{\sigma z}{s} ds$, e z variando de zero a infinito ($p > p_c$). Obtém-se:

$$\begin{aligned}
 S(p) &\approx (p - p_c)^{\frac{\tau-3}{\sigma}} \int_0^{\infty} \frac{z^{\frac{3-\tau}{\sigma}}}{\sigma} f(z) \frac{dz}{z} \\
 &\approx (p - p_c)^{\frac{\tau-3}{\sigma}} = (p - p_c)^{-\gamma},
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

com $\gamma = \frac{3-\tau}{\sigma}$, Tabela 2.2.

2.5.2 - Lei de escala para $P(p)$

Para $p \approx p_c$, $p > p_c$,

$$\begin{aligned}
P(p) &= p - \sum_s sn_s(p) \approx \sum_s s[n_s(p) - n_s(p)] \\
&\approx \int_0^\infty s^{1-\tau} [f(0) - f(z)] ds \\
&= (p - p_c)^{\frac{\tau-2}{\sigma}} \int_0^\infty z^{\frac{2-\tau}{\sigma}} [f(0) - f(z)] \frac{dz}{dz},
\end{aligned} \tag{2.30}$$

com $z = (p - p_c)s^\sigma$, $s = \frac{z^{\frac{1}{\sigma}}}{(p - p_c)^{\frac{1}{\sigma}}}$, $dz = \frac{\sigma z}{s} ds$, e z variando de zero a infinito ($p > p_c$). Obtém-se:

se:

$$P(p) \approx (p - p_c)^{\frac{\tau-2}{\sigma}} = (p - p_c)^\beta, \tag{2.31}$$

onde $\beta = \frac{\tau-2}{\sigma}$, Tabela 2.2.

2.5.3 - Lei de escala para $\xi(p)$

Para $p \approx p_c$, $p > p_c$,

$$\xi(p) \approx |p - p_c|^{-\nu} \tag{2.32}$$

valores de ν são dados na Tabela 2.2.

Se o interesse é em outras grandezas mais físicas do que geométricas, pode-se introduzir o condutividade, K , de uma rede. Esta condutividade corresponderá à condutividade elétrica da rede aplicando-se uma condutividade igual à unidade a cada elemento ativo da rede. Quando p tende a p_c com $p > p_c$, a condutividade K da rede se comporta como:

$$K \approx (p - p_c)^t, \quad (2.33)$$

o parâmetro t para redes 3-D foi obtido por simulações numéricas, $t = 1,5$ (Kirkpatrick [90]).

2.6 - Algoritmo para obtenção do agrupamento percolante

Na obtenção do agrupamento percolante de sítios ativos utiliza-se como modelo o algoritmo apresentado por Hoshen e Kopelman [102]. Este algoritmo aplica a técnica de rótulos alternados aos sítios ativos pertencentes ao mesmo agrupamento. A característica básica da técnica de rotulagem múltipla do agrupamento ou ilha é que somente uma fração das colunas ou linhas da rede fica armazenada na memória do computador, exigindo assim menor espaço de memória. Os tamanhos dos agrupamentos são dados por números positivos que designam o número de sítios de cada agrupamento, Figura 2.9.

Na Figura 2.9 (a) a rotina rotula os sítios ativos e atualiza os números $N(m_i^\alpha)$. A notação $D \leftarrow E$ denota a transferência de um conteúdo de E para D , sem afetar E . Na Figura 2.9 (b) a rotina determina a ilha de rótulo próprio para os sítios ativos. S_n é o sítio vizinho n .

Tabela 2.2 - Valores dos expoentes críticos para o problema de percolação de sítios [97].

Dimensão da rede	γ	β	ν
1	1 (Fisher e Essam, 1961)	0 (Reynolds et alii, 1977)	1 (Reynolds et alii, 1977)
2	2,43 (Sykes et alii, 1976 média)	0,138 (Sykes et alii, 1976 média)	1,34 (Dunn et alii, 1975 ligação/triangular)
	2,42 (Fish e Harris, 1978 ligação/quadrada)	0,139 (Dasgupta, 1976 média)	1,33 (Levinshtein, 1975 ligação/triangular)
	2,43 (Nakanishi e Stanley, 1978:ligação/quadrada)	0,146 (Nakanishi e Stanley 1978: ligação/quadrada)	1,35 (Marland e Stinchcombe,1977 ligação/triangular)
3	1,66 (Sykes et alii, 1976 ligação/cfc)	0,47 (Blease et alii,1978 ligação/cfc)	0,825 (Dunn et alii,1975 ligação/cfc)
	1,6 (Sur et alii, 1977 sítio/cúbica simples)	0,42 (Sykes et alii, 1976 sítio/cfc)	0,9 (Levinshtein, 1975 ligação/cúbica simples)
		0,41 (Sur et alii, 1977 sítio/cúbica simples)	0,8 (Sur et alii, 1977 sítio/cúbica simples)

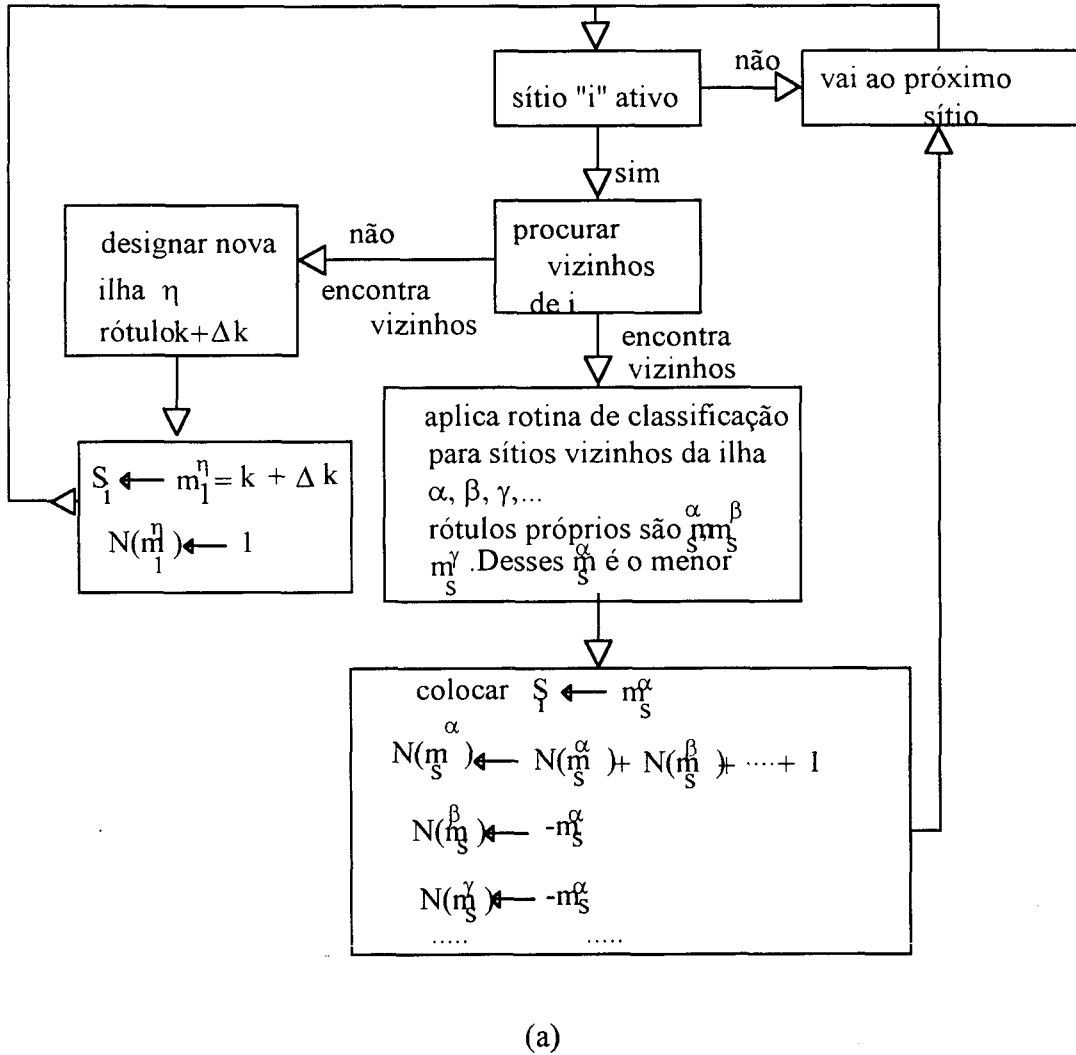


Figura 2.9 - (a) Rotina de designação dos rótulos para os sítios.

Algoritmo extraído de Hoshen e Kopelman [102]

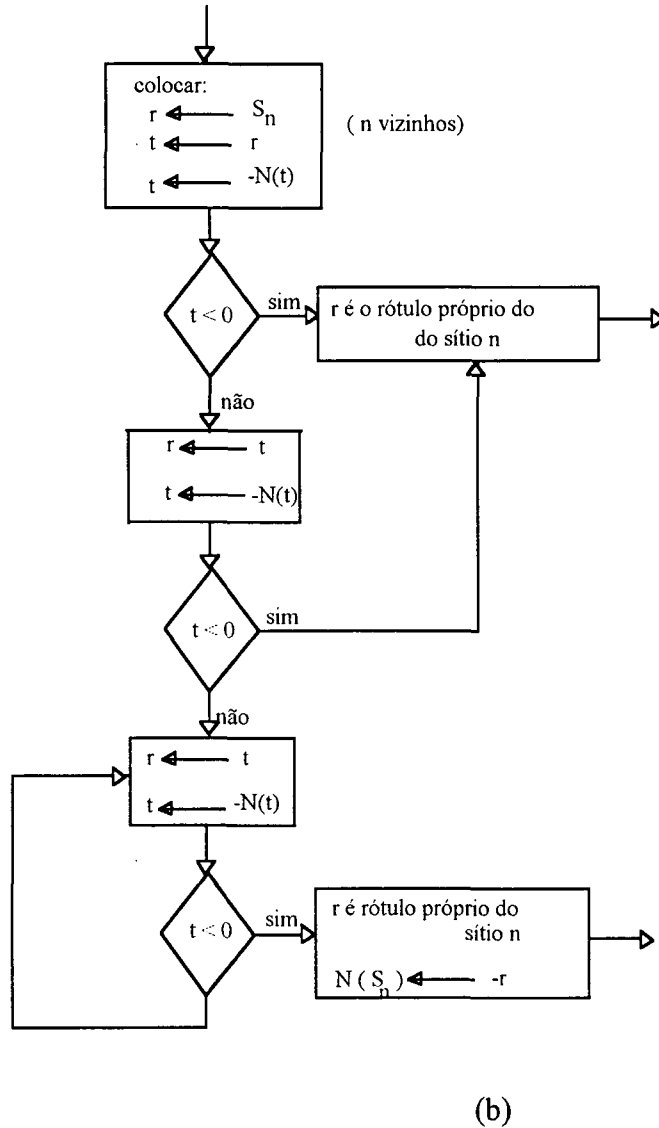


Figura 2.9 -(b) Rotina de classificação.

Algoritmo extraído de Hoshen e Kopelman [102]

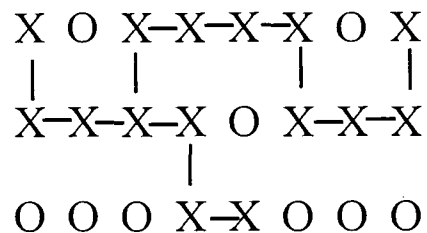
Para a compreensão do algoritmo a seguinte terminologia é necessária: uma ilha α contém vários rótulos diferentes $\{ m_1^\alpha, m_2^\alpha, \dots, m_s^\alpha, \dots, m_t^\alpha \}$, onde m_s^α é designado como rótulo próprio, e será o menor número do conjunto. Obtém-se um conjunto de números inteiros $\{ N(m_1^\alpha), N(m_2^\alpha), \dots, N(m_s^\alpha), \dots, N(m_t^\alpha) \}$ onde $N(m_s^\alpha)$ é positivo e designa o número de sítios da ilha α . Os elementos restantes do conjunto de números inteiros são negativos e têm a função de fazer a

ligação entre os outros rótulos m_i^α e o rótulo próprio m_s^α . Os rótulos m_i^α estão relacionados ao rótulo m_s^α através das seguintes expressões:

$$m_r^\alpha = -N(m_i^\alpha), \quad m_q^\alpha = -N(m_r^\alpha), \dots, \dots, \\ m_s^\alpha = -N(m_p^\alpha). \quad (2.34)$$

Estas equações são resolvidas da esquerda para a direita. Isto pode ficar mais claro através do seguinte exemplo. Considere um sistema discreto de elementos, designados por sítios, unidos entre si através de ligações, de acordo com um número de coordenação z constante. Considere apenas o problema de sítios, sendo p a probabilidade de que um sítio arbitrário esteja ativo.

Exemplo:



Neste exemplo faz-se a varredura acompanhando o algoritmo, linha por linha. No início faz-se $k = 1$ e $\Delta k = 0$. Assim,

Na primeira linha:	$S_1 = 1$	$S_5 = 2$
	$N(1) = 1$	$N(2) = 2+1 = 3$
	$S_3 = 2$	$S_6 = 2$
	$N(2) = 1$	$N(2) = 3+1 = 4$
	$S_4 = 2$	$S_8 = 3$
	$N(2) = 1+1 = 2$	$N(3) = 1$

Na segunda linha:	$S_9 = 1$	$S_{14} = 1$
	$N(1) = 1+1 = 2$	$N(1) = 9 + 1 = 10$
	$S_{10} = 1$	$S_{15} = 1$
	$N(1) = 2+1 = 3$	$N(1) = 10 + 1 = 11$
	$S_{11} = 1$ (menor rótulo próprio)	$S_{16} = 1$
	$N(1) = 3 + N(2) + 1 = 8$	$N(1) = 11 + 1 + N(3) = 13$
	$N(2) = -1$	$N(3) = -1$
	$S_{12} = 1$	
	$N(1) = 8+1 = 9$	

Na terceira linha: $S_{20} = 1$

$S_{21} = 1$

$$N(1) = 13 + 1 = 14$$

$$N(1) = 14 + 1 = 15$$

e desse modo resulta a seguinte rede de rótulos,

```

1 0 2 2 2 2 0 3
1 1 1 1 0 1 1 1
0 0 0 1 1 0 0 0

```

com uma ilha percolante tendo 15 sítios ativos, $N(1) = 15$, com $m_s^a = 1$ sendo o rótulo próprio,

```

1 0 1 1 1 1 0 1
1 1 1 1 0 1 1 1
0 0 0 1 1 0 0 0

```

2.7 - Estudo estatístico das redes

Os sítios da rede são divididos em N classes, todas com a mesma probabilidade de ocorrência $1/N$.

A probabilidade p_k , denota a fração acumulada em números de sítios de tamanho $j \leq k$ presentes na rede, e é definida por:

$$p_k = \frac{\sum_{j=1}^k N_j}{\sum_{j=1}^n N_j} = \frac{k}{N}, \quad (2.35)$$

onde N_j é o número total de sítios caracterizados pelo tamanho j ($j=1,2,\dots,c,\dots,n$), k é a classe e k ($k=1,\dots,c,\dots,n$) denota o menor sítio invadido em qualquer etapa do processo de invasão.

Chama-se etapa de invasão k àquela em que os sítios ativos, da classe k , podem ser invadidos. Uma etapa do processo de invasão corresponde, para um dado fenômeno capilar, a um dado valor de pressão segundo a lei de Laplace. Um sítio invadido é um sítio ocupado obedecendo às regras de acessibilidade dos poros dentro da rede (seção 4.3).

A cada etapa k , é possível definir o número de sítios da classe j invadidos, M_{kj} , e a proporção dos mesmos por:

$$Y_{kj} = \frac{M_{kj}}{N_j}, \quad (2.36)$$

A proporção de sítios invadidos, para um conjunto de classes de índice menor ou igual a k , é então definida pela função acessibilidade:

$$Y_k = \frac{\sum_{j=1}^k M_{kj}}{\sum_{j=1}^n N_j} \quad (2.37)$$

As curvas características $Y_k(p_k)$ dependem do tamanho da rede, e são também influenciadas pela escolha aleatória da posição dos sítios das diferentes classes dentro da rede, Figuras 2.10 à 2.12.

Observa-se nas Figuras 2.10 e 2.11 uma taxa de invasão quase nula abaixo do limite de percolação. Constata-se uma variação do limite de percolação em torno de um valor médio de 0,57 para as redes 2-D e de 0,30 para as redes 3-D e que são bastantes próximos dos valores encontrados na literatura, Tabela 2.1 (para rede quadrada $p_{s,c} = 0,59275$ e para a rede cúbica $p_{s,c} = 0,3117$).

A dispersão devido à posição aleatória dos sítios tende a desaparecer quando o número de sítios tende ao infinito.

A maior conectividade entre os sítios nas redes 3-D resulta numa evolução mais gradual da função acessibilidade após o ponto de percolação em relação às redes 2-D.

Quando o tamanho do sistema é finito é possível observar configurações percolantes mesmo para $p < p_c$, e configurações não percolantes para $p > p_c$. Este resultado pode ser interpretado através da expressão do comprimento de correlação, Equação (2.32),

$$\xi(p) \approx |p - p_c|^{-\nu} \quad (2.32)$$

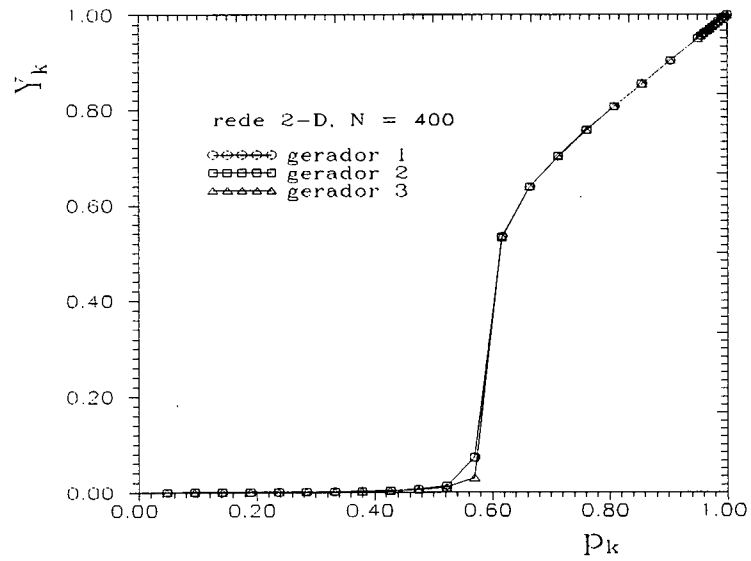
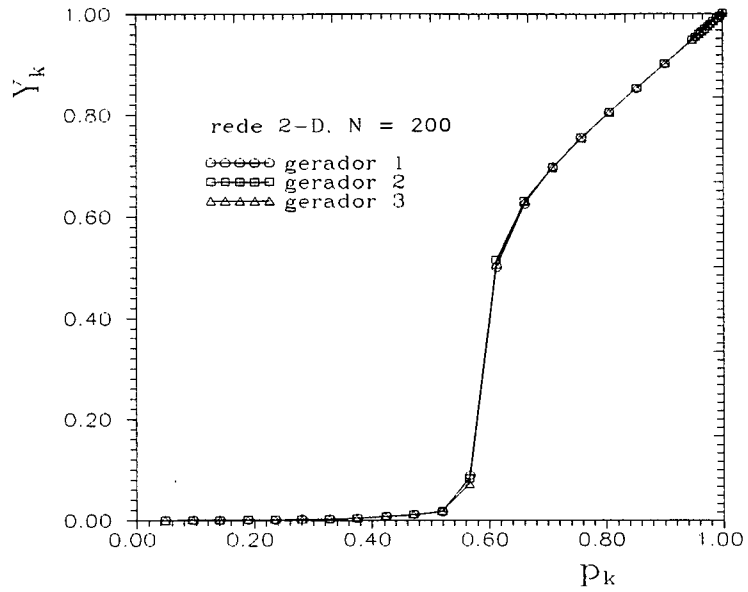


Figura 2.10 - Efeito da escolha aleatória da disposição dos sítios dentro da rede. Rede 2-D.

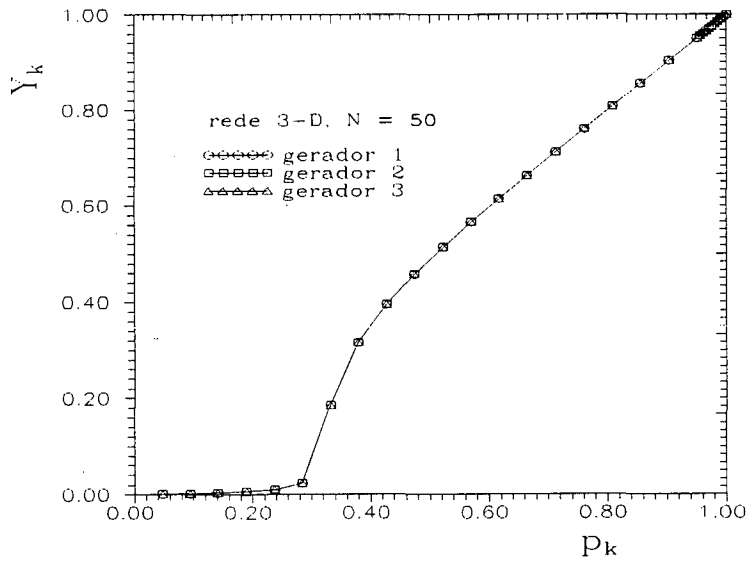
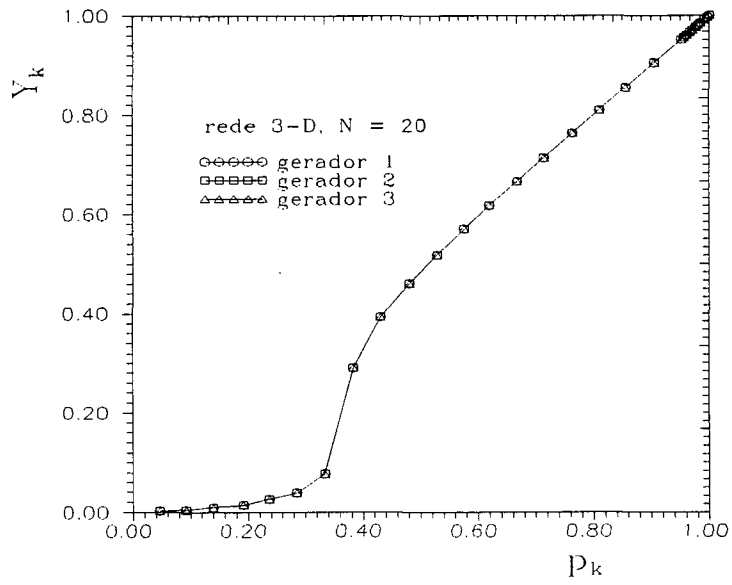


Figura 2.11 - Efeito da escolha aleatória da disposição dos sítios dentro da rede. Rede 3-D.

que representa o tamanho máximo dos agrupamentos de sítios ativos ligados entre si. Quando p tende a p_c , ξ torna-se comparável ao tamanho do sistema, podendo existir então, um agrupamento percolando o sistema.

A escolha do tamanho da rede representativa de um elemento de volume macroscópico, do material poroso estudado, e que determine as curvas $Y_k(p_k)$ não segue nenhuma lei. Entretanto o tamanho da rede deve ser razoável do ponto de vista numérico.

Para evitar ao máximo os efeitos devidos à escolha aleatória da disposição dos sítios dentro da rede, utiliza-se as curvas características que representam a média em relação a três geradores diferentes.

As curvas características $Y_k(p_k)$ dependem do tamanho da rede, particularmente, na região quando $p \leq p_c$. Este tamanho foi escolhido em função da capacidade de memória computacional.

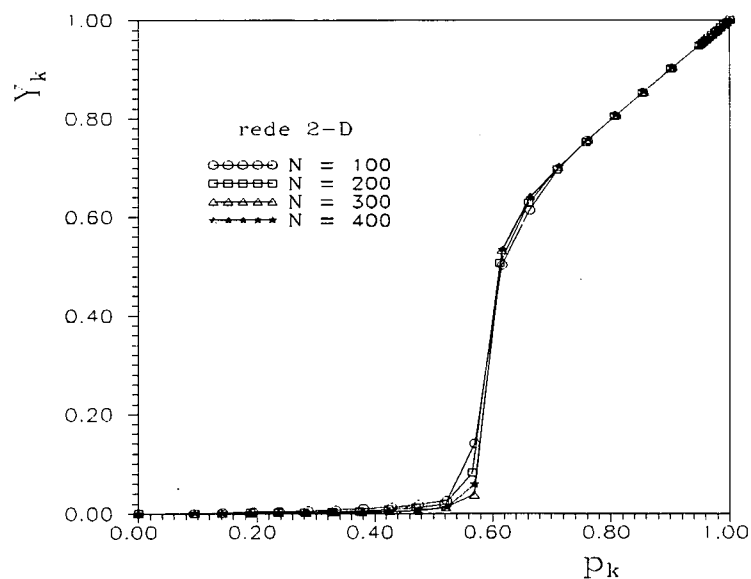


Figura 2.12 - Efeito do tamanho da rede.

(a)rede 2-D

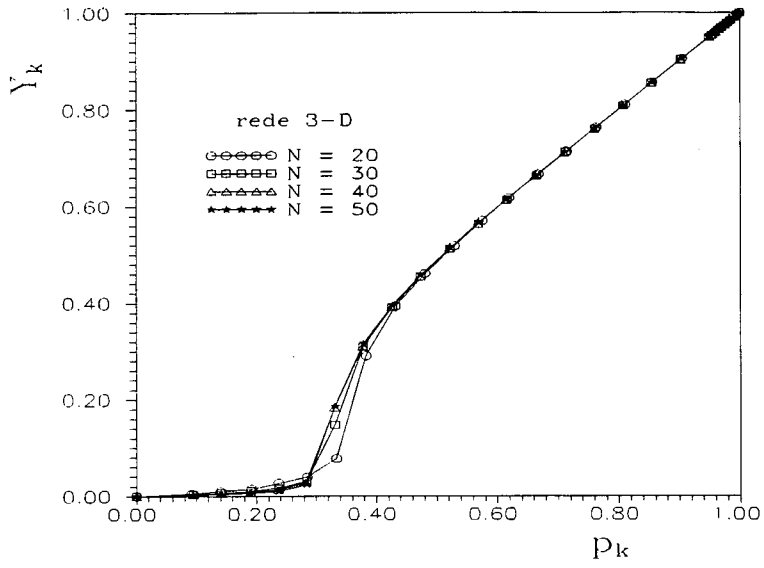


Figura 2.12 - Efeito do tamanho da rede.

(b) rede 3-D.

3 - OBTENÇÃO DO MODELO

3.1 - Introdução

O objetivo deste capítulo é a obtenção de um modelo geométrico que represente a estrutura porosa de um tipo de argamassa de cal e cimento (proporção em massa 8:2:1 - areia : cal : cimento).

A visualização de uma rede porosa, por intermédio de um microscópio eletrônico de varredura, é possível através da deposição de um filme superficial de ouro em amostras da argamassa previamente preparadas. A etapa de preparação corresponde a obtenção de amostras com superfícies polidas, isentas de riscos e livres dos pós abrasivos, porém, conservando as depressões (poros) de maneira a permitir a formação de contraste [39].

No presente caso, no processo de análise qualitativa das micrografias [39] visualiza-se, além dos poros, fissuras separando os grãos de areia da pasta de ligantes. Essas fissuras estão associadas às tensões que se originam durante o processo de cura da argamassa e estabelecem um canal para o transporte de líquido e vapor através do meio, ocasionando um aumento significativo da condutividade hidráulica do mesmo. Segundo Yunes [39] as tensões originadas durante os processos de secagem, polimento e evaporação da resina das amostras também favorecem o fissuramento do meio.

Redes de percolação têm sido utilizadas para o estudo da interação de fluidos com a estrutura porosa, representada por uma rede de cavidades com geometria definida e distribuídas de modo homogêneo no espaço. Saliba [29] com redes cúbicas de sítios e ligações cilíndricas, e Yanuka [27,28] com redes semelhantes, mas com os poros tendo a forma de elipsóides, simulam a drenagem e a embebição de um sistema contendo uma fase molhante e uma fase não molhante. Chatzis e Dullien [13,14] fazem a modelagem através de redes 2-D e 3-D, supondo que a forma das funções densidade que representam a frequência das ligações e sítios seguem uma função

beta, e estudam o comportamento destas redes em relação à drenagem e à permeabilidade relativa a um líquido não molhante injetado. Lenormand [21] obtém resultados de drenagem e embebição para redes 2-D utilizando cavidades representadas por canais de seção quadrada para modelar os poros. Da mesma forma, a simulação das isotermas de adsorção e de dessorção capilares utilizando as redes de percolação têm sido largamente utilizadas dentro da literatura. Parlar e Yortsos [40] utilizam as redes de Bethe ou as redes 2-D com percolação de sítios para determinar as isotermas.

3.2 - Distribuição total em volume de poros

Neste trabalho toma-se como base a distribuição em volume de poros obtida por Yunes[39].

A distribuição em volume de poros é obtida usando-se as isotermas de adsorção para poros com diâmetros menores que 2000 Å, e microscopia eletrônica para poros com diâmetros maiores que 2000 Å, Figura 3.1.

Observa-se na curva de distribuição três regiões diferenciadas. Uma região com volume acumulado mostrando um crescimento acentuado na faixa dos poros com diâmetro inferior a 2000 Å, e que representa aproximadamente 40% da porosidade total do meio. Yunes[39] mostra este resultado através da microscopia eletrônica, calculando uma fração de volume de 0.648 (aproximadamente 65%), para poros de diâmetros maiores que 2000 Å, das fotos representadas pelas Figuras 3.3 à 3.9, independentemente dos dados da isoterma de adsorção. No ponto $D=2000$ Å, correspondente à mudança do método de cálculo, ocorre uma descontinuidade da derivada, associada possivelmente à incerteza dos pontos obtidos da isoterma de adsorção para valores de umidade relativa entre 96% e 100% ($D \geq 600$ Å). Philippi et alii [45] observam que, de fato, apenas os pontos correspondentes às umidades relativas de 96% e 100% foram obtidos experimentalmente, sendo os demais pontos obtidos por interpolação, numa faixa onde o conteúdo de líquido varia bruscamente entre aproximadamente 15% e 100% do volume total dos

poros. Segundo Philippi et alii [45] um aumento de precisão nesta faixa exigiria condições de controle da umidade relativa entre 96% e 100%, (o que é uma tarefa impossível usando apenas soluções salinas) ou uma digitalização mais fina das micrografias que possibilite a extensão da distribuição para diâmetros inferiores a 2000 Å.

Uma segunda região incluindo poros com diâmetros entre 2000 e 30000 Å é observada. Por último, a região incluindo poros com diâmetros superiores aos 30000 Å. Os poros com diâmetros maiores que 30000 Å são na sua maioria poros compreendidos nas distintas fissuras apresentadas pelo meio, Tabelas 3.1 e 3.2.

Os dados obtidos reproduzem com excelente aproximação o valor da porosidade do material utilizado. Obtém-se 0,304224 (cm^3 de poros / cm^3 de amostra) contra 0,307 cm^3/cm^3 obtidos com o porosímetro de expansão de hélio, que utiliza o princípio de expansão de gases, segundo a lei de Boyle.

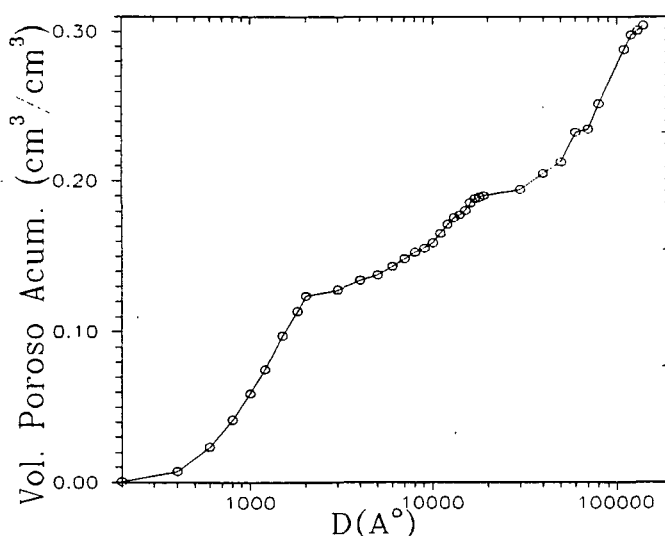


Figura 3.1 - Distribuição em volume dos poros da argamassa de cimento e cal usando as isotermas da adsorção e dados da microscopia eletrônica de varredura, Yunes [39].

Tabela 3.1 - Distribuição de diâmetro de poros obtida a partir da análise manual das micrografias obtidas pela microscopia eletrônica, Yunes [39].

diâmetro (Å)	frequência em número	diâmetro (Å)	frequência em número
1000 - 1500	5126	12500 - 13000	120
1500 - 2000	2613	13000 - 13500	60
2000 - 2500	2110	14000 - 14500	75
2500 - 3000	1507	15000 - 15500	75
3000 - 3500	1407	15500 - 16000	30
3500 - 4000	1407	16000 - 16500	30
4000 - 4500	402	16500 - 17000	15
4500 - 5000	502	17000 - 17500	15
5000 - 5500	503	18000 - 18500	15
5500 - 6000	503	20000 - 30000	46
6000 - 6500	502	30000 - 40000	33
6500 - 7000	201	40000 - 50000	13
7000 - 7500	201	50000 - 60000	22
7500 - 8000	201	60000 - 70000	2
8500 - 9000	201	70000 - 80000	9
9000 - 9500	100	80000 - 90000	6
9500 - 10000	201	90000 - 100000	2
10000 - 10500	161	100000 - 110000	4
10500 - 11000	150	110000 - 120000	3
11500 - 12000	165	120000 - 130000	1
12000 - 12500	30	130000 - 140000	1

Tabela 3.2 - Distribuição de diâmetro de fissuras obtida a partir da análise manual das micrografias obtidas por microscopia eletrônica, Yunes [39].

diâmetro (Å)	frequência	diâmetro (Å)	frequência
10000	1139	70000	828
20000	1449	80000	621
30000	2381	90000	207
40000	1035	100000	311
50000	1760	110000	104
60000	104		

Um outro resultado importante é mostrado na Figura 3.2 , onde $\ln(V_s(D))$ é plotado versus $\ln(D)$. O termo $V_s(D)$ representa o volume aparente de sólido da amostra (depende da escala), sendo determinado da seguinte forma:

$$V_s(D) = 1 - (\varepsilon - V_p(d \leq D)), \quad (3.1)$$

onde $(\varepsilon - V_p(d \leq D))$ é a fração em volume de poros com diâmetro maior que D ($d > D$), ε é a porosidade do material e $V_p(D)$ é a fração em volume de poros com diâmetros menores ou iguais a D ($d \leq D$).

O conceito de fractais foi introduzido por Mandelbrot [41] e recentemente ganhou considerável interesse teórico e experimental [42,43,44]. O caráter fractal dos meios porosos tem sido documentado na literatura por vários autores [43,44]. As micrografias, Figuras 3.3 à 3.9, mostram um meio com porosidade variando de acordo com uma hierarquia de escalas. Na Figura 3.2, plota-se $\ln(V_s(D))$ versus $\ln(D)$. Observa-se que os valores calculados de $\ln(V_s(D))$ seguem aproximadamente uma relação linear com $\ln(D)$, com um coeficiente de correlação de 0,969 [45].

Pela teoria fractal de Mandelbrot[41], a reta da Figura 3.2 indica que a distribuição de volume de poros da argamassa de cimento e cal segue uma lei de escala, pois,

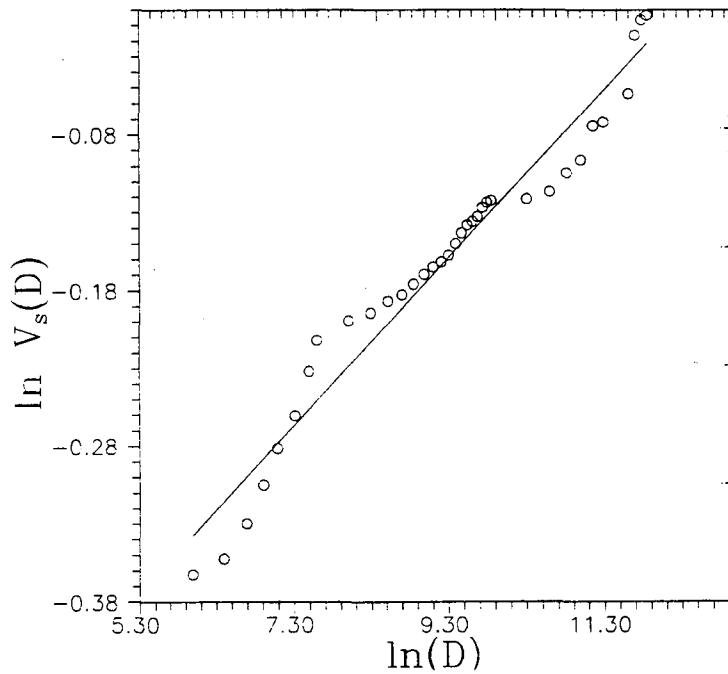


Figura 3.2 - Lei de escala para a distribuição em volume dos poros da argamassa de cimento e cal. Philippi et alii [45].

$$\frac{\ln V_s(D)}{\ln D} = \text{invariante} \quad (3.2)$$

onde a invariante representa a inclinação da reta.

Definindo-se a invariante como $3 - D_f$, tem-se

$$\frac{\ln V_s(D)}{\ln D} = 3 - D_f \quad (3.3)$$

e, desse modo

$$V_s(D) = C.D^{3-D_f} \quad (3.4)$$

onde D_f é a dimensão de Hausdorff, ou dimensão fractal, e C é uma constante de proporcionalidade. No presente caso, $D_f = 2,947505$, e $C = 0,528908$.

Combinando as Equações (3.1) e (3.4), obtém-se:

$$V_p(d \leq D) = C.D^{3-D_f} - 1 + \varepsilon \quad (3.5)$$

ou,

$$V_p(d \leq D) = 0,528908.D^{0,052495} - 0,695776, \quad 200 \text{ \AA} \leq D \leq 186000 \text{ \AA}, \quad (3.6)$$

e que representa a distribuição em volume dos poros da argamassa de cimento e cal utilizada neste trabalho.

3.3 - Concepção do modelo

Micrografias obtidas com um microscópio eletrônico de varredura evidenciam, no material analisado, a presença de uma extensa rede de fissuras em volta e entre os grãos de areia, constituindo uma fonte de acesso privilegiado ao interior do material. Observa-se também macroporos (poros com $D > 10000 \text{ \AA}$) desconectados e separados por aglomerados de microporos (poros com $D \leq 10000 \text{ \AA}$) conectados e ainda cristais de alumina, em forma de partículas lisas de contraste diferenciado e com dimensões entre 10 e 30 μm Figuras 3.3 à 3.9.

Na Figura 3.3 mostra-se uma micrografia de uma amostra polida, com uma ampliação de 50X. Com esta ampliação observa-se os grãos de areia fina, os macroporos e a pasta de ligantes que aparece como um meio homogêneo, com inclusões de ar de tamanho comparáveis aos grãos

de areia. Com uma ampliação de 400X, Figura 3.4, observa-se a rede de fissuras separando os grãos de areia da pasta de ligantes. Na Figura 3.5, as fissuras são evidenciadas também, mesmo em superfícies de amostras fraturadas, conservadas à temperatura ambiente. Neste caso não houve influência dos processos de secagem e evaporação da resina.

A presença de fissuras em argamassas é evidenciada por vários autores [29,49,50]. Saliba[29] simula a transferência de umidade numa argamassa de cimento através de uma modelagem incluindo fissuras. Pedrini [51] em experimentos com porosímetro de expansão de mercúrio, para a argamassa de cimento e cal, analisada neste trabalho, obtém uma pressão crítica de injeção de 100 psi, correspondendo a um diâmetro de poro de aproximadamente 1 μm que é o diâmetro crítico das fissuras evidenciada pelas micrografias, Figura 4.20.

Na ampliação de 800X, Figura 3.6, aparecem os primeiros detalhes da estrutura porosa da pasta de ligantes, e mostra poros de 1 à 3 μm de diâmetro desconectados uns dos outros.

Nas Figuras 3.7 à 3.9 são mostrados detalhes com maior clareza da estrutura porosa da pasta de ligantes. Nestas ampliações verifica-se que no espaço existe uma alta conectividade entre os poros. No plano, no entanto, é visível, Figura 3.8, a separação dos poros maiores por redes vasculares isoladas em ilhas de poros. Estas ilhas são formadas por poros gel e por pequenos poros capilares ($D < 1000 \text{ \AA}$), Figura 3.9.

Esta observação confirma, como na ampliação de 800X, Figura 3.6, a existência de uma aparente auto-semelhança entre as escalas, no que se refere à distribuição dos poros.

A análise das micrografias representa um suporte para o estabelecimento de modelos matemáticos que simulam a estrutura porosa e os processos de transferência de umidade nos espaços porosos de uma argamassa de cimento e cal.

As micrografias, mostram uma hierarquia de escalas, onde nas micrografias de baixa ampliação observa-se fissuras sempre ao redor dos grãos de areia e macroporos não conectados

entre si, mas separados por agrupamentos de microporos conectados, isolados em ilhas, representado pelas micrografias de maior ampliação.

Estas micrografias, aqui apresentadas, evidenciam o caráter heterogêneo do material estudado, configurado através desta hierarquia de escalas.

Na última década, redes de percolação têm sido utilizadas [7,11,13,22] para simular a estrutura porosa, concebida como uma rede de cavidades com geometria e tamanho definidos e homogeneamente distribuídos no espaço. Desse modo, em função do caráter heterogêneo da estrutura porosa, fica difícil simular toda a gama de diâmetros, que compõem o meio poroso, pelos processos usuais de percolação [40,52,53,54,55] e por modelos como o de domínios independentes de Mualen [56], (a distribuição de gargantas é independente da distribuição de poros).

A distribuição em volume dos poros da argamassa mostra ainda, que o diâmetro varia entre 200 Å e aproximadamente 140000 Å, o que representa uma razão de diâmetro da ordem de 10^3 . Também através das análises nas micrografias, [39], observa-se que os poros pequenos são bastantes representativos da porosidade do meio, em torno de 40% do total, e que o volume dos mesmos é comparável ao volume dos grandes poros.

Neste trabalho considera-se que cada elemento da rede representativa da estrutura porosa denota um poro, caracterizado por um diâmetro. Pelo exposto acima é impossível, desta forma, representar toda a gama de diâmetros que constitui o material poroso. Desse modo as fissuras e os macroporos não são levados em conta numa primeira etapa da simulação, que distribui os poros de maneira homogênea, usando um gerador de números aleatórios, sem levar em conta disposições privilegiadas através de uma função de correlação, Figura 3.10.

A modelagem compreende somente os poros com diâmetros iguais e superiores à 1000 Å, e que são invadidos a uma umidade relativa entre 98 e 100%. Admite-se aqui, que os poros com diâmetros inferiores à 1000 Å estão continuamente preenchidos de líquido e não interferem nos processos de invasão. O potencial de interação superfície sólida/fase líquida é muito elevado

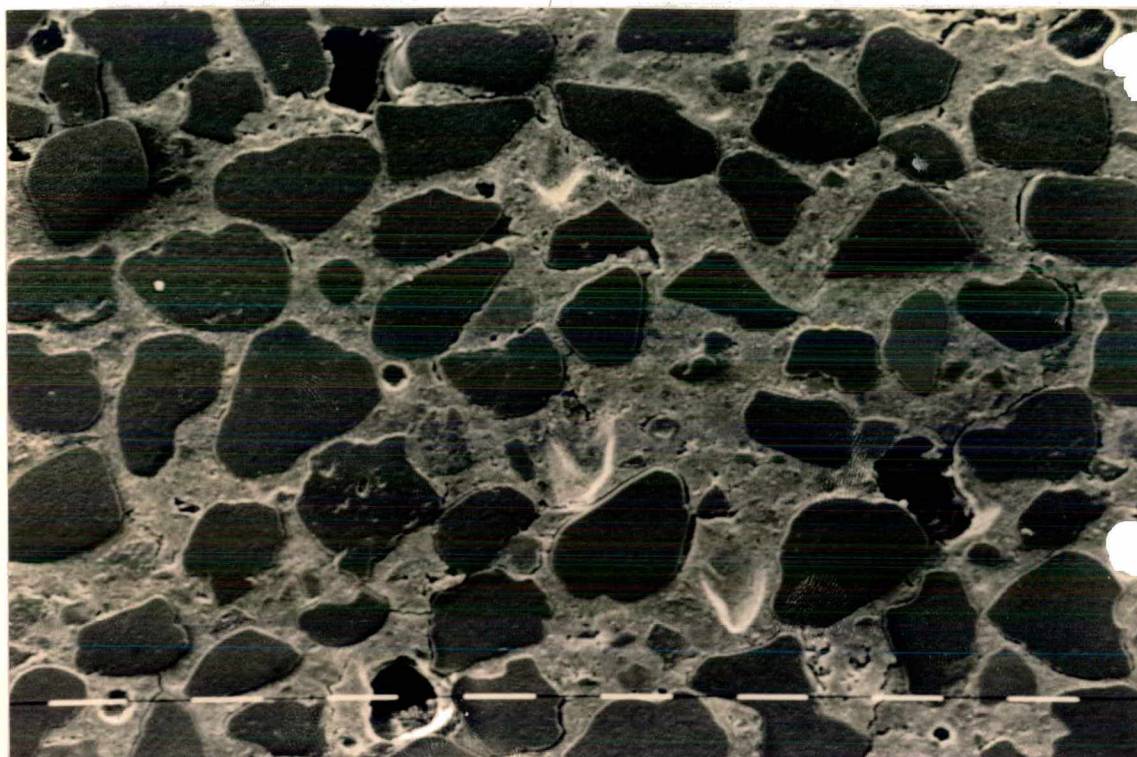


Figura 3.3 - Micrografia da argamassa de cimento e cal.
Ampliação 50X. Escala 100 μ m. Amostra polida [39].



Figura 3.4 - Micrografia da argamassa de cimento e cal.
Ampliação 400X. Escala 10 μ m. Amostra polida [39].

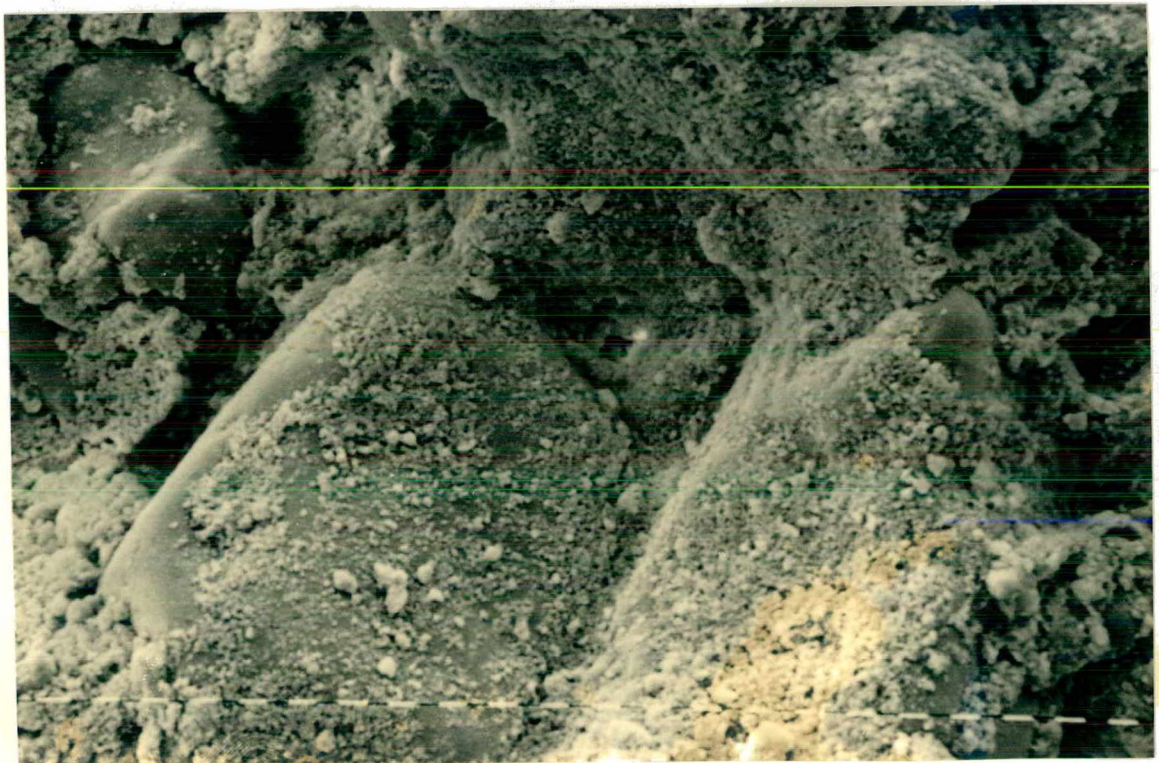
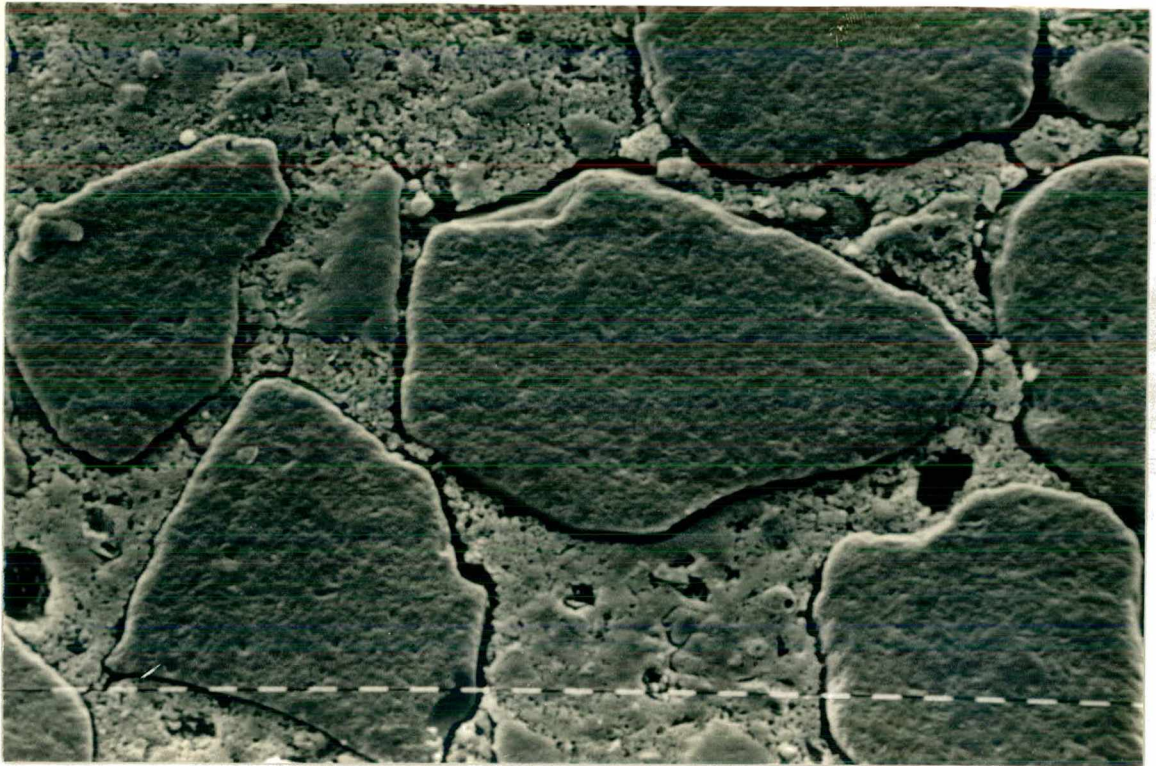


Figura 3.5 - Micrografia da argamassa de cimento e cal.
Ampliação 200X. Escala 10 μ m. (a) Amostra polida; (b) Fratura [39].

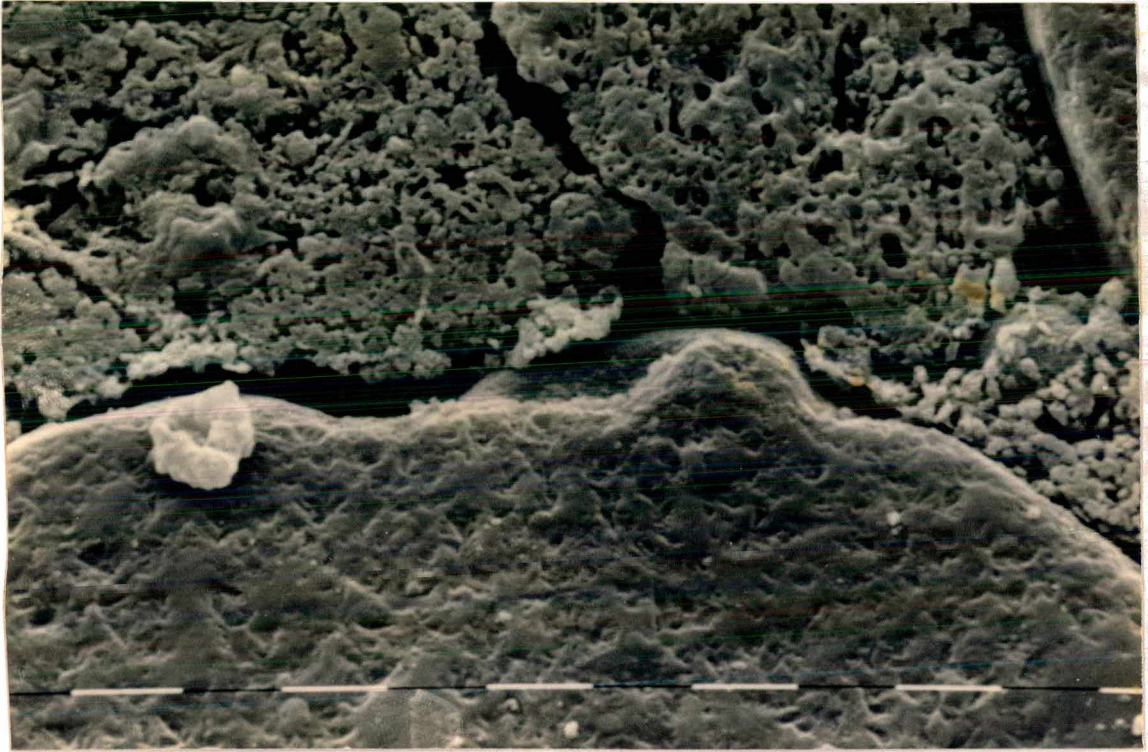


Figura 3.6 - Micrografia da argamassa de cimento e cal.
Ampliação 800X. Escala 10 μ m. Amostra polida [39].

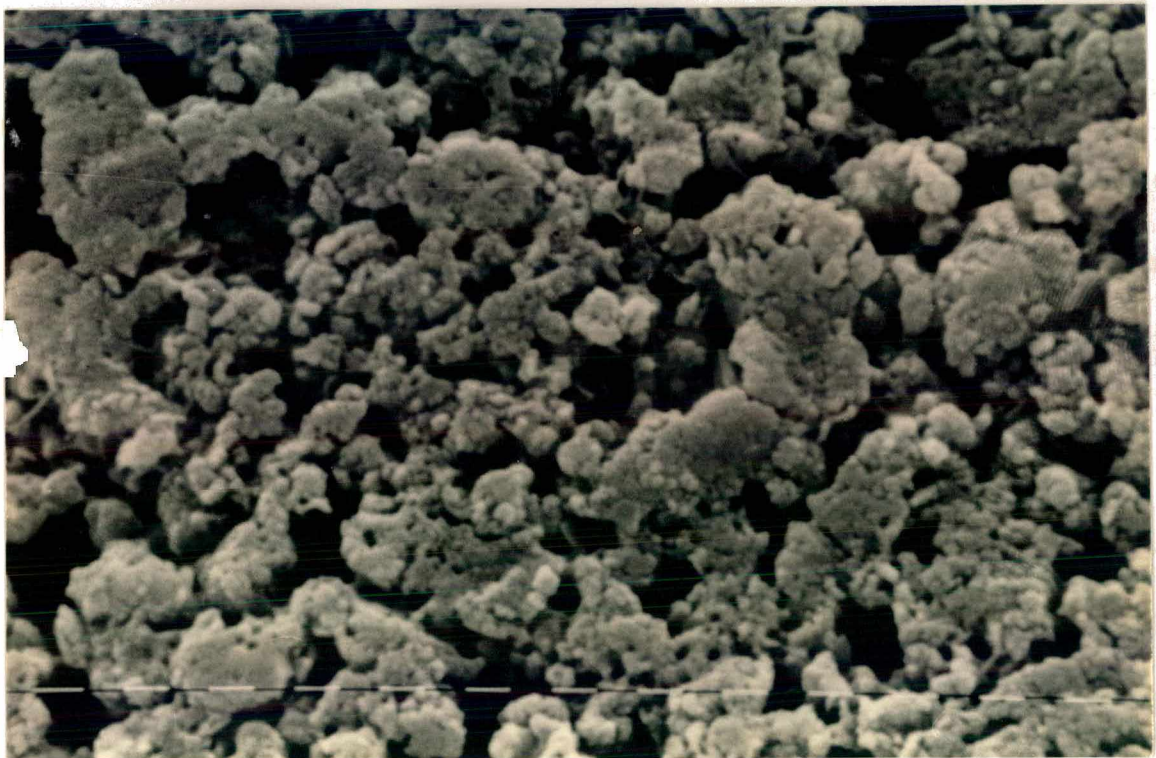


Figura 3.7 - Micrografia da argamassa de cimento e cal.
Ampliação 3200X. Escala 1 μ m. Amostra polida [39].

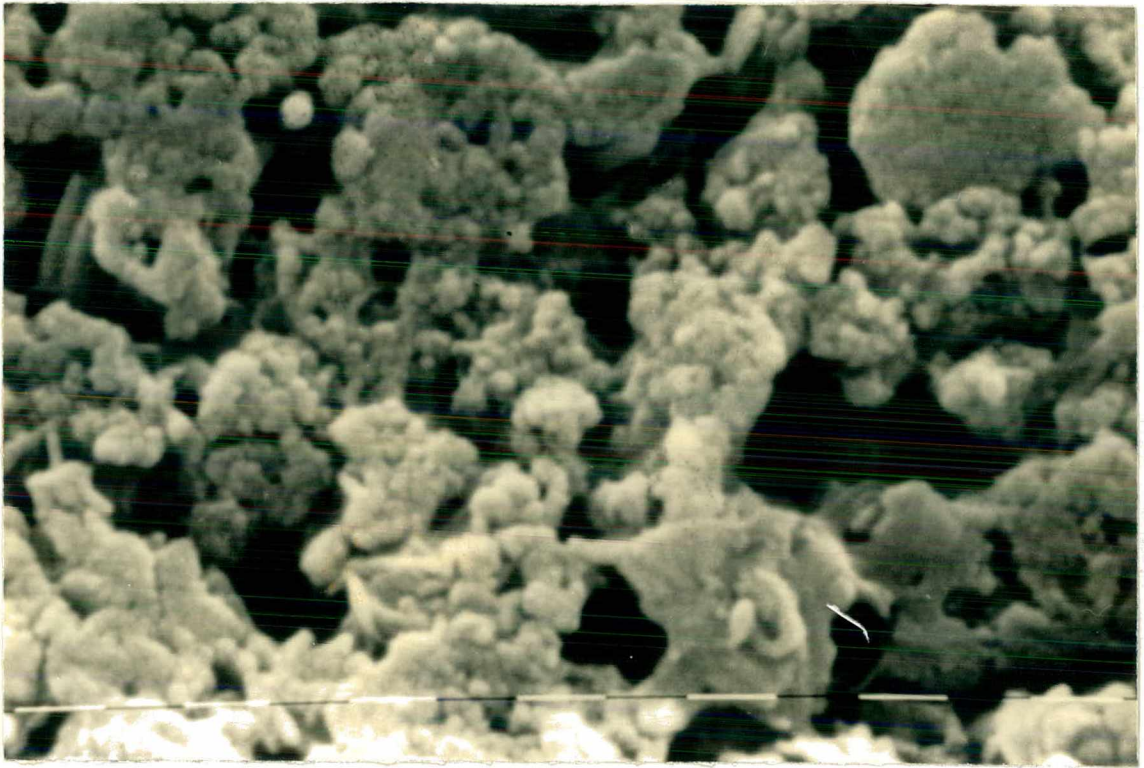


Figura 3.8 - Micrografia da argamassa de cimento e cal.
Ampliação 6400X. Escala 1 μ m. Amostra polida [39].

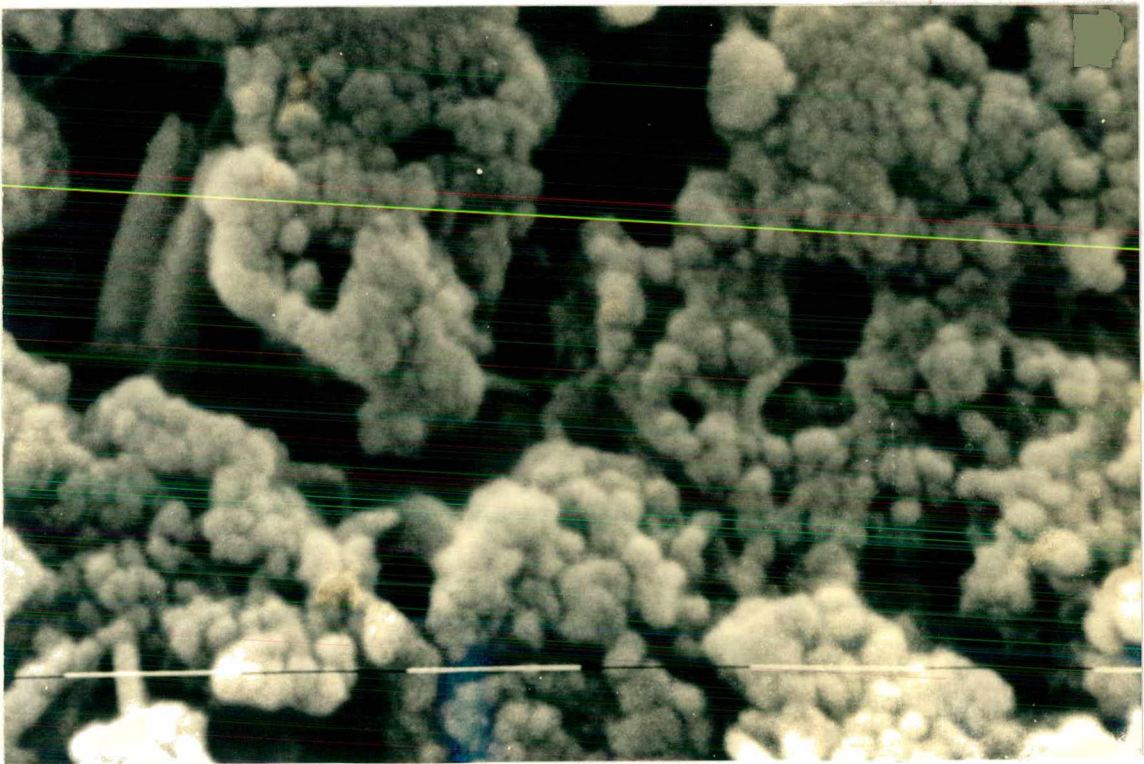


Figura 3.9- Micrografia da argamassa de cimento e cal.
Ampliação 12500X. Escala 1 μ m. Amostra polida [39].

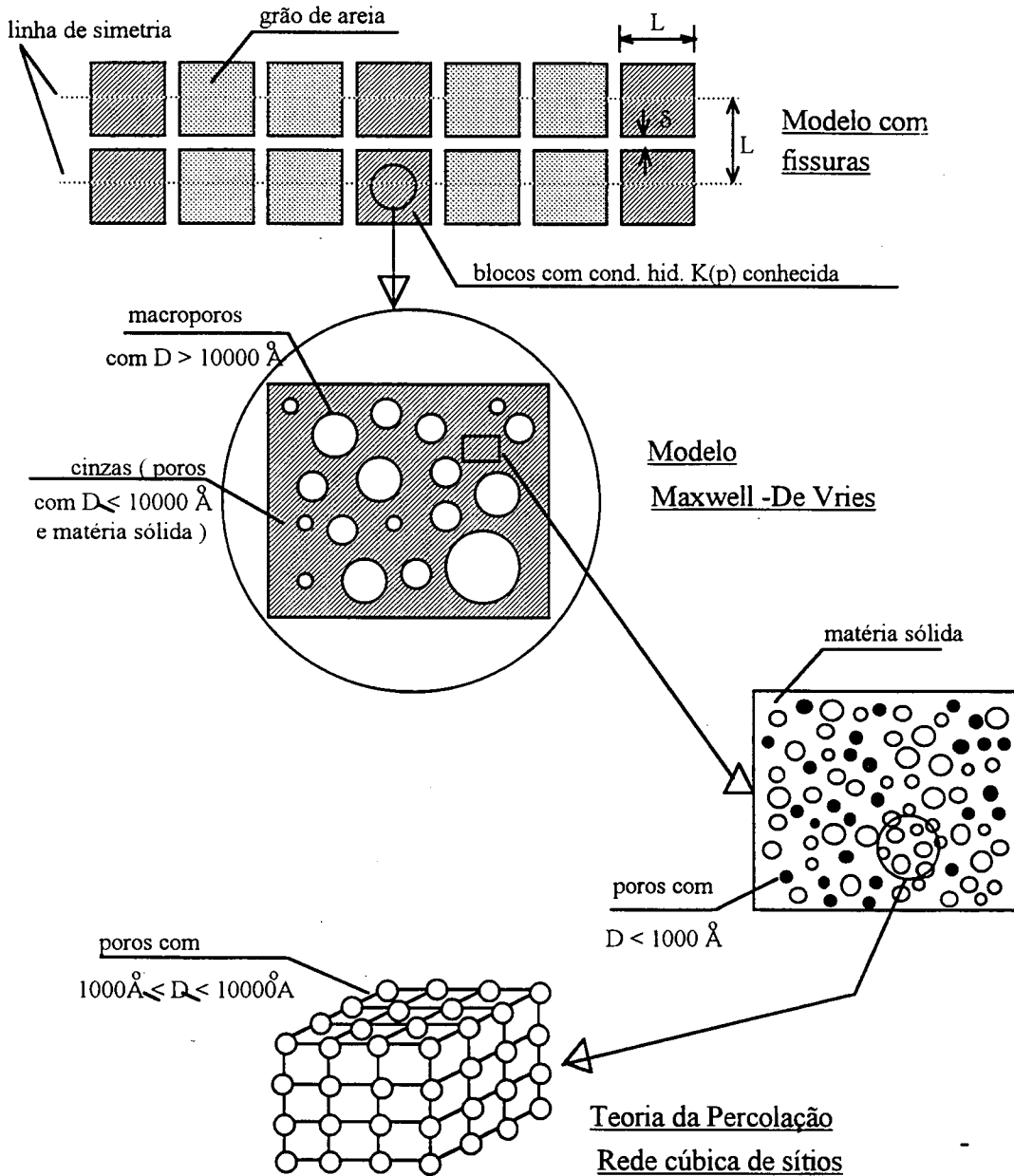


Figura 3.10 - Esquema mostrando os modelos representativos do meio poroso, para as três etapas de simulação.

para poros com diâmetros inferiores à 1000 \AA ($R < 500 \text{ \AA}$). Nesta situação a fase líquida está sujeita a elevadas forças de interação, não havendo movimento da mesma.

Simula-se com a rede de percolação somente os microporos, ou mais precisamente, a faixa de diâmetros de 1000 à 10000 Å. Para o restante, Figura 3.10, ainda excluindo as fissuras, aplica-se um modelo similar ao de Maxwell-De Vries [4], inspirado num modelo adotado em eletrostática, destinado a representar a constante dielétrica de um sólido formado por uma mistura de vários componentes. No capítulo 5 descreve-se este modelo. Por último simula-se o meio incluindo a rede de fissuras, capítulo 6.

3.4 - Concepção da rede para poros com $1000\text{Å} \leq D \leq 10000\text{Å}$

Numa primeira análise neste trabalho utiliza-se as redes bidimensionais quadradas (2-D), e após o conhecimento e domínio do mecanismo de solução passa-se às redes cúbicas(3-D). As redes tridimensionais representam melhor a estrutura porosa do material porque não desprezam os efeitos de conectividade entre os poros, evidenciados pela análise nas micrografias, apresentadas nas Figuras 3.3 à 3.9. Estas micrografias mostram que no espaço há uma alta conectividade entre os poros, dado que fica um pouco mascarado nas redes bidimensionais quadradas.

Nestas redes os poros podem ser ordenados de forma que aqueles poros de uma dada dimensão tendem a se reagrupar dentro de uma mesma região da rede. Na literatura, vários autores [7,13,14,29] alternativamente, utilizam uma correlação entre as dimensões dos sítios e as dimensões das ligações que conectam ou não os sítios.

Neste trabalho utiliza-se uma rede de percolação não ordenada somente de sítios, Figura 3.10. Os sítios são divididos em classes representando cada uma delas um diâmetro. Cada sítio, que representa um poro, se distingue pelo seu diâmetro (D_s), e obedece uma distribuição em isonúmeros. Uma distribuição em isonúmeros garante que cada classe de diâmetro tem a mesma probabilidade de ocorrência na rede.

Várias formas geométricas para representar os poros são utilizadas.^{1*} Pressupõe-se que a forma pela qual se representa o poro não interfere nos resultados, mas apenas simplifica, ou não, a solução. Uma rede somente de sítios pode ser entendida também como uma rede onde as ligações (gargantas) são consideradas com volume desprezável e atuam apenas como uma resistência ao escoamento. Aqui os sítios são admitidos esféricos e cada um deles representa um poro.

A técnica usada para gerar uma rede geométrica bidimensional ou uma rede tridimensional, onde os sítios da rede representam poros de vários tamanhos, distribuídos randomicamente sobre a rede, é descrita a seguir: (i) decidida a geometria e o tamanho da rede, os sítios, no caso de uma rede tridimensional, são referenciados pelos números inteiros i ($i = 1, 2, \dots, N$), j ($j = 1, 2, \dots, N$) e k ($k = 1, 2, \dots, N$), N sendo o tamanho da rede e N^3 representando o número total de sítios na rede. O posicionamento dos sítios na rede começa no canto superior esquerdo da face frontal da rede e termina no canto inferior direito da face oposta, Figura 3.11. (ii) com uma rotina geradora de números randômicos, um vetor de números aleatórios entre 0 e 1 é gerado. Comparando a proporção acumulada em número de cada classe de diâmetro com os elementos do vetor randômico unidimensional gerado, obtém-se a rede de sítios aleatoriamente distribuídos, Tabela 3.3.

1

* Na literatura, são apresentadas várias formas geométricas de poros. Lenormand et alii [28] utilizam a forma quadrada para levarem em conta os escoamentos da fase molhante nos cantos. Chatzis e Dullien [13,14] usam a forma angulosa de modo que os poros são completamente preenchidos pela fase não molhante somente à uma pressão capilar infinita. Yanuka et alii [26,27,28] descrevem o poro por uma elipsóide dentro de redes cúbicas, com características semelhantes às redes apresentadas por Saliba [29]. Saliba utiliza a forma cilíndrica. Androuspoulos e Mann [46] utilizam redes quadradas de ligações cilíndricas e cuja dimensão segue uma distribuição log-normal. O mesmo modelo é explorado por Mann et alii [47]. Payatakes et alii [31,32] representam os poros por tubos com constrições em redes cúbicas. Koplik [22] representa os poros por câmeras esféricas conectadas por gargantas cilíndricas em redes bidimensionais.

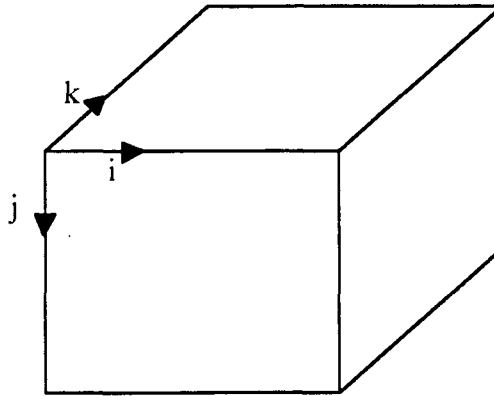


Figura 3.11- Esquema do sistema de referência da rede 3-D.

3.4.1 - Geração da rede

A rede é obtida através de um gerador de número aleatórios da seguinte forma. Arbitra-se um certo número z_0 , denominado semente. Com a ajuda de uma sucessão de operações, absolutamente determinadas, este número se transforma em um novo número,

$$z_1 = f(z_0), \quad (3.7)$$

onde f é a função que representa a sucessão de operações transformando z_0 em z_1 . Esta função, determina o algoritmo de geração dos números aleatórios. O processo é repetido de forma que o número z_1 sirva de base para a obtenção do seguinte, segundo a mesma sequência e assim sucessivamente,

$$z_2 = f(z_1). \quad (3.8)$$

Tabela 3.3 - As classes de diâmetros de poro utilizadas na geração da rede de sítios.

Diâmetro(Å)	Proporção acum. em número	Diâmetro(Å)	Proporção acum. em número
1-1017,0	0,0475	16-1621,0	0,7600
2-1034,0	0,0950	17-1746,0	0,8075
3-1054,0	0,1425	18-1921,0	0,8550
4-1074,0	0,1900	19-2195,0	0,9025
5-1096,0	0,2375	20-2743,0	0,9500
6-1120,0	0,2850	21-2841,0	0,9550
7-1147,0	0,3325	22-2954,0	0,9600
8-1176,0	0,3800	23-3086,0	0,9650
9-1208,0	0,4275	24-3246,30	0,9700
10-1244,0	0,4750	25-3445,0	0,9750
11-1285,0	0,5225	26-3702,0	0,9800
12-1331,0	0,5700	27-4058,0	0,9850
13-1385,0	0,6175	28-4602,0	0,9900
14-1448,0	0,6650	29-5634,0	0,9950
15-1525,0	0,7125	30-10000,0	1,0000

A função f está estruturada de modo que todos os números $z_1, z_2, z_3, \dots, z_n$ satisfaçam as desigualdades $0 \leq z_n \leq 1$. Os números z_n são os números aleatórios procurados.

Utiliza-se como equação base para o gerador, a expressão mostrada em `ran1()`, que é uma rotina que faz parte da biblioteca do Turbo C [48]. O gerador se apresenta da seguinte forma:

```
static long int a = 100001; ( a é a semente )
a = ( a x 125 ) % 2796203;
return ( float ) a / 2796203;
```

(3.9)

O número aleatório é um inteiro (`long int`), mesmo que a função retorne ponto flutuante (`float`). Mas, por convenção, espera-se que os geradores de números aleatórios retornem um número entre 0 e 1, o que significa um ponto flutuante. Isto ocorre porque números aleatórios são frequentemente usados nas simulações probabilísticas que requerem valores neste intervalo. Para a função acima, este intervalo é obtido quando o número é dividido por 2796203 antes de a função retornar.

Na função acima a semente, ou valor inicial $a=100001$, é dada e o método fornece o valor da semente para a próxima chamada. Embora esta característica seja satisfatória para a obtenção de uma sequência bem uniforme, faz-se neste trabalho, o truncamento da sequência gerada, através de um contador, utilizando-se somente parte da sequência. Na prática isto significa a mudança da semente e conseqüentemente sequências diferentes. Esta rotina fornece uma sequência aleatória bastante uniforme [48].

Para se obter uma disposição aleatória dos sítios na rede, compara-se o número z_n com a proporção acumulada em número de cada tipo de diâmetro, no sentido crescente do diâmetro. Desse modo dispõe-se todas as classes aleatoriamente distribuídas na rede em função do número z_n .

Na Figura 2.2 mostra-se esquemas de redes bidimensionais e tridimensionais constituídas de sítios e ligações.

3.4.2 - Frequência em número

Uma distribuição em isonúmero consiste de uma distribuição onde os poros são divididos em N classes, cada uma das quais com a mesma proporção numérica na rede.

Da Equação (3.5) obtém-se:

$$\frac{dV_p}{dD} = (3 - D_f) \cdot C \cdot D^{2-D_f}, \quad (3.10)$$

e, para poros esféricos,

$$dV_p = \frac{\pi D^3}{6} dn, \quad (3.11)$$

onde n é a frequência relativa e desse modo a frequência em número de cada diâmetro é dada por:

$$n = \frac{\int_{D_{\min}}^D \frac{dV_p / dD}{\pi D^3 / 6} dD}{\int_{D_{\min}}^{D_{\max}} \frac{dV_p / dD}{\pi D^3 / 6} dD}. \quad (3.12)$$

Para o presente caso, onde $D_f = 2,947505$, $C = 0,528908$, $D_{\min} = 1000\text{Å}$ e $D_{\max} = 10000\text{Å}$, obtém-se:

$$n = \frac{\int_{D_{\min}}^D \frac{(3 - D_f) \cdot C \cdot D^{[2-D_f]}}{\left[\frac{\pi D^3}{6} \right]} dD}{\int_{D_{\min}}^{D_{\max}} \frac{(3 - D_f) \cdot C \cdot D^{[2-D_f]}}{\left[\frac{\pi D^3}{6} \right]} dD} = \frac{\int_{D_{\min}}^D \frac{6(3 - D_f)}{\pi} \cdot D^{-[1+D_f]} dD}{\int_{D_{\min}}^{D_{\max}} \frac{6(3 - D_f)}{\pi} \cdot D^{-[1+D_f]} dD} = 1,00113 - 6,96635D^{-2,947505}. \quad (3.13)$$

Na Figura 3.12 mostra-se a curva de frequência para a faixa de diâmetros entre 1000 e 10000 Å.

Utiliza-se 30 classes de diâmetros de poro entre 1000 e 10000 Å. Destas 30 classes, as primeiras 20 classes correspondem à uma proporção acumulada em número igual à 0,95 e as 10 classes restantes correspondem à uma proporção acumulada entre 0,95 e 1,0 (Tabela 3.3 e Figura 3.12).

Observa-se através da Figura 3.12 que a frequência em número concentra um maior número de classes de diâmetros de poro próximo do diâmetro mínimo do intervalo considerado (entre 1000 e 10000 Å).

Uma distribuição em isovolume, para a distribuição em volume dos poros da argamassa usada, Equação (3.5), apresenta as classes de diâmetros de forma mais uniforme no intervalo. No entanto, a distribuição em isonúmero apresenta uma vantagem em relação à distribuição em isovolume, principalmente, durante a simulação do processo de invasão de uma fase não molhante (que ocorre no sentido decrescente dos diâmetros dos poros) fornecendo mais pontos acima do limite de percolação, em função do maior número de classes de diâmetros próximo de D_{\min} . Este dado fica mascarado com a distribuição em isovolume uma vez que as classes são mais uniformemente distribuídas.

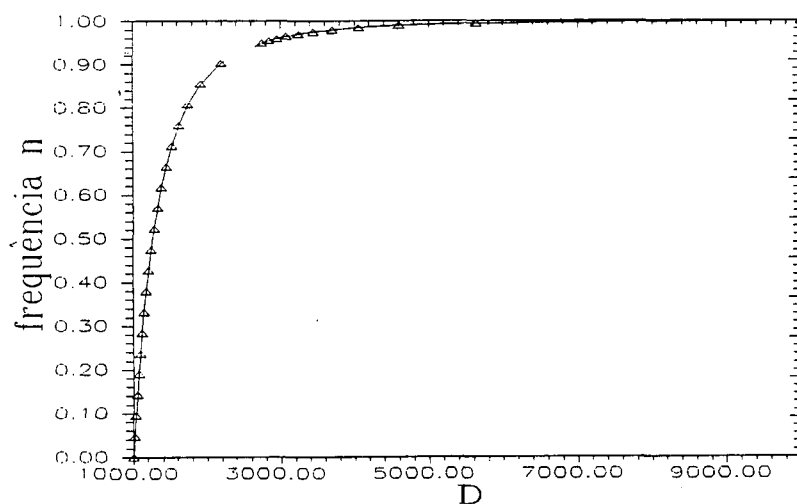


Figura 3.12 - Frequência em número

3.5 - Modelo de Maxwell-De Vries para poros com $D > 10000\text{\AA}$

Neste trabalho utiliza-se um modelo similar ao de Maxwell-De Vries [4] para simular a condutividade hidráulica na faixa de diâmetros de poro acima de 10000\AA .

O modelo aqui usado, inspirado no modelo proposto por De Vries [4], consiste de um meio contínuo contendo elementos esféricos distribuídos aleatoriamente, Figura 3.13. O meio contínuo representa a fração cinza, que inclui os poros com diâmetros menores ou iguais à 10000\AA (microporos) e matéria sólida; e os elementos esféricos representam os poros com diâmetros acima de 10000\AA (macroporos).

A observação da micrografia apresentada na Figura 3.9 mostra que os poros com diâmetro acima de 10000\AA aparecem desconectados uns dos outros. Esta informação indica que, ao menos no plano, a conectividade entre os poros se dá através de gargantas. Dessa forma pode-se dizer ser adequada a modelagem da estrutura porosa através do modelo físico bidimensional mostrado na Figura 3.13, onde num meio contínuo há cavidades distribuídas e separadas umas das outras.

Este modelo permite aplicar uma relação linear entre o vetor fluxo de massa e o gradiente do potencial motor (umidade relativa ou pressão). O coeficiente escalar desta lei (condutividade hidráulica) é constante dentro de cada constituinte. No modelo o meio se compõe de um constituinte principal, contido dentro do elemento de volume representativo, e dos constituintes adicionais sob a forma de esferas isoladas umas das outras [4].

A escolha da forma geométrica, não altera qualitativamente os resultados da simulação. De Vries [4] utiliza a forma esférica e resolve de forma exata as equações fornecidas pela relação linear entre o fluxo e o gradiente do potencial e a lei de conservação.

Com este modelo é possível expressar a condutividade hidráulica deste meio utilizando a condutividade e a fração de volume de seus constituintes (microporos e macroporos).

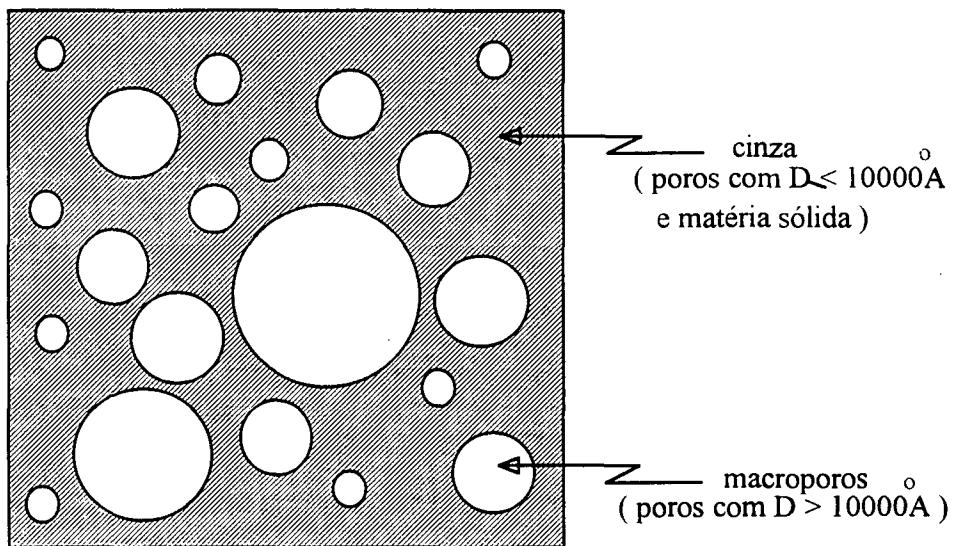


Figura 3.13 - Modelo físico para a modelagem de microporos e macroporos.

3.6 - Modelo para as fissuras

As micrografias, Figuras 3.3 à 3.9, evidenciam a presença de fissuras separando os grãos de areia da pasta de ligantes e também macroporos dispostos nunca juntos uns dos outros, mas separados por aglomerados de microporos conectados. Estas fissuras constituem uma fonte de acesso privilegiado ao interior da estrutura porosa, ocasionando um aumento significativo da condutividade hidráulica.

Estas características da estrutura porosa mostradas pelas micrografias, Figuras 3.3 à 3.9, deixam claro o caráter heterogêneo do meio.

Portanto, a forma como se trata os poros com diâmetros acima de 10000 Å dentro do meio analisado, não representa bem a estrutura porosa com fissuras: distribui-se, de fato, todos os poros aleatoriamente dentro do espaço poroso, enquanto que as fissuras aparecem seguindo as superfícies de ruptura mecânica.

Assim, a presença desses caminhos preferenciais dentro do meio poroso, exige uma modelagem diferente na obtenção dos coeficientes de transferência.

Na área de Engenharia do Petróleo tem sido apresentados modelos, para meios porosos com fissuras, concebidos como uma rede de blocos (esferas, cubos, placas) e fissuras [57,58,59]. Frequentemente nestes modelos (uma fissura horizontal infinita separando ao meio um espaço poroso) a difusão de massa ocorre horizontalmente na fissura e verticalmente nos blocos e também ocorre convecção ao longo da fissura associada ao movimento do fluido. O fluido é injetado na (ou extraído da) fissura sob uma pressão constante. Cinco-ley et alii [57,58] analisam numericamente estes modelos, admitindo uma fissura de comprimento finito e fluxo bidimensional nos blocos. Kissling e Young [59] apresentam uma solução analítica e como no modelo de Cinco-ley et alii [57,58] incluem o fluxo bidimensional nos blocos. Saliba [29] calcula a difusão capilar dentro de uma fissura, dadas a densidade, a condutividade equivalente e a pressão capilar, e acopla a um cálculo de difusão não linear num meio não saturado que envolve a fissura. O autor estuda a sensibilidade à condutividade e à densidade de fissuração dentro dos processos de secagem e de embebição.

Apresenta-se um modelo bidimensional para um meio com fissuras, Figura 3.14. Os caminhos preferenciais são dispostos seguindo um esquema regular.

Simula-se a embebição e os resultados são comparados com resultados experimentais.

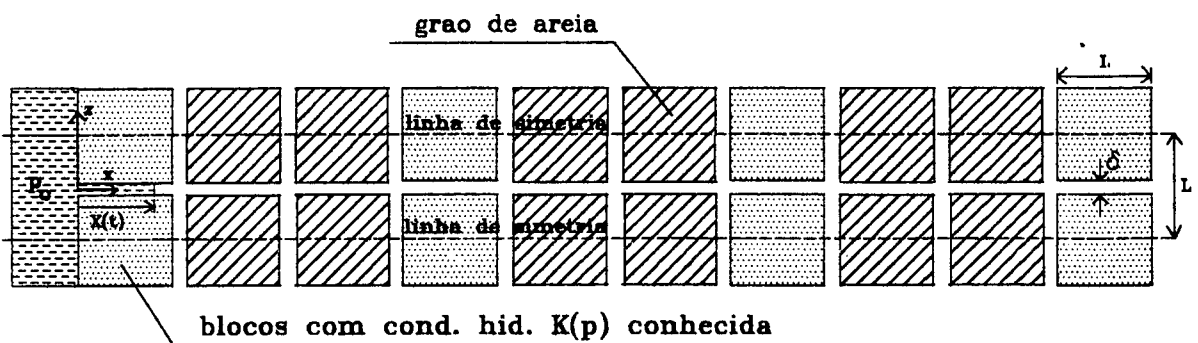


Figura 3.14 - Modelo físico para a modelagem da estrutura porosa com fissuras.

4 - PROCESSOS DE INVASÃO

4.1 - Introdução

Quando o meio poroso é colocado em contato com um fluido molhante ou não molhante, Figura 4.1, a fase fluida vai penetrar dentro dos poros sob o efeito das forças capilares (lei de Laplace). No deslocamento de dois fluidos imiscíveis através dos poros, os fluidos são separados um do outro por uma interface, com uma tensão interfacial diferente de zero. A curvatura desta interface está associada a uma diferença de pressão entre os dois lados da interface, chamada pressão capilar [60]. A pressão é sempre maior no fluido localizado no lado côncavo do menisco.

Na literatura são apresentados muitos trabalhos onde são realizados estudos a nível de poro, dos fluxos bifásicos imiscíveis a baixas velocidades em canais de dimensões microscópicas [61- 80]. Payatakes et alii [31,32] , Ganoulis [33] e Lenormand et alii [38] analisam em seus trabalhos, os mecanismos de deslocamento de uma interface bifásica num poro concebido como um tubo contraído, um tubo convergente-divergente e um canal de seção quadrada, respectivamente. Chandler et alii [74] modelam o deslocamento de fluidos imiscíveis no material poroso numa rede bidimensional aleatória finita usando o procedimento de Monte Carlo. Usam a teoria da percolação, incluindo uma lei de escala para predizer a fração residual de volume dos fluidos . A teoria da percolação também é usada no trabalho de Larson et alii [75].

O caráter heterogêneo da estrutura porosa, da argamassa de cimento e cal estudada, impede simular todo o espectro de diâmetros dos poros, através dos processos usuais de percolação. Por outro lado é difícil modelar a estrutura porosa da argamassa por uma rede, onde cada elemento desta rede represente um único poro, em função da ampla faixa de diâmetros, Tabela 3.1 (capítulo 3). De acordo com o que foi apresentado no capítulo 3, numa primeira etapa da simulação utiliza-se um rede cúbica de sítios, distribuindo-se os poros com diâmetros entre 1000 e 10000 Å de maneira homogênea, usando-se um gerador de números aleatórios, sem levar em conta os poros com diâmetros maiores que 10000 Å, desconectados uns dos outros, e as

fissuras. Numa segunda etapa inclui-se os macroporos, poros com diâmetros maiores que 10000 Å, utilizando um modelo similar ao modelo de Maxwell-De Vries. Por último representa-se as fissuras através de um modelo bidimensional plano. Esta modelagem do meio poroso com fissuras é feita com uma malha regular de blocos e as fissuras sendo dispostas regularmente.

Apresenta-se, no presente capítulo, a simulação dos processos de invasão numa rede 3-D de sítios esféricos, distribuídos randomicamente. Cada sítio da rede representa um poro.

O grau de saturação da rede é calculado pela razão entre o volume total dos sítios ocupados pelo fluido molhante e o volume de todos os sítios que compõem a rede.

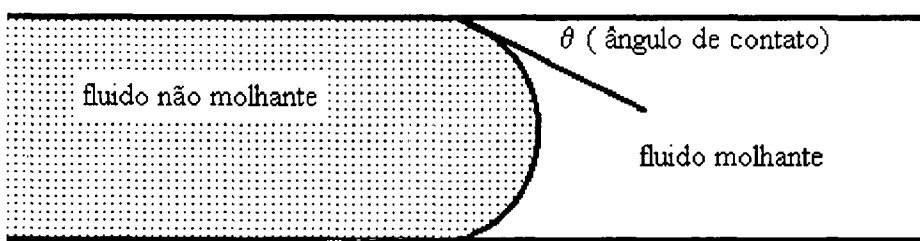


Figura 4.1 - Deslocamento imiscível de dois fluidos.

4.2 - Embebição/adsorção/umidificação e drenagem/dessorção/desumidificação

O estudo dos processos de invasão capilar num meio poroso consiste, de uma forma mais geral, em estabelecer as relações entre o fluxo mássico e o gradiente motor (pressão capilar ou umidade relativa). Esta análise, dentro de um meio poroso, torna-se difícil por dois fatores. O primeiro fator está associado à presença simultânea da água em duas fases: a fase gasosa e a fase condensada. De outra parte, os limites geométricos complexos, dentro dos quais ocorrem o fenômeno de transferência, impostos pela estrutura do espaço poroso.

Para cada estado de equilíbrio caracterizado por um valor de uma variável de estado (umidade relativa ou pressão capilar), em jogo durante o fenômeno de transferência, pode-se

determinar o estado de ocupação de todos os poros (também dos elementos do modelo geométrico, representativo do meio poroso) pela fase molhante e/ou pela fase não molhante. A divisão espacial destas duas fases depende no entanto, a uma dada saturação, do sentido de evolução da pressão capilar ou umidade relativa. Do ponto de vista do fenômeno de transferência distingue-se os processos de embebição e drenagem.

A embebição é um fenômeno de ocupação capilar dos poros, no sentido crescente dos diâmetros, quando o meio poroso é colocado em contato com a água líquida cuja pressão cresce, a partir de um valor mínimo, correspondente ao raio do menor poro, Figura 4.2. Uma classe de diâmetros de poros é inteiramente invadida pela água capilar desde que satisfaça a condição de pressão capilar, segundo a lei de Laplace.

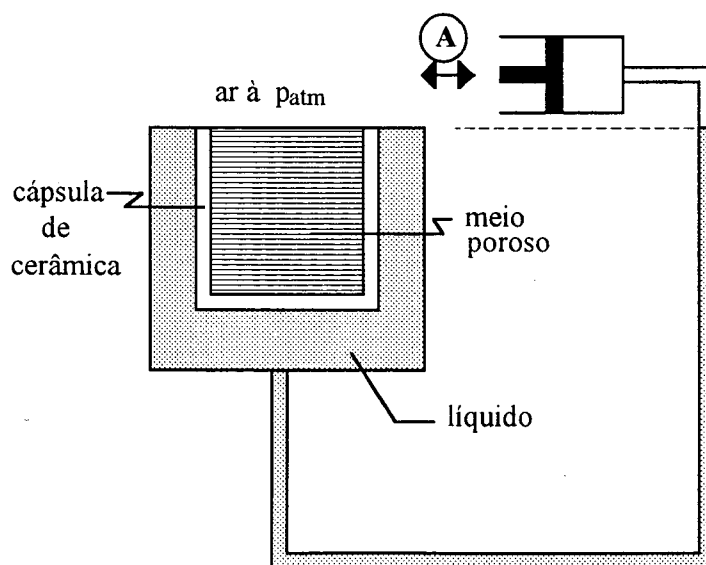


Figura 4.2 - Esquema de um dispositivo para ensaio dos processos de invasão.

O fenômeno da embebição é comparável ao fenômeno de adsorção isto é, de umidificação por condensação da fase vapor sendo diferenciados, todavia, pelos aspectos cinéticos dos dois processos. A embebição ocorre de forma mais rápida ocasionando a formação de bolhas de ar que

ficam retidas no interior de certos poros, e permanecem assim, aprisionadas dentro da fase líquida que invadiu a maior parte do volume poroso. A saturação atingida no processo de embebição é inferior à saturação atingida quando o meio poroso fica por um longo período em contato com o vapor.

A drenagem é um fenômeno de ocupação capilar dos poros, no sentido decrescente dos diâmetros, por uma fase não molhante obedecendo as regras de acessibilidade e conectividade dos poros. Pode-se supor a situação quando a pressão na face de saída, que está em contato com a água, decresce a partir da pressão atmosférica, Figura 4.2. Uma classe de diâmetros de poros é invadida pela fase não molhante somente quando a condição de invasão a nível de poro for satisfeita e, simultaneamente, quando o poro estiver ligado à face de injeção da fase não molhante, por um caminho contínuo de poros não ocupados pela água capilar (fase molhante).

O processo de drenagem é comparável ao fenômeno de dessorção.

4.3 - Invasão por um fluido molhante na rede de sítios

O movimento de filmes de líquido molhante em capilares é importante num fluxo com mais de uma fase através de meios porosos. Estes filmes de líquido em capilares surgem, Figura 4.3, quando uma bolha de gás desloca o fluido perfeitamente molhante do capilar. Assim um subsequente fluxo de líquido neste filme de líquido molhante determina se o filme vai se transformar em camadas de líquido ou meramente em colares estáveis. O problema reduz-se a determinar a configuração limite da interface na qual o colar torna-se instável e o capilar se enche de líquido [104,105,106].

Gauglitz e Radke [105] propõem uma aproximação da equação de Young-Laplace, para poro cilíndrico:

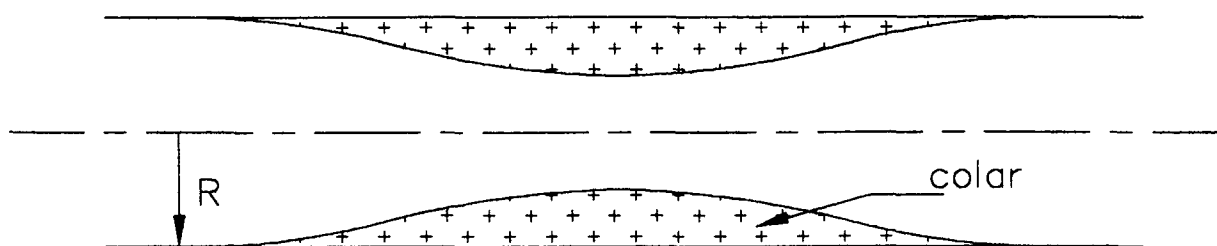


Figura 4.3 - Esquema do filme de líquido molhante dentro de um capilar cilíndrico.

$$p_c = p_g - p_l = 1.43 \frac{\sigma \cos\theta}{R} \quad (4.1)$$

para levarem em conta a estabilidade termodinâmica do menisco de separação das fases líquido/gás quando do preenchimento dos poros por líquido, com ângulo de contato 0° . Na Equação (4.1), p_g é a pressão da fase não molhante, p_l é a pressão da fase molhante, R é o raio do poro, θ é o ângulo de contato, formado pelo fluido molhante e σ é a tensão superficial do líquido.

Para poro esférico,

$$p_c = p_g - p_l = 4.0 \frac{\sigma \cos\theta}{D} \quad (4.2)$$

Na simulação da embebição, a face de entrada da rede está em contato com a água cuja pressão cresce, a partir de um valor mínimo, correspondente ao raio do menor sítio, Figura 4.4.

Estuda-se o comportamento da rede de sítios em presença de um fluido molhante, com o objetivo de simular a embebição e/ou um processo de umidificação. Uma face está em contato com a água, e as outras faces, a menos da face de saída, são assumidas impermeáveis, Figura 4.4. Os sítios são preenchidos no sentido crescente do seu diâmetro, segundo a lei de Laplace.

A invasão por um fluido molhante pode ser considerado como um processo de transferência que não sofre a influência da topologia da rede e neste caso, os sítios são preenchidos a cada etapa de pressão quando a condição de invasão a nível de poro for satisfeita.

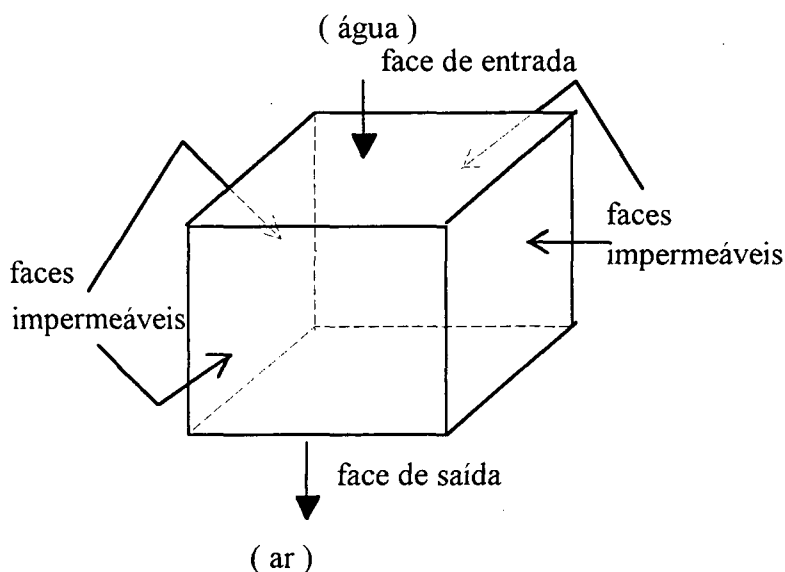


Figura 4.4 - Esquema da direção do processo de invasão em relação à rede cúbica de sítios. Embebição

Um outro modo de simular a invasão por um fluido molhante é levando-se em conta a topologia da rede. Neste caso um sítio é efetivamente preenchido se e somente se ele satisfaz à condição de raio, calculada pela lei de Laplace, e está ligado à face de entrada por um caminho de sítios ativos e cheios (ocupados pela fase molhante).

Neste trabalho a curva de embebição é obtida usando-se o procedimento que considera a conectividade da rede. Desconsidera-se também os efeitos de aprisionamento de ar.

Na Figura 4.5 mostra-se as curvas de embebição obtidas pelos dois procedimentos descritos acima. Estes dois procedimentos podem ser considerados métodos extremos de simular-se o processo de embebição mas se observa através das curvas mostradas na Figura 4.5 que não ocorrem grandes diferenças.

Cada etapa de invasão é representada pela pressão capilar para a qual os sítios podem ser invadidos. Na primeira etapa faz-se $K=1$ ($K=1$ corresponde ao menor diâmetro) e verifica-se os sítios possíveis de serem preenchidos pela fase molhante e que estão em contato com a face de entrada. Em seguida faz-se $K=2$ e traça-se os caminhos contínuos feitos de sítios, caracterizados pelos índices 1 e 2, e conectados à face de entrada. O procedimento se repete para $K=1,2,3,\dots$, até um valor $K=c$ para o qual o caminho contínuo feito de sítios conectados à face de entrada e cheios pela fase molhante alcança a face de saída. Nesta etapa diz-se que a rede percolou. Prossegue-se fazendo $K=c+1,\dots,30$ (utiliza-se 30 classes de diâmetros). A cada etapa determina-se o número de sítios cheios e o volume correspondente, Figura 4.6.

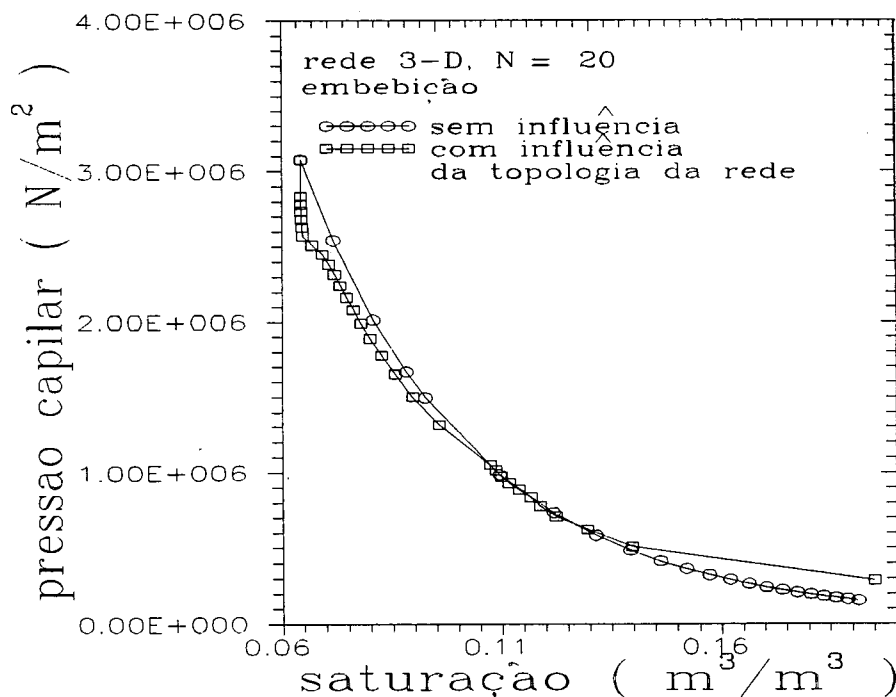


Figura 4.5 - Curvas de pressão na embebição

Na Figura 4.6 mostra-se uma rede bidimensional quadrada simulando o fenômeno de invasão de um fluido molhante, durante a etapa de percolação. Cada classe representa um diâmetro de sítio. Os sítios em negritos formam um agrupamento percolante de sítios ativos ocupados pela fase molhante.

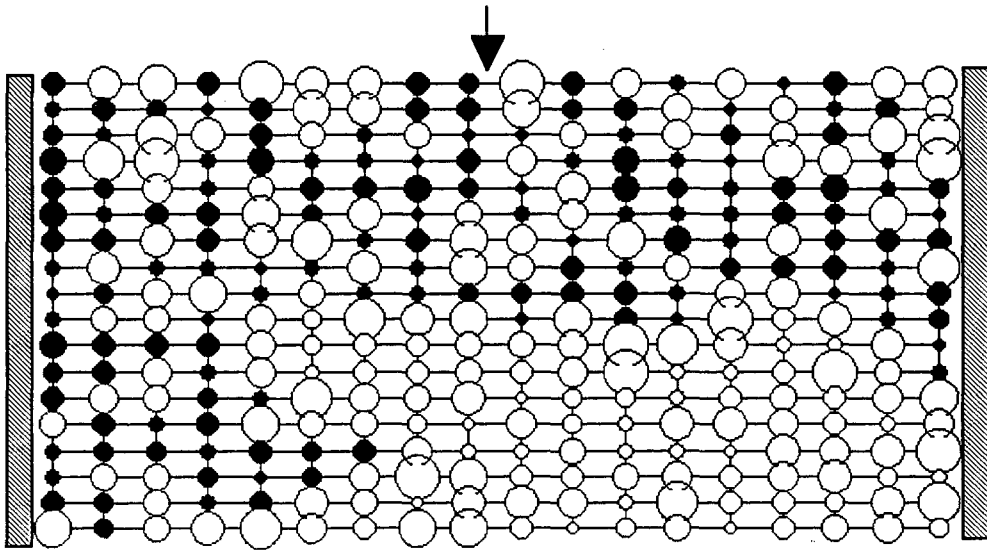


Figura 4.6 - Rede 18 x 18 simulando a frente de molhamento.

Etapa de percolação. Os sítios em negrito representam os sítios ocupados pela fase molhante.

No caso do processo de invasão da fase molhante na rede o sítio não precisa pertencer a um agrupamento de sítios ativos em contato com a face de saída como no caso de um processo de invasão da fase não molhante. É suficiente satisfazer à condição de pressão capilar para o enchimento do poro e que o sítio esteja ligado à face de entrada através de sítios cheios.

4.4 - Invasão por um fluido não molhante na rede de sítios

Na simulação da drenagem, a face de entrada da rede está em contato com o ar à pressão atmosférica e a face de saída está em contato com a água cuja pressão decresce a partir da pressão atmosférica, Figura 4.7.

Analisa-se o comportamento da rede de sítios em presença de um fluido não molhante, com objetivo de simular a injeção de mercúrio e/ou a drenagem de água. A injeção é feita por uma das faces da rede enquanto as outras faces, a menos da face de saída, são assumidas

impermeáveis, Figura 4.7. Cada etapa k da invasão representa a pressão de mercúrio ou a pressão capilar para a qual os sítios de uma dada classe k podem ser invadidos. Para o caso de um menisco esférico, a lei de Laplace pode ser escrita por:

$$p_c = p_g - p_l = \frac{4\sigma \cos\theta}{D}, \quad (4.3)$$

onde p_g é a pressão da fase não molhante, p_l é a pressão da fase molhante, D é o diâmetro do poro, θ é o ângulo de contato, formado pelo fluido molhante e σ é a tensão superficial do líquido.

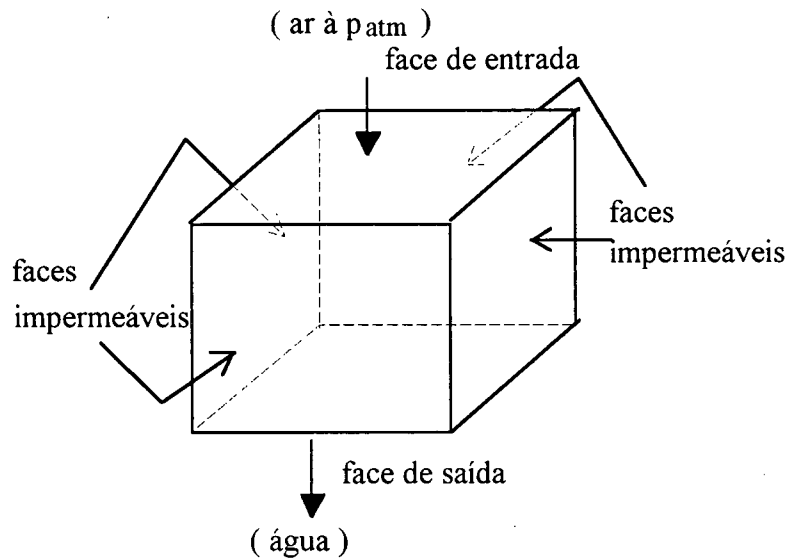


Figura 4.7 - Esquema da direção do processo de invasão em relação à rede cúbica de sítios. Drenagem.

Sistemas capilares em meios porosos sempre envolvem uma fase sólida e uma fase líquida e/ou uma fase gasosa, [2,18]. Em função da ausência de mobilidade da superfície da fase sólida, a interface sólido/fluido não exhibe o mesmo comportamento como na interface fluido/fluido [2,18]. Observa-se em muitos casos que um líquido colocado sobre uma superfície sólida não molha esta superfície mas permanece como uma gota, tendo um ângulo definido de contato entre as fases líquida e sólida, Figura 4. 8 .

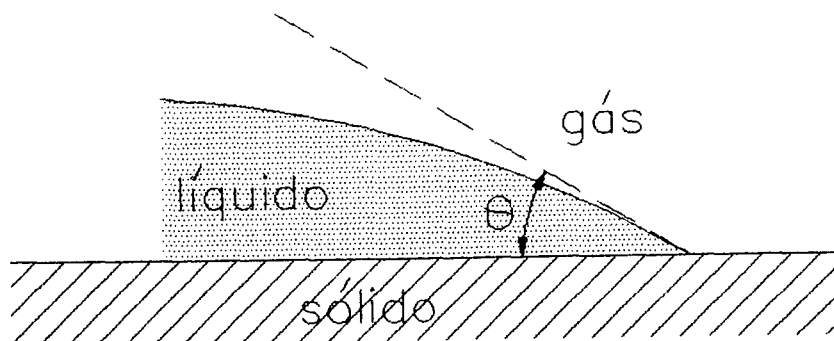


Figura 4. 8 - Interface sólido/fluido.

Na prática, se o ângulo de contato é maior do que 90° , diz-se que o fluido não molha a superfície sólida e em tais casos, gotas de líquido tendem a mover-se mais facilmente sobre a superfície sem penetrarem nos poros superficiais. Um fluido é definido como molhante quando o ângulo de contato, formado entre a interface líquido/gás e a fase sólida, é menor que 90° , e neste caso o menisco tem a curvatura voltada para o lado do fluido não molhante, Figura 4.1. No presente trabalho, utiliza-se para a interface água/argamassa um ângulo de contato de 0° e para a interface mercúrio/argamassa um ângulo de contato de 140° [2,18].

Para o esvaziamento do sítio na rede deve-se satisfazer à condição de raio, calculada pela lei de Laplace. O sítio deve ainda estar em contato com a face de entrada(ar), por um caminho de sítios não ocupados pela água capilar, e pertencer a um agrupamento de sítios possíveis em contato com a face de saída. Isto é a origem da histerese capilar associada à acessibilidade dos sítios. O agrupamento de sítios possíveis em contato com a face de saída é obtido com o algoritmo de Hoshen e Kopelman [102] (Capítulo 2).

Independentemente do tipo de problema, na primeira etapa, faz-se $K=30$ (utiliza-se 30 classes de diâmetros e $K = 30$ corresponde ao maior diâmetro), e traça-se os caminhos contínuos feitos de sítios caracterizados pelo índice 30, e conectados à face de entrada, para indicar aqueles que serão invadidos pelo líquido não molhante [103]. Em seguida faz-se $K=29$ e traça-se os caminhos contínuos feitos de sítios, caracterizados pelos índices 30 e 29, e conectados à face de

entrada. O mesmo procedimento se repete para $K=30,29,28,\dots$, até um valor $K=c$ para o qual o caminho contínuo feito de sítios conectados à face de entrada e invadidos pela fase não molhante, alcança pela primeira vez a face de saída. Esta etapa corresponde ao limite de percolação, $p=p_{s,c}$, dos processos de percolação. Para o caso de uma rede infinita esta etapa, quando a frente de invasão alcança a face de saída da rede, coincide com a formação do agrupamento infinito de sítios ativos no processos de percolação. Após alcançado o limite de percolação, o procedimento prossegue, fazendo-se $k=c-1,c-2,\dots,1$. A cada etapa determina-se o número de sítios invadidos pela fase não molhante e também o volume correspondente, Figura 4.9.

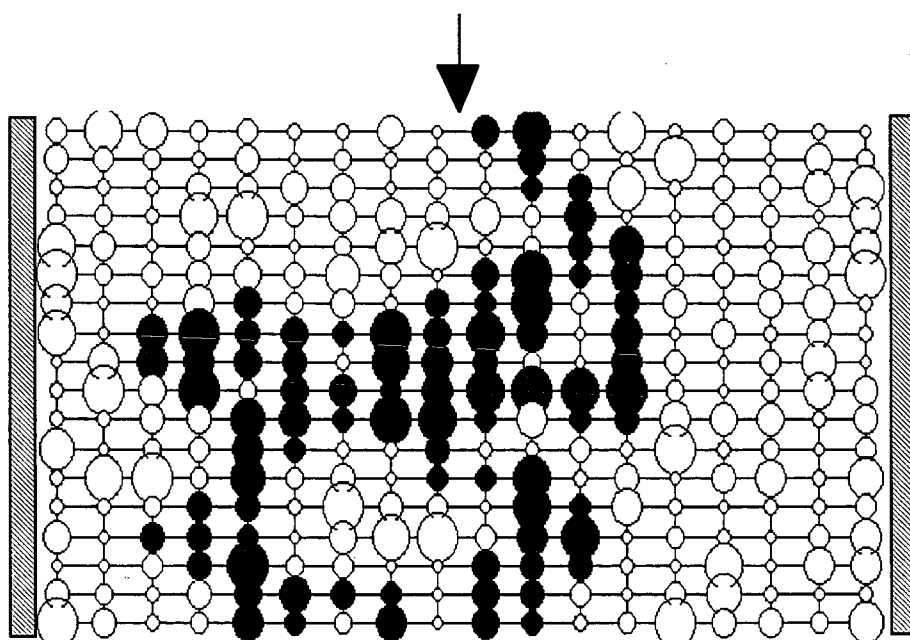


Figura 4.9 - Rede 18 x 18 simulando a frente de drenagem.

Etapa de percolação. Os sítios em negrito representam os sítios ocupados pela fase não molhante.

Na Figura 4.9 mostra-se uma rede bidimensional quadrada 18 x 18 simulando o fenômeno de invasão de um fluido não molhante, durante a etapa de percolação. Nesta etapa o fluido não molhante alcança a fase de saída da rede. Cada classe representa um diâmetro de sítio. Os sítios em negritos formam um agrupamento percolante de sítios ativos ocupados pela fase não molhante.

A curva de drenagem obtida pelo procedimento descrito acima é mostrada na Figura 4.10.

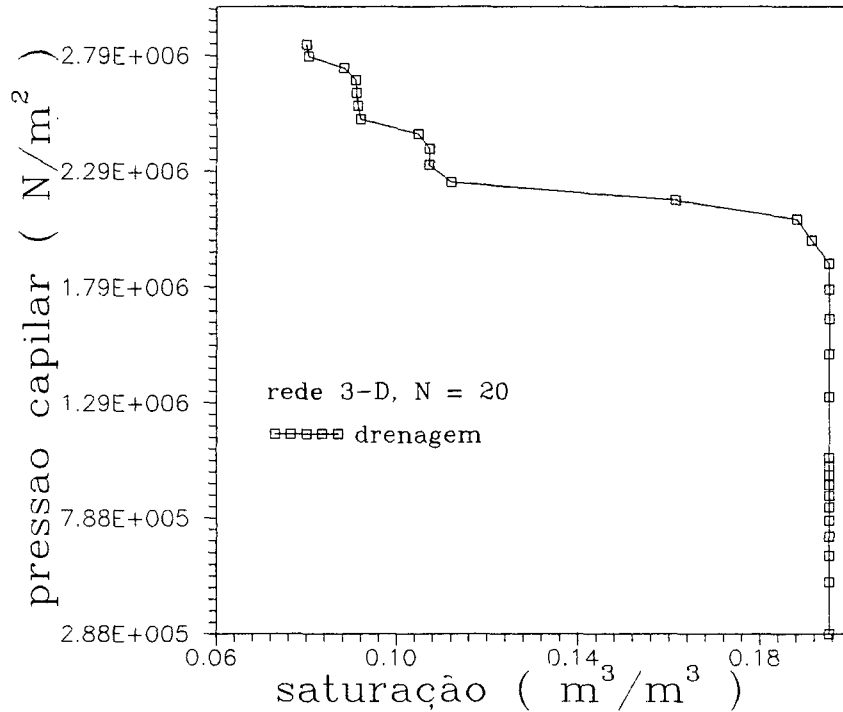


Figura 4.10 - Curvas de pressão na drenagem.

4.5 - Estudo estatístico das redes no processo de drenagem

As leis gerais de invasão na rede por um fluido não molhante se traduzem pelas características de invasão, $Y_{kj}(p_k)$, que é definida como a proporção de sítios da rede efetivamente invadidos na etapa de invasão definida por p_k . (seção 2.7 - Capítulo 2).

As curvas características, $Y_{kj}(p_k)$, para o processo de drenagem dependem da dimensão da rede, e são também influenciadas pela escolha aleatória da posição dos sítios das diferentes classes dentro da rede, Figuras 4.11 à 4.13.

Observa-se nas Figuras 4.11 e 4.12 uma taxa de invasão nula abaixo do limite de percolação. Constata-se uma variação do limite de percolação em torno de um valor médio de

0,57 para as redes 2-D e de 0,33 para as redes 3-D e que são bastantes próximos dos valores encontrados na literatura para os processos usuais de percolação, Tabela 2.1.

As curvas características para a drenagem apresentam, para um dado tamanho de rede, uma certa dispersão devido à posição aleatória dos sítios, pertencentes a cada classe dentro da rede. Esta dispersão tende a desaparecer quando o número de sítios tende ao infinito.

Nas redes 3-D a maior conectividade entre os elementos da rede resulta numa evolução mais acentuada da função acessibilidade atingindo-se uma maior proporção de sítios invadidos pelo fluido não molhante em relação às redes 2-D.

Para evitar ao máximo os efeitos devido à escolha aleatória da disposição dos sítios na rede, utiliza-se as curvas características que representam à média em relação a três geradores diferentes.

As curvas características $Y_{kj}(p_k)$ dependem da dimensão da rede, particularmente na região quando $p \leq p_c$. O tamanho da rede foi escolhido em função da capacidade de memória computacional.

Desenvolveu-se os programas de simulação das redes de sítios em linguagem C em microcomputadores PC-486, em função da sua facilidade operacional e, uma vez aprimorados, foram transferidos para um computador de maior porte, IBM 3090 e/ou CONVEX - C210, acessados através de terminal. A transferência de um programa em linguagem C para o IBM 3090 apresenta no entanto, dificuldades associadas à não compatibilidade gráfica, entre os dois sistemas, exigindo assim um tempo adicional para a adaptação destes programas. Essa transferência para computadores de maior porte fez-se necessária porque os programas de simulação das curvas características $Y_{kj}(p_k)$, superam a memória dos microcomputadores PC-486 (640 Kbytes de memória para dados) para N acima de 10 nas redes 3-D e acima de 50 nas redes 2-D.

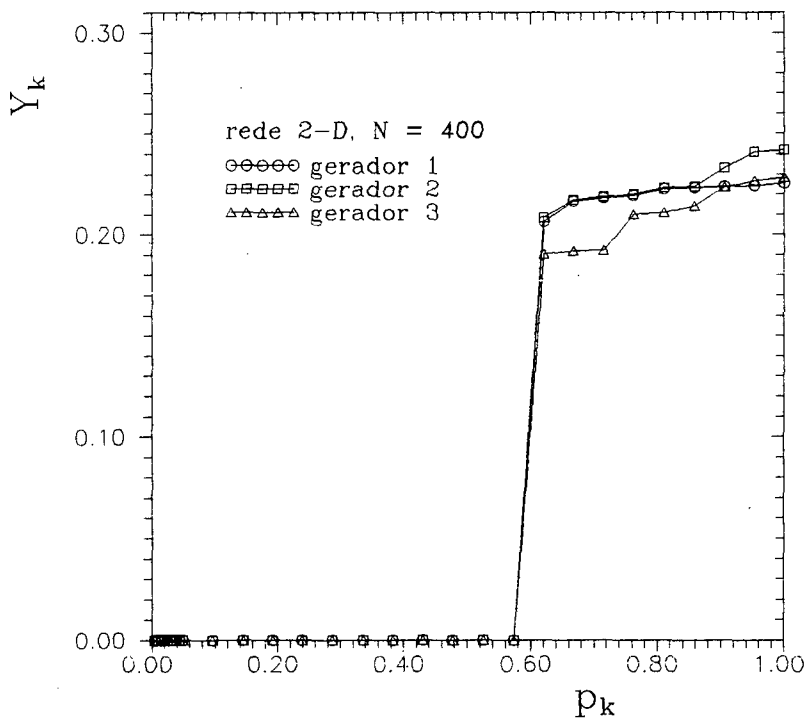
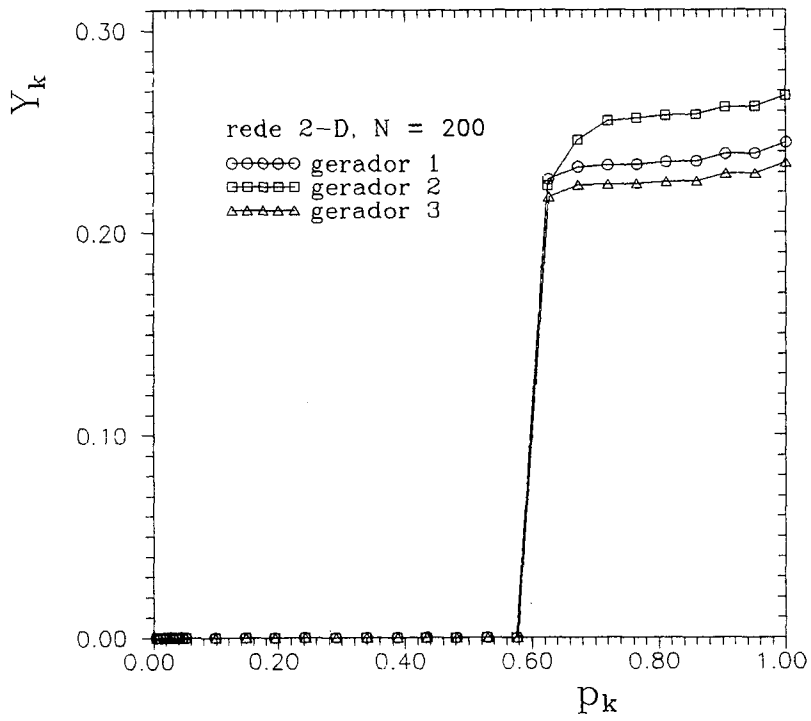


Figura 4.11 - Efeito da escolha aleatória da disposição dos sítios da rede.

Processo de drenagem. Rede 2-D.

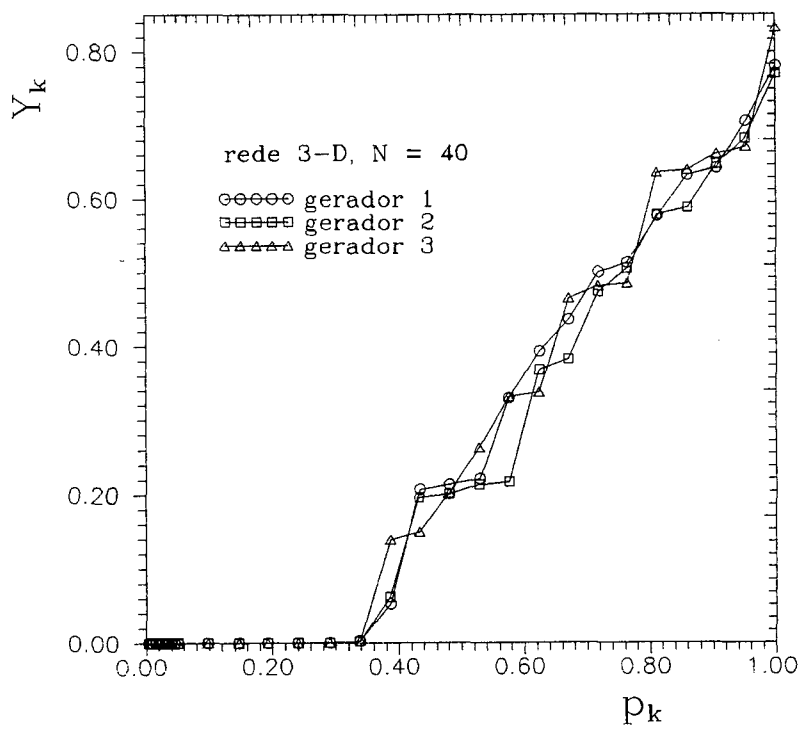
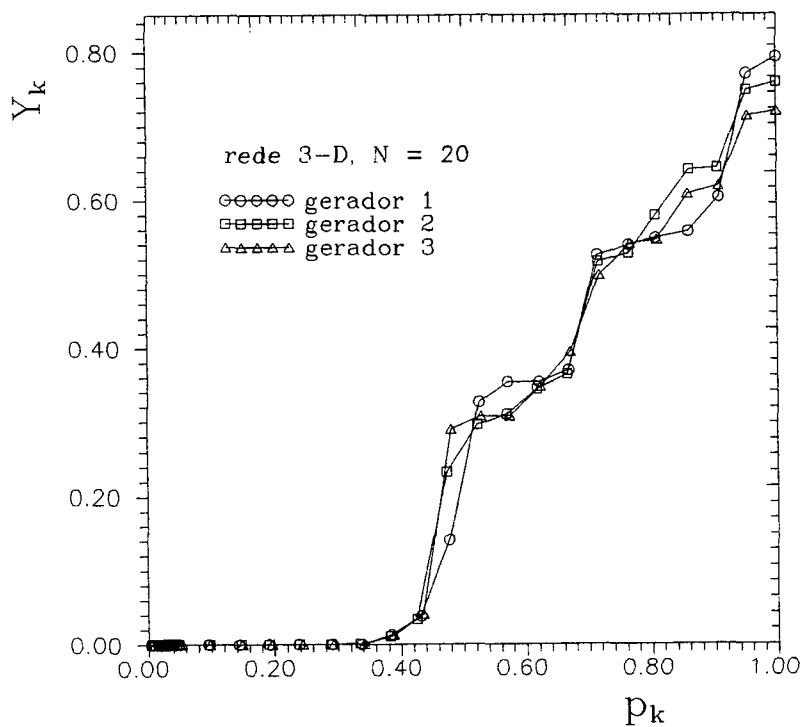
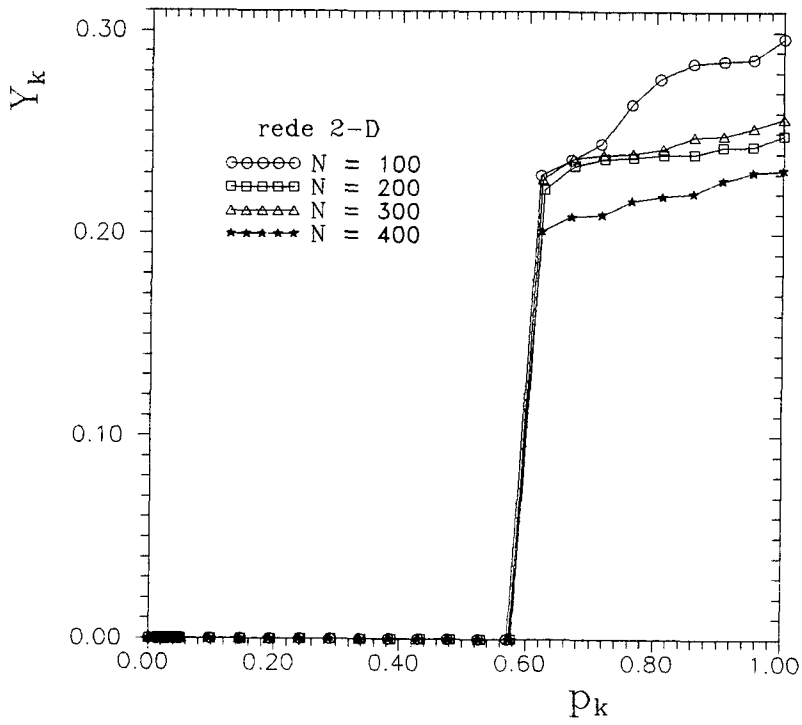
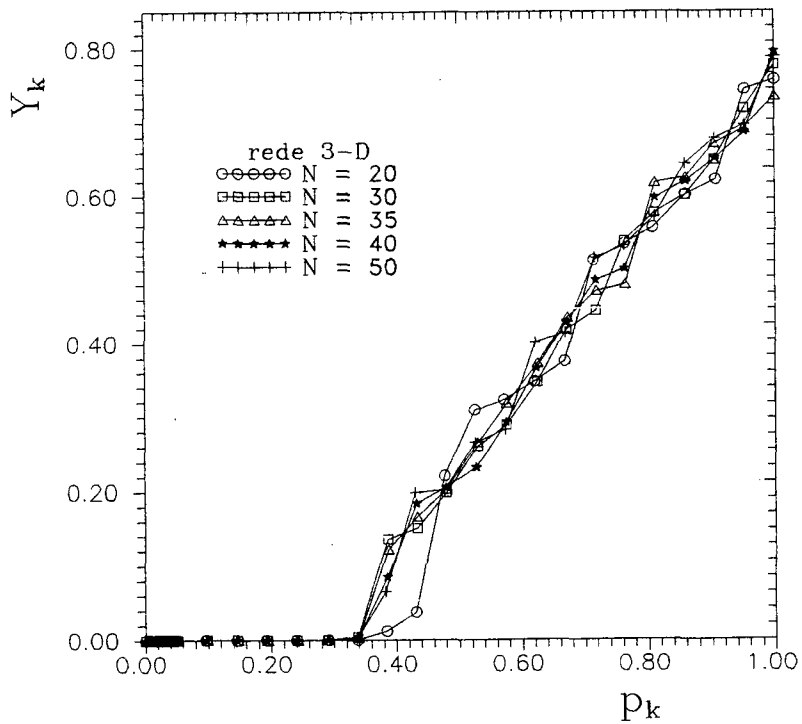


Figura 4.12 - Efeito da escolha aleatória da disposição dos sítios da rede.

Processo de drenagem. Rede 3-D.



(a)



(b)

Figura 4.13 - Efeito do tamanho da rede. Processo de drenagem.

(a) rede 2-D; (b) rede 3-D.

Na Tabela 4.1 apresenta-se o tempo de processamento exigido nas simulações das rede de percolação bidimensionais quadradas e cúbicas.

Tabela 4.1 - Tempos de processamento para simulação da rede de sítios

REDE		TEMPO DE PROCESSAMENTO(horas)	
DIMENSÃO d	TAMANHO N	IBM-3090	CONVEX-C210
2-D	100	0,11	-
	200	1,40	-
	300	-	8,50
	400	3,20	-
3-D	20	0,35	-
	30	-	3,10
	35	-	6,91
	40	2,50	13,70
	50	5,11	-

4.6 - Comparação entre os resultados

Na Figura 4.14 mostra-se as curvas de pressão em função da saturação da rede nos processos de embebição e drenagem.

A histerese evidenciada está associada, principalmente, à acessibilidade dos sítios da rede (topologia da rede).

Nas Figuras 4.15 à 4.19 mostra-se uma rede quadrada 32X32 e uma 16X16 simulando os fenômenos de embebição e drenagem, respectivamente [103]. É mostrado o processo de invasão antes, Figuras 4.15 e 4.17, durante, Figuras 4.16 e 4.18 e após a etapa de percolação, Figura 4.19.

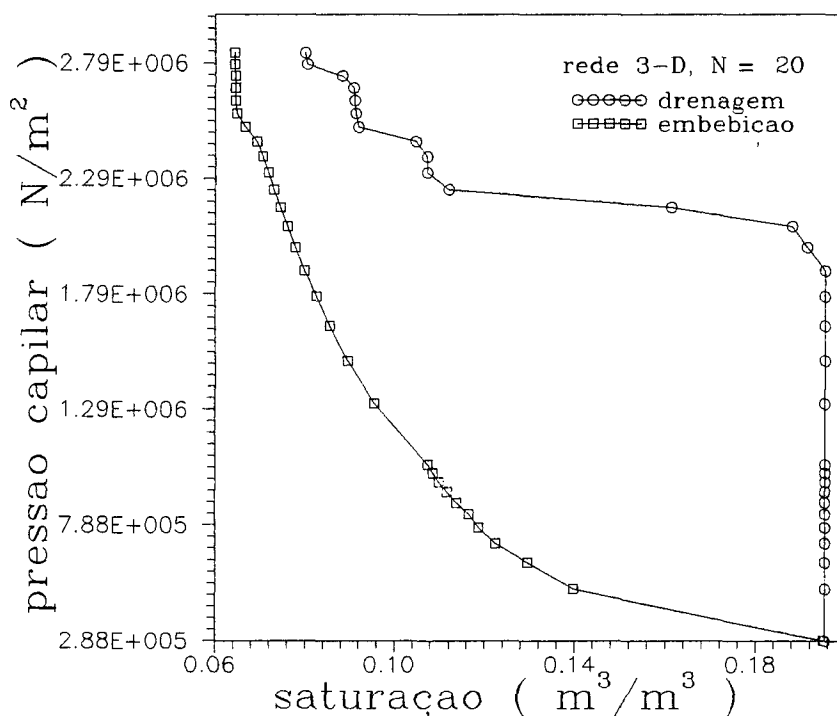


Figura 4.14 - Curvas de pressão na embebição e drenagem

O procedimento para a simulação dos processos de embebição e drenagem através das redes de sítios pode ser resumido pelo algoritmo mostrado na Figura 4.20.

4.7 - A curva de injeção de mercúrio

Os valores experimentais da curva de injeção de mercúrio, em uma amostra de argamassa de cimento e cal foram obtidos em um porosímetro do CENPES/Petrobrás, Rio de Janeiro, operando à uma pressão máxima de injeção de 2000 psi [51]. Sendo a pressão máxima de trabalho de 2000 psi fica impossível a exploração de poros com diâmetros inferiores à aproximadamente 0,1 μm , pois o mercúrio não tem acesso aos mesmos. Estes poros constituem

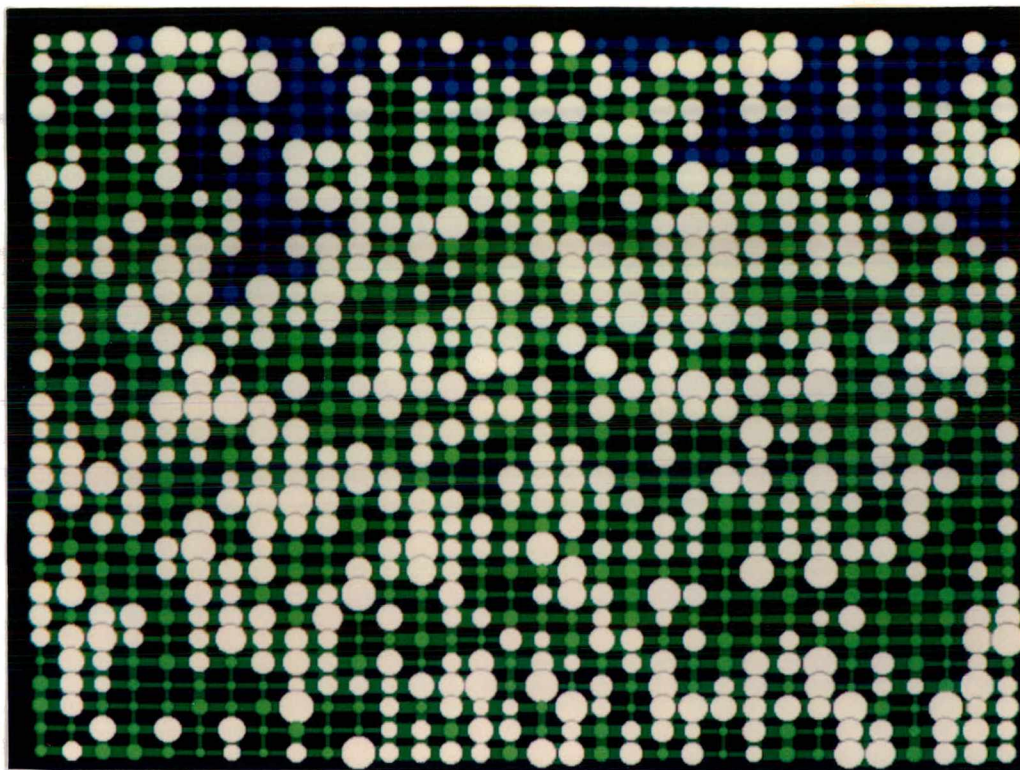


Figura 4.15 - Rede 32X32 simulando a embebição. Etapa anterior à etapa de percolação.

Cor azul : sítio cheio; cor verde : sítio possível; cor branca : sítio vazio.

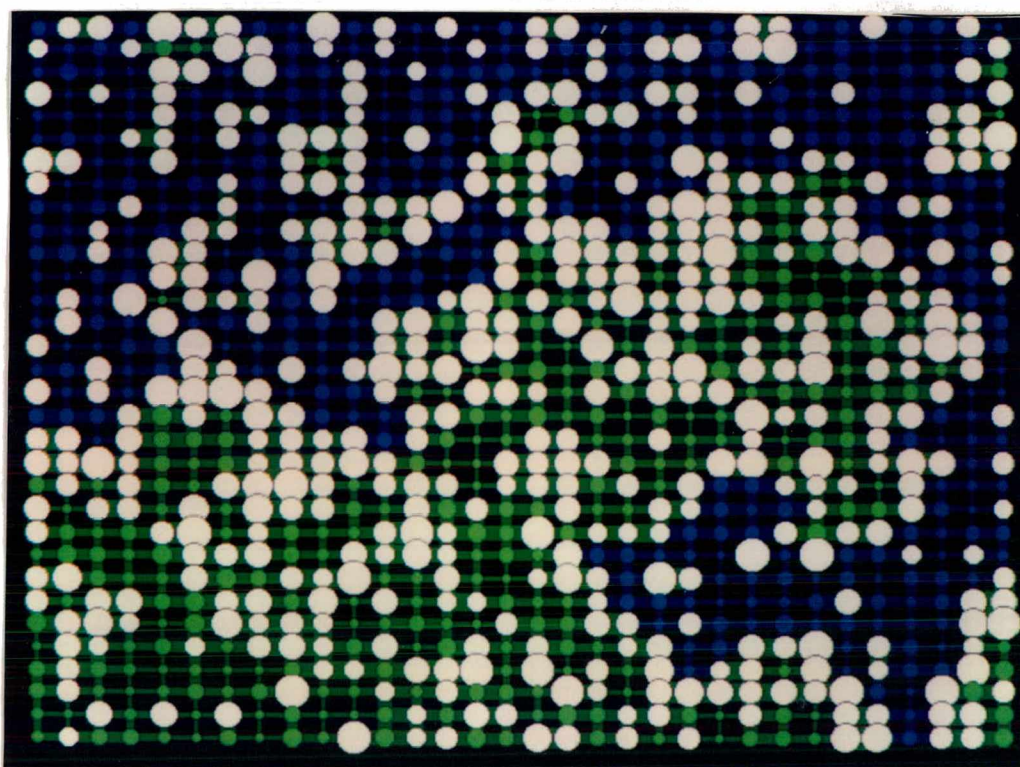


Figura 4.16 - Rede 32X32 simulando a embebição. Etapa de percolação.

Cor azul : sítio cheio; cor verde : sítio possível; cor branca : sítio vazio.

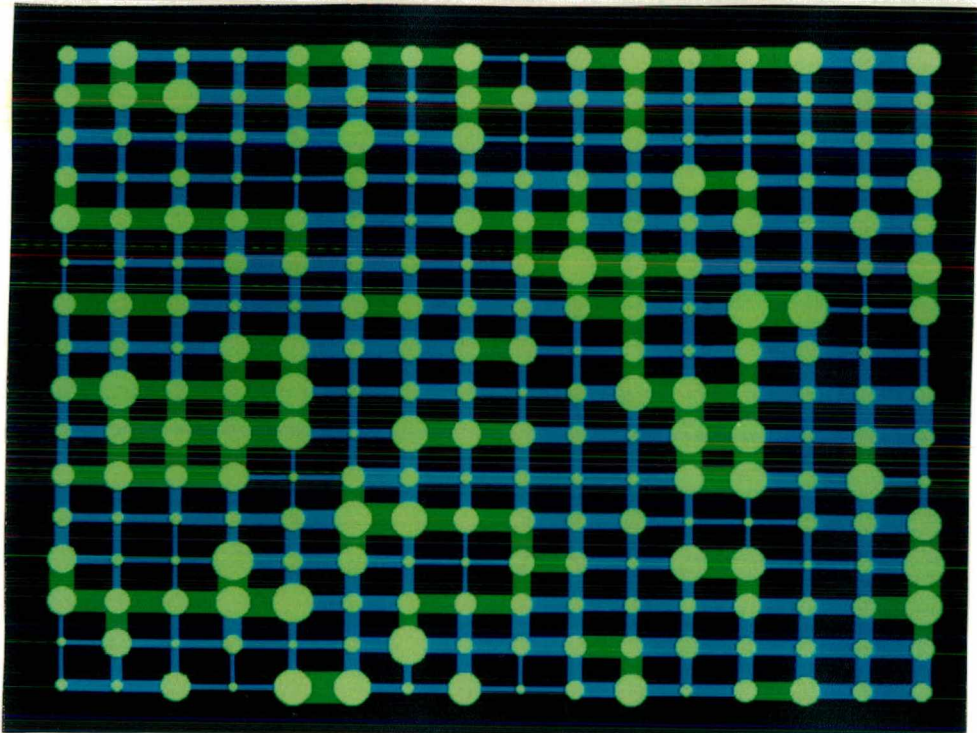


Figura 4.17 - Rede 16X16 simulando a frente de drenagem. Etapa anterior à etapa de percolação. Cor azul : sítio cheio; cor verde : sítio possível; cor branca : sítio vazio e/ou percolante.

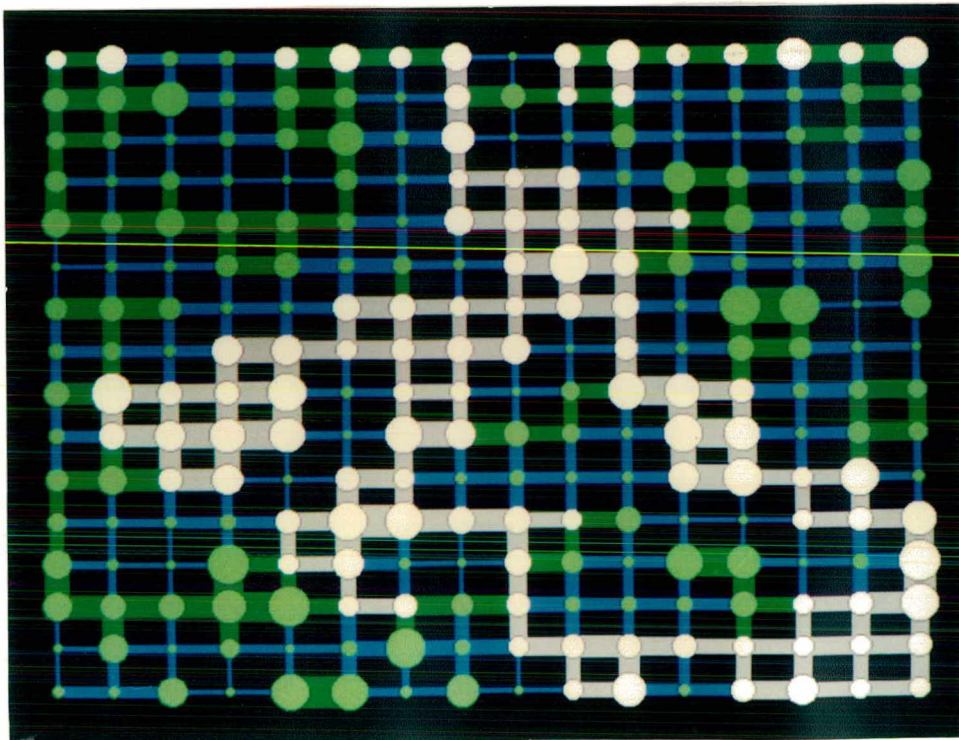


Figura 4.18 - Rede 16X16 simulando a frente de drenagem. Etapa de percolação. Cor azul : sítio cheio; cor verde : sítio possível ; cor branca : sítio vazio e/ou percolante.

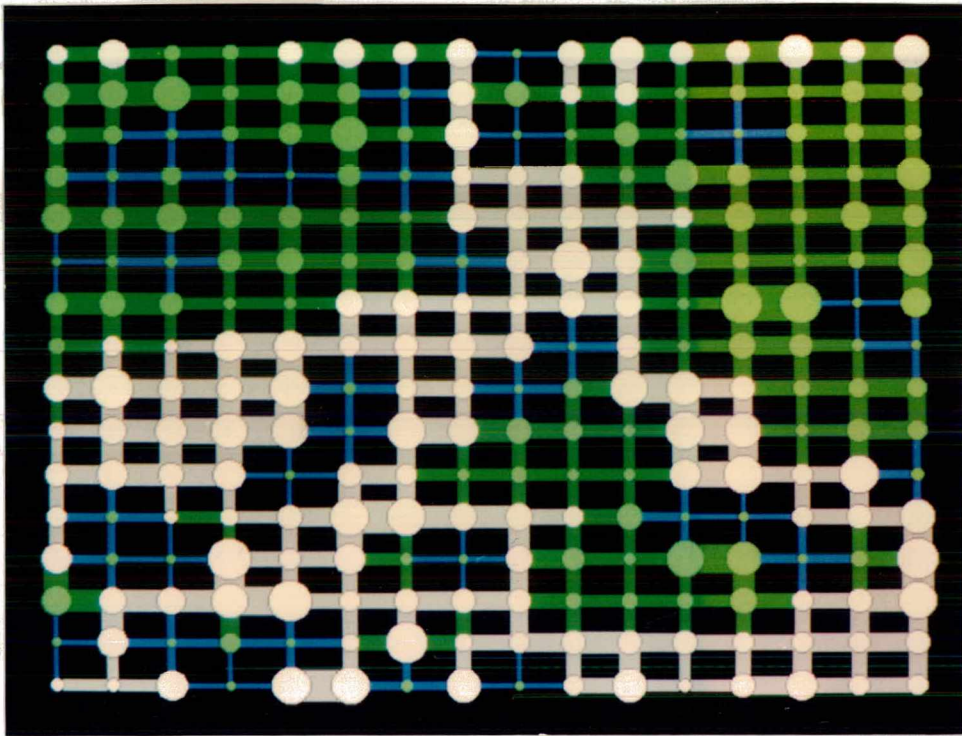


Figura 4.19 - Rede 16X16 simulando a frente de drenagem. Etapa após etapa de percolação.

Cor azul : sítio cheio; cor verde : sítio possível; cor branca : sítio vazio e/ou percolante.

17% da porosidade, de modo que a simulação numérica, feita com poros com diâmetros superiores a $0,1 \mu\text{m}$, compreende apenas 83% do volume total de vazios. A pressão crítica de injeção encontrada foi de 100 psi, correspondendo a um diâmetro de poro de aproximadamente $1 \mu\text{m}$, que é o diâmetro crítico das fissuras encontradas na microscopia eletrônica [39].

Simula-se a injeção de mercúrio pelos processos usuais de percolação, através de uma rede de sítios, na faixa de diâmetros entre 1000 e 10000 Å. Utiliza-se para a interface mercúrio/argamassa um ângulo de contato de 140°C [2,18]. Para uma pressão correspondente a um diâmetro inferior ao diâmetro crítico das fissuras a saturação de mercúrio é nula. Admite-se que os macroporos estão desconectados, Figura 4.21, ou conectados, Figura 4.22.

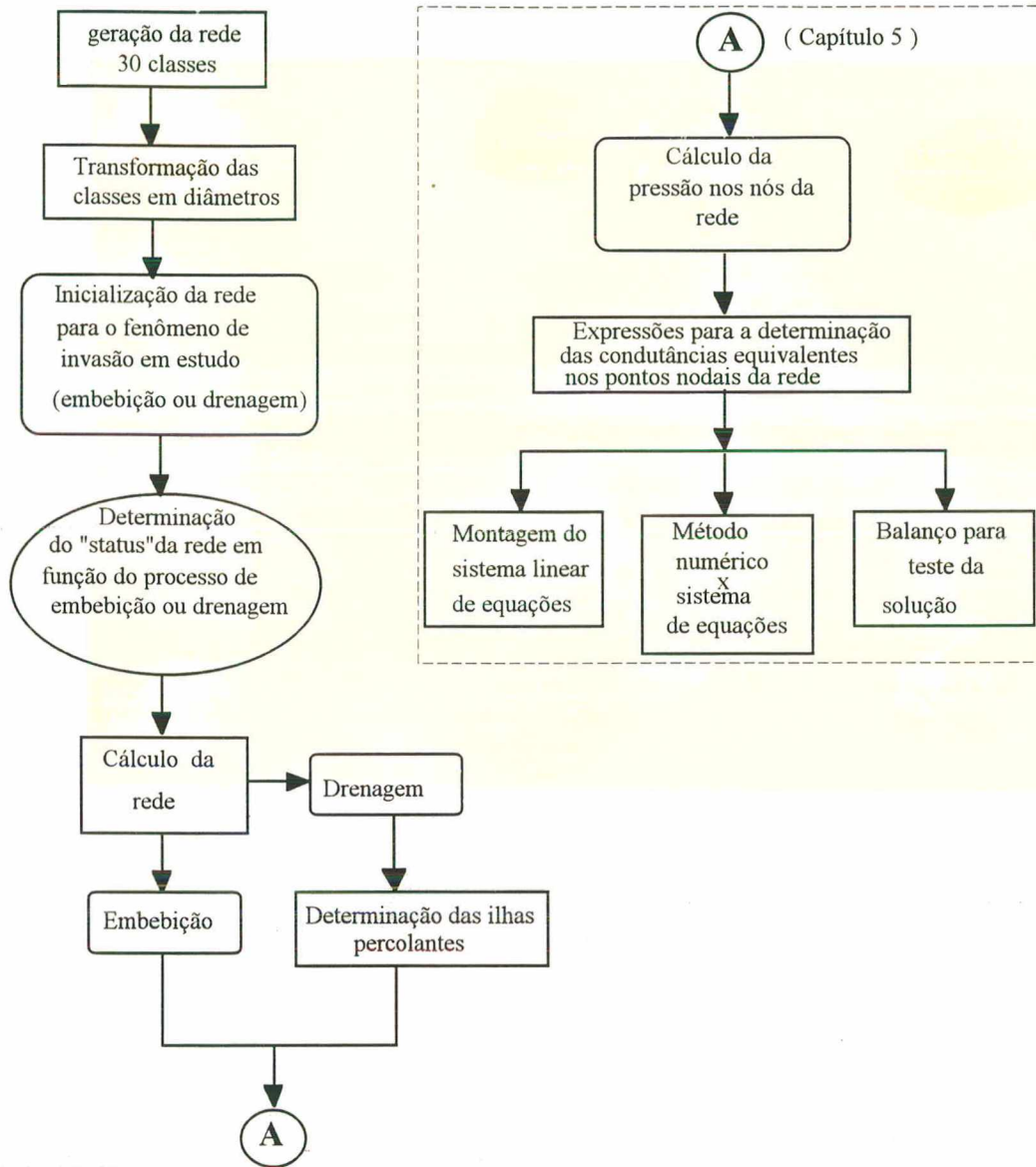


Figura 4.20 - Procedimento da simulação dos processos de invasão numa rede de sítios.

O procedimento de simulação do processo de invasão do mercúrio na rede é similar ao processo de drenagem da água, seção 4.4, sujeito às regras de acessibilidade de um poro (sítio) pela fase não molhante, invadindo a rede, e à continuidade da fase. No curso do processo de injeção, aplica-se uma pressão crescente sobre o fluido passo a passo através de um Δp , os sítios são invadidos no sentido decrescente do diâmetro. A invasão ocorre a partir de uma das faces da rede cúbica, Figura 4.7. As outras faces, a menos da face de saída, são supostas impermeáveis.

No passo de pressão $p+\Delta p$, um sítio é efetivamente invadido se a condição do raio for satisfeita, segundo Laplace, e se ele estiver conectado à face de entrada por um caminho contínuo de sítios efetivamente invadidos.

Na Figura 4.21 mostra-se as curvas experimental e a resultante da simulação da injeção de mercúrio para o caso onde os macroporos estão desconectados.

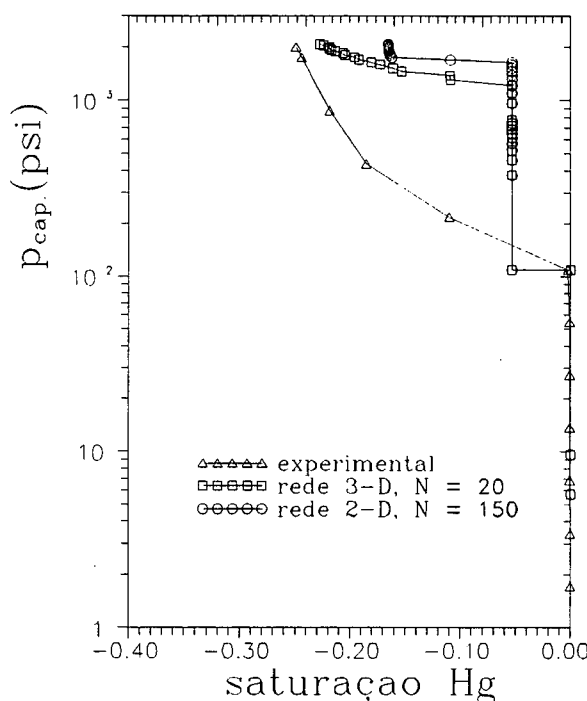


Figura 4.21 - Resultados experimentais e da simulação da injeção de mercúrio na rede de sítios. Macroporos desconectados.

A evolução da curva de injeção experimental deixa clara a presença de acessos privilegiados, em função da acentuada invasão de mercúrio, mesmo em pressões relativamente baixas. A melhor concordância dos resultados com a curva de simulação em 3 dimensões, ocorre em função do uso de um número de coordenação mais elevado.

Na Figura 4.22 mostra-se as curvas experimental e a resultante da simulação da injeção de mercúrio para o caso onde os macroporos estão conectados.

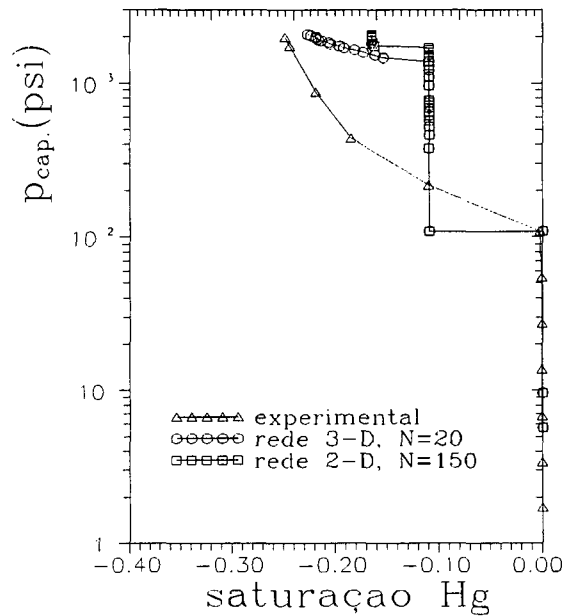


Figura 4.22 - Resultados experimentais e da simulação da injeção de mercúrio na rede de sítios. Macroporos conectados.

Os macroporos e as fissuras representam uma proporção em volume de aproximadamente 10,9% em relação à proporção em volume total do espaço poroso da argamassa ($\epsilon = 30.4\%$). Considerando-se os macroporos conectados, a curva de simulação tem uma evolução acentuada para uma pressão de 100 psi (correspondente ao diâmetro crítico das fissuras) em função do caminho preferencial para o mercúrio constituído pelas fissuras e pelos macroporos. Quando os macroporos estão desconectados somente as fissuras, com uma proporção em volume de 5,3% da total, vão constituir os acessos privilegiados e dessa forma a evolução da curva de injeção é menor na pressão de 100 psi. Isto é explicado pelo fato que os macroporos desconectados são invadidos somente quando se atinge o ponto onde ocorre a percolação através dos microporos. Desse modo a curva de simulação cresce, após invadir primeiramente as fissuras. Na investigação

da microestrutura da argamassa usando-se técnicas de microscopia eletrônica de varredura, Figuras 3.3 à 3.9, observa-se no entanto, que os macroporos estão separados uns dos outros.

Possivelmente o crescimento brusco da curva de injeção de mercúrio observado nas Figuras 4.21 e 4.22, nos pontos de saturação de mercúrio correspondentes à 5,3% e 10,9%, respectivamente, se deve à concepção de rede utilizada no presente trabalho: cada sítio representa um poro e os poros são homogeneamente distribuídos na rede de acordo com a sua frequência em número. Em função desta distribuição de diâmetro de poros utilizada o ponto de invasão de mercúrio na rede corresponde à 1448 Å, Tabela 3.3.

Desse modo ocorre um aumento na pressão até alcançar o ponto de invasão de mercúrio na rede. Este comportamento é evidenciado nas Figuras 4.21 e 4.22, pela evolução acentuada da curva de pressão, em função da saturação de mercúrio, para um mesmo grau de saturação.

5 - SIMULAÇÃO DA CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA

5.1 - Introdução

O estudo do deslocamento imiscível de dois fluidos no interior de materiais porosos, em qualquer tipo de geometria admitida para os poros, apresenta grandes dificuldades associadas à hidrodinâmica da interface junto ao contorno sólido, imposta pela estrutura porosa.

Como visto no capítulo 3, faz-se a modelagem matemática do material poroso através de uma rede de sítios, para a faixa de diâmetros de poro de 1000 à 10000 Å. Para os poros com diâmetros maiores que 10000 Å utiliza-se um modelo similar ao modelo de Maxwell - De Vries. Simula-se os processos de invasão capilar.

Faz-se a simulação levando em conta a transferência de duas fases contínuas ou descontínuas sobre um elemento de volume usando-se uma hipótese de equilíbrio local, que permite escrever que o fluxo global é proporcional a uma variável de estado, definida através da escala microscópica. A simulação fornece a condutividade hidráulica K do material poroso.

Muitos métodos para a determinação da relação entre a condutividade hidráulica e o conteúdo de umidade têm sido desenvolvidos [5,6,107]. Childs e Collis-George [5] foram os primeiros a apresentar um modelo matemático para a obtenção da condutividade hidráulica em meios granulares, mais tarde modificado por Marshall [6]. Conceitualmente a aproximação dos autores se baseia em suposições nas quais um meio contém poros distintos de vários raios que são randomicamente distribuídos no espaço e quando dois planos adjacentes ou seções do solo são quebradas, a condutância hidráulica global é apenas influenciada pela frequência relativa dos diferentes poros e não pela topologia da configuração, Figura 1.2. Michiels et alii [107] apresentam modelos experimentais para prever a condutividade hidráulica em solos arenosos comparando os resultados com dados obtidos através de modelos matemáticos apresentados na literatura [5,6]. Os autores avaliam em um solo arenoso dois métodos experimentais. O primeiro

método é conhecido como o método do perfil de drenagem interna instatânea realizado no campo. O segundo método é análogo ao primeiro mas realizado em laboratório. O método é baseado no monitoramento do fluxo transiente e gradiente do potencial hidráulico em função do tempo e da profundidade. Em laboratório a homogeneidade da coluna de solo foi verificada por meio de um equipamento de atenuação de raios gama.

5.2 - Transferência isotérmica de massa em meios porosos

5.2.1. - Volume elementar representativo e o equilíbrio local

Para passar da escala microscópica, onde são aplicáveis as leis físicas elementares (à nível de poro), para a escala macroscópica, é necessário tomar a média das variáveis de estado e dos fluxos sobre um volume elementar representativo. A aproximação macroscópica leva a identificar o meio poroso a um meio contínuo homogêneo equivalente e está ligada à noção de volume elementar representativo.

Considere uma das propriedades do meio poroso, por exemplo a porosidade ε . Na Figura 5.1 mostra-se a evolução da porosidade de uma esfera centrada em M , quando o raio r aumenta. Constata-se que quando o raio é maior que r_1 , o efeito da média permite obter uma porosidade constante. A esfera de raio r_1 que permite definir a porosidade, chama-se o volume elementar representativo (relativo a esta grandeza no ponto M) [2,21,30,109]. Pode -se então definir uma variável macroscópica , porosidade, por $\varepsilon(r_1)$ e o meio poroso pode ser identificado como um meio homogêneo entre as escalas r_1 e r .

O tratamento dos problemas de transferência na escala macroscópica utiliza médias das variáveis de estado e dos fluxos, e conseqüentemente requer a definição da escala r_1 sobre a qual as médias devem ser obtidas.

Para que uma grandeza macroscópica esteja corretamente definida, é necessário que a mesma ao ser calculada em dois pontos do meio, cuja distância entre eles seja da ordem da escala r_1 , tenha valores cuja diferença seja pequena em relação às flutuações locais. Deve-se notar que isto não é necessariamente possível para todos os materiais e nem para todos os processos.

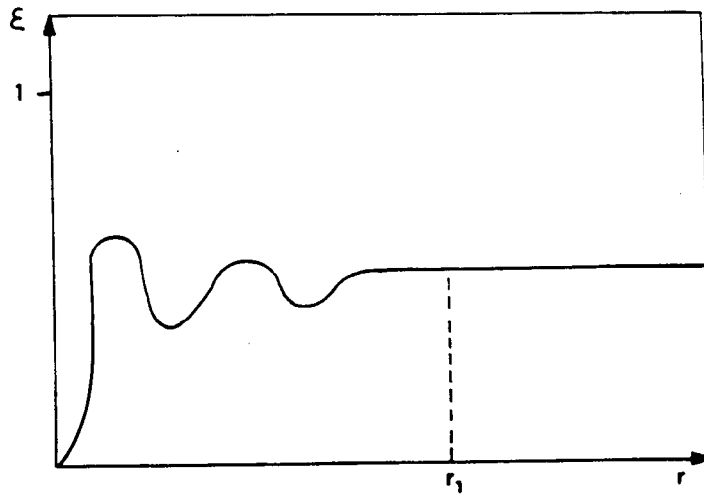


Figura 5.1 - Volume elementar representativo.

O volume elementar representativo é um volume suficientemente grande para conter um número muito grande de poros, mas, também, suficientemente pequeno em relação às dimensões representativas do meio poroso analisado.

Quando a definição do volume elementar representativo é possível a todo instante e lugar, estabelece-se a partir das leis físicas fundamentais em jogo na escala microscópica, as equações utilizando as grandezas macroscópicas. Pode-se no entanto, estar diante de um problema difícil, porque as equações associadas às grandezas médias não são necessariamente idênticas às equações associadas às grandezas locais [109], quando a região $r_1 - r$ não existe.

Neste trabalho admite-se a existência do elemento de volume representativo e das equações associadas às grandezas macroscópicas.

Para que o formalismo macroscópico possa ser usado é necessário que se admita a hipótese de equilíbrio local. Trata-se de um equilíbrio capaz de existir localmente dentro do meio, não somente entre todas as fases, mas, também, no interior da cada uma delas, a todo instante, durante o processo de transferência.

A hipótese de equilíbrio local permite afirmar que é possível, na escala do elemento de volume representativo, para cada uma das fases presentes, definir seu estado, caracterizado pelo valor das grandezas intensivas tais como a temperatura, o potencial termodinâmico, a pressão de vapor relativa, a pressão do líquido. Isto supõe que no interior do elemento de volume representativo, as grandezas de estado são uniformes, de forma que o valor médio sobre o elemento de volume, ou o valor macroscópico, é realmente representativo do valor em todo ponto do volume. No caso dos fenômenos transitórios cuja dinâmica, estudada na escala microscópica, mostra uma dispersão nos valores das grandezas de estado no interior de todo o elemento de volume representativo a hipótese acima não é necessariamente verificada.

Sendo possível a definição macroscópica do estado de cada fase, a hipótese de equilíbrio local permite afirmar que dentro de cada elemento de volume representativo da morfologia do meio, os estados de cada uma das fases estão ligados entre eles como se eles estivessem em equilíbrio, na ausência de transferência. Neste caso as diferentes fases estão na mesma temperatura e no mesmo potencial termodinâmico.

Na prática isto implica que no curso dos processos macroscópicos de transferência a umidade relativa e a pressão capilar médias podem ser relacionadas pela lei de Kelvin.

5.2.2 - Transferência de líquido e vapor dentro de cada fase

Expõe-se aqui o caso da transferência macroscópica na direção x , limitando-se também ao caso da transferência isotérmica. Baseia-se nos modelos clássicos elaborados por Philip e De Vries [110,111] ou Luikov [112]. Admite-se a hipótese do equilíbrio local.

Tem-se na escala macroscópica os fluxos de massa da fase gasosa, J_v , dentro da fase líquida, J_l . Cada um destes fluxos é governado por sua própria lei, que exprime que o fluxo é proporcional ao gradiente de uma propriedade intensiva. O processo de difusão de vapor está associado ao gradiente da pressão de vapor e o processo de transporte de líquido ao gradiente da pressão capilar. Para que os gradientes de pressão de vapor e de pressão capilar tenham sentido na escala macroscópica, para cada uma das fases, é necessário supor que estes dois gradientes sejam contínuos dentro do elemento de volume representativo.

Isto não é necessariamente realizado em todas as situações. Por exemplo, a existência de poros condensáveis, com diâmetros inferiores à 2000 Å, proporciona a formação de ilhas de líquido, constituídas por poros condensáveis conectados entre si e preenchidos por líquido, resultante da condensação do vapor. Estas ilhas de líquido podem, eventualmente, formar um sistema contínuo ligando as duas superfícies externas do material, Figura 5.2. Desse modo é impossível definir o gradiente à escala macroscópica dentro de uma fase descontínua e por consequência expressar de forma independente o fluxo. Assim a distinção dos fluxos dentro de cada uma das fases perde o sentido dentro do ponto de vista macroscópico.

Este problema, tratado por De Vries [110,111], é geralmente resolvido considerando que na escala macroscópica o fluxo dentro da fase descontínua é nulo. Todavia a fase líquida continua a participar da transferência global através das trocas com a fase vapor.

Estas ilhas de líquido não são inertes e pelo contrário, as mesmas intensificam o processo de transferência, uma vez que a sua resistência hidráulica é muito pequena, em relação à resistência hidráulica que a mesma teria caso estivesse preenchida com vapor.

Assim, mesmo quando a continuidade da fase líquida não existe, as moléculas de água adsorvidas sobre a superfície da matriz sólida do meio formam pontes entre os poros isolados. O sistema ainda conterá água líquida, mas isto ocorrerá, quase totalmente, em ilhas isoladas enchendo os pequenos poros, Figura 5.3.

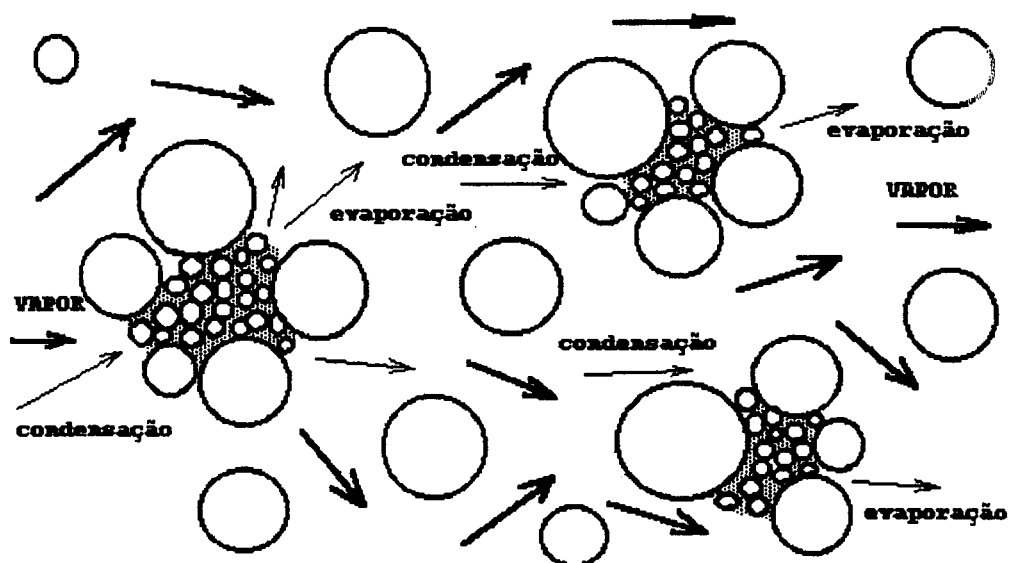


Figura 5.2 - Transferência de vapor num meio poroso sujeito a duas ambientes a diferentes umidade relativas

Na Figura 5.3 as curvas sólidas mostram os dois meniscos da ilha de líquido, com curvaturas iguais, quando ela está em equilíbrio termodinâmico com a vizinhança. Considere um fluxo de vapor produzido por um gradiente da pressão do vapor. A condensação resultante em A e a evaporação em B, Figura 5.2, tendem a diminuir a curvatura em A e aumentar em B. Isto continua até o fluxo capilar através da ilha de líquido, produzido pela crescente diferença da curvaturas A e B, igualar a taxa de condensação em A e a taxa de evaporação em B. A curva pontilhada representa o novo menisco de A e B.

Admitindo-se a continuidade das fases, as leis fundamentais dos processos de transferência na escala microscópica permitem prever a forma do fluxo para cada uma das fases.

Segundo De Vries [111] o cálculo do fluxo macroscópico de vapor através de uma seção, está associado à seção de passagem real, representada pelo teor em gás ($\epsilon - \theta$) do material, e à

direção dos fluxos microscópicos por intermédio do coeficiente τ_1 (fator de tortuosidade) menor que 1, Figura 5.4,

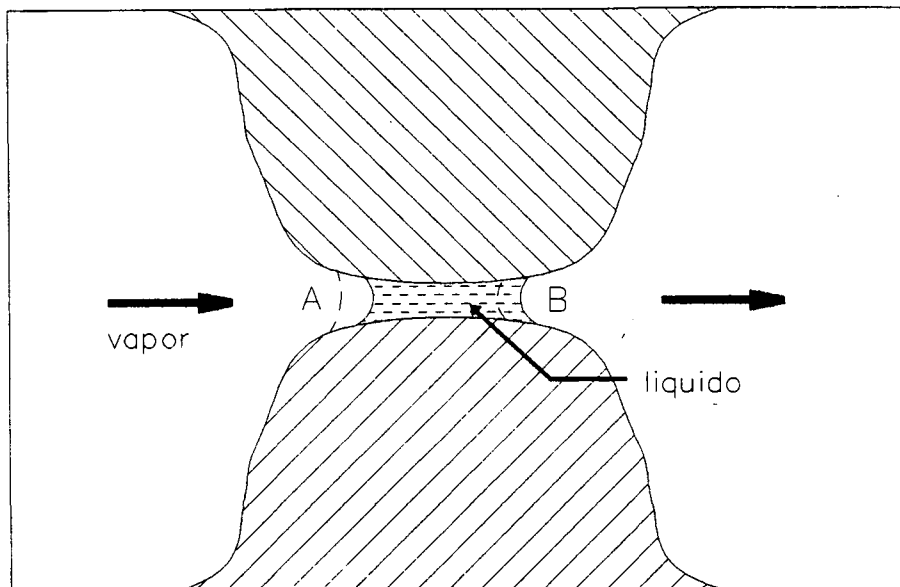


Figura 5.3 - Transferência de massa através de uma ilha de líquido.

$$J_v = \tau_1(\varepsilon - \theta)j_v, \quad (5.1)$$

onde j_v representa o fluxo de vapor na escala microscópica.

O gradiente médio da concentração de vapor deve ser calculado levando em conta as linhas de corrente microscópicas, que não são retilíneas [109,111]. O comprimento macroscópico, x , é obtido multiplicando o comprimento microscópico, x' , pelo mesmo fator τ_1 ,

$$dx = \tau_1 \cdot dx' \quad (5.2)$$

e o gradiente efetivo é [110]:

$$\frac{\partial \rho_v}{\partial x'} = \tau_1 \frac{\partial \rho_v}{\partial x} \quad (5.3)$$

A lei de Fick escrita na escala microscópica, [110,111]:

$$j_v = -D_o \frac{\partial \rho_v}{\partial x'} \quad (5.4)$$

torna-se na escala macroscópica,

$$J_v = -D_o (\varepsilon - \theta) \tau \nabla \rho_v = -D_o (\varepsilon - \theta) \tau \rho_{vs} \nabla h, \quad (5.5)$$

onde ($\tau = \tau_1^2$), é a tortuosidade, j_v é a densidade de fluxo microscópica da fase vapor, ρ_v é a massa específica do vapor adsorvido, D_o é o coeficiente de difusão do vapor d'água no ar, ε é a porosidade do material e θ é o conteúdo volumétrico de água.

Os modelos clássicos, elaborados para solos onde a dimensão dos poros existentes é muito superior ao livre percurso médio, excluem a transferência de vapor através de poros muito pequenos como os existentes nos meios porosos consolidados. No caso dos meios porosos consolidados, onde ocorre a transferência através de poros de diâmetro inferior ao livre percurso médio, define-se o coeficiente de difusão mista, D_r , [109],

$$D_r = \frac{D_o}{1 + \frac{\lambda}{(D - 2e_a)}}, \quad (5.6)$$

onde λ é o livre percurso médio das moléculas de vapor d'água no ar, D_o é o coeficiente de difusão do vapor d'água no ar, e_a é a espessura da camada adsorvida.

O coeficiente de transferência macroscópico não pode ser calculado em função dos valores de D_r dentro dos diferentes poros sem que se estabeleça uma hipótese associada às suas

interconexões. Dessa forma a macroscopização é complicada e não prova que uma lei tendo a forma da lei de Fick seja suficiente para definir as transferências na escala macroscópica, numa situação onde o meio apresente agrupamentos de poros muito pequenos.

Assim o coeficiente de transferência resultante da macroscopização dentro de um elemento de volume inclui os efeitos de tortuosidade, a variabilidade do coeficiente local, D_T , dentro do elemento de volume e as trocas do vapor com a fase líquida contínua ou não.

O escoamento da fase líquida, suposta contínua, é considerado nos modelos clássicos como viscoso laminar [110,111,112]. Na escala microscópica as equações de Navier-Stokes, eventualmente sob a forma da lei de Poiseuille são aplicáveis. A passagem para a escala macroscópica é complicada devido ao fato de que o coeficiente que associa o fluxo ao gradiente de pressão depende de posição no espaço.

Na literatura, mostra-se [5,56] que o cálculo do coeficiente macroscópico está associado às hipóteses de interconexões dos poros dando lugar a diversos modelos.

Define-se de forma direta um coeficiente de transferência macroscópico, chamado condutividade da fase líquida e escreve-se a lei de Darcy:

$$J_l = -\rho_l K_l \nabla \psi, \quad (5.7)$$

onde ψ é o potencial de retenção do líquido, $\psi = \frac{p_l}{\rho_l g} + z$, ρ_l é massa específica da água, p_l é a pressão do líquido e J_l é a densidade de fluxo macroscópica da fase líquida. Neste trabalho despreza-se o potencial gravitacional, z .

Pode-se escrever:

$$J_l = -\frac{K_l}{g} \frac{\partial p_l}{\partial x} = -\frac{K_l}{g} \frac{\partial \phi_l}{\partial x}, \quad (5.8)$$

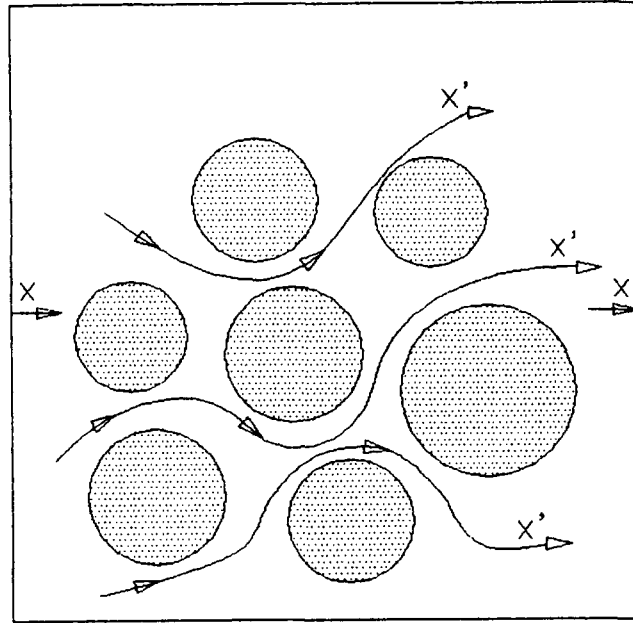


Figura 5.4 - Difusão de vapor em meio poroso.

sendo ϕ_l o potencial químico da água capilar que se identifica com a pressão do líquido dentro do caso isotérmico. O coeficiente K_l , condutividade da fase líquida, é função do estado local da fase líquida, definido por ϕ_l ou pelo teor em líquido θ . De outra forma, a lei de Darcy resulta implicitamente da macroscopização da lei de Poiseuille e se pode prever que K_l , é inversamente proporcional à viscosidade cinemática, $\nu = \frac{\mu}{\rho_l}$.

5.2.3 - Os diferentes coeficientes de transferência macroscópicos

Sob condições de equilíbrio local, o estado do líquido no interior de um volume elementar pode ser descrito, a cada instante, como se estivesse em equilíbrio com o vapor, valendo a lei de Kelvin:

$$\phi_l = \frac{\rho_l \mathcal{R} T}{M} \ln h, \quad (5.9)$$

onde \mathfrak{R} é a constante universal dos gases, M é o peso molecular da água, T é a temperatura e h é a umidade relativa.

Adicionando-se os dois fluxos, Equações (5.5) e (5.8) obtém-se:

$$J = J_v + J_l = -\frac{K_l}{g} \frac{\partial \phi_l}{\partial x} - D_o (\varepsilon - \theta) \tau \rho_{vs} \frac{\partial h}{\partial x}, \quad (5.10)$$

e com a hipótese de equilíbrio local que permite expressar os fluxos J_v e J_l pela média do gradiente da mesma grandeza intensiva ϕ_l ou h , tem-se:

$$J_l = -\frac{K_l}{g} \frac{\partial \phi_l}{\partial x} = -\frac{K_l}{g} \frac{\rho_l \mathfrak{R} T}{M} \frac{1}{h} \frac{\partial h}{\partial x}, \quad (5.11)$$

e

$$J_v = -D_o (\varepsilon - \theta) \tau \rho_{vs} \frac{\partial h}{\partial x} = -D_o (\varepsilon - \theta) \tau \rho_{vs} \frac{M}{\rho_l \mathfrak{R} T} h \frac{\partial \phi_l}{\partial x}, \quad (5.12)$$

pois, da lei de Kelvin, Equação (5.9), a temperatura sendo constante:

$$\frac{\partial h}{\partial x} = \frac{M}{\rho_l \mathfrak{R} T} h \frac{\partial \phi_l}{\partial x}. \quad (5.13)$$

Utilizando a umidade relativa como potencial motor pode-se escrever a lei macroscópica de transferência isotérmica de massa sob a forma,

$$J = -\left[\frac{K_l}{g} \frac{\rho_l \mathfrak{R} T}{M} \frac{1}{h \rho_{vs}} + D_o (\varepsilon - \theta) \tau \right] \rho_{vs} \frac{\partial h}{\partial x}, \quad (5.14)$$

e em termos de ϕ_l :

$$J = - \left[K_1 + gD_o(\varepsilon - \theta) \tau \rho_{vs} \frac{M}{\rho_l \mathcal{R} T} h \right] \frac{1}{g} \frac{\partial \phi_1}{\partial x}. \quad (5.15)$$

Comparando a Equação (5.14) com a lei de Fick nota-se que o coeficiente global que está dentro dos colchetes, tem a dimensão de uma difusividade,

$$J = -D_h \rho_{vs} \nabla h. \quad (5.16)$$

Da mesma forma, comparando a Equação (5.15) com a equação de Darcy, o coeficiente global que está dentro dos colchetes, pode ser definido como a condutividade hidráulica global,

$$J = -\frac{K}{g} \nabla \phi_1, \quad (5.17)$$

com a seguinte relação:

$$\rho_{vs} D_h = \frac{\rho_l \mathcal{R} T}{M} \frac{K}{g} \frac{1}{h}. \quad (5.18)$$

Se existe uma função $\phi_1(\theta)$ ou $p_1(\theta)$ definida e diferenciável [109] (hipótese de equilíbrio local), tem-se:

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial x} = \left(\frac{\partial \phi_1}{\partial \theta} \right)_T \frac{\partial \theta}{\partial x}, \quad (5.19)$$

e

$$\frac{\partial h}{\partial x} = \left(\frac{\partial h}{\partial \theta} \right)_T \frac{\partial \theta}{\partial x}, \quad (5.20)$$

e desse modo,

$$J = -\rho_l D_\theta \frac{\partial \theta}{\partial x} = -D_h \rho_{vs} \frac{\partial h}{\partial x} = -\frac{K}{g} \frac{\partial \phi_1}{\partial x}. \quad (5.21)$$

O novo coeficiente de difusão global, D_θ , se expressa em função dos outros coeficientes de transferência com a seguinte relação:

$$D_\theta = \frac{\rho_{vs}}{\rho_l} \left(\frac{\partial h}{\partial \theta} \right)_T D_h = \frac{K}{\rho_l g} \left(\frac{\partial \phi_l}{\partial \theta} \right)_T \quad (5.22)$$

O valor da derivada $\left(\frac{\partial \phi_l}{\partial \theta} \right)_T$, pode ser calculado a partir das isotermas de adsorção.

Deve-se observar que todos os coeficientes globais de transferência definidos (D_h , D_θ , K) são a uma dada temperatura, funções do estado do meio poroso definido por ϕ_l ou θ .

Objetiva-se simular os coeficientes globais de transferência definidos acima, levando-se em conta a transferência dentro das duas fases contínuas ou descontínuas, sobre um elemento de volume, sob a hipótese de equilíbrio local. Esta hipótese permite escrever o fluxo global proporcionalmente a uma variável de estado, definida na escala microscópica. A simulação consiste em explicitar a operação de macroscopização considerando uma rede de poros esféricos como o volume elementar representativo, na faixa de diâmetros de poro de 1000 à 10000 Å. Numa segunda etapa desta simulação utiliza-se um modelo similar ao modelo de Maxwell - De Vries, como o volume elementar representativo.

5.3 - Simulação do processo de transferência isotérmica de umidade sobre uma rede representativa do meio poroso estudado.

5.3.1 - Princípio da simulação

No capítulo 4 determinou-se, para cada valor da pressão do líquido ou umidade relativa, o estado de ocupação de todos os sítios da rede para a fase molhante ou para a fase não molhante em equilíbrio. A distribuição espacial das duas fases associada a uma dada saturação, depende do

sentido de evolução da pressão do líquido. Estuda-se os processos de embebição e de drenagem considerando a invasão puramente capilar.

A migração de umidade no interior do elemento, concebido como uma rede de poros, tem analogia ao fluxo de corrente dentro de uma rede de resistências elétricas. A condutância equivalente representa o coeficiente de transferência macroscópico para um dado estado de saturação. A contribuição de cada poro da rede ao fluxo macroscópico é descrita por uma resistência que o mesmo oferecerá à passagem de vapor, se o elemento está ocupado pela fase não molhante, ou à passagem de líquido, se o elemento está ocupado pela fase molhante. Assim a condutância de cada poro ou ramo da rede é definida segundo seu estado de ocupação.

Nesta análise utiliza-se um potencial de transferência único, calculado em todos os nós da rede. A difusão do vapor está associada a um gradiente de umidade relativa e o escoamento do líquido está associado a um gradiente de pressão capilar. Aplicando-se a lei de Kelvin em cada nó da rede (hipótese de equilíbrio termodinâmico entre fases), os dois potenciais podem ser relacionados.

A ocorrência dos processos de mudança de fase nas interfaces vapor/líquido dificulta a distinção entre os efeitos dos mecanismos de transporte por difusão de vapor e por escoamento viscoso de líquido. A hipótese de equilíbrio local permite considerar a migração como estacionária a cada instante, ao nível do volume elementar representativo. Estes processos de mudança de fase nas interfaces vapor/líquido implicam também, ao nível do elemento de volume, uma interação forte e complexa entre a difusão de vapor e o escoamento viscoso de líquido, que não pode a princípio, se traduzir por uma simples adição das contribuições das duas fases.

O problema consiste em determinar a condutância equivalente da rede quando um pequeno gradiente do potencial p_l , Δp_l ($\Delta p_l \rightarrow 0$), é aplicado entre duas faces opostas da rede. Isto se resume em determinar a pressão p_l nos pontos nodais da rede, levando em conta a resistência de cada ramo da mesma. Resulta um sistema linear heptadiagonal de equações algébricas. O fluxo global através do elemento é calculado permitindo a obtenção da condutância

equivalente. Para cada modo de ocupação dos sítios (embebição, drenagem) o cálculo da condutância equivalente é repetido para todos os estados de saturação da rede, Figura 5.5.

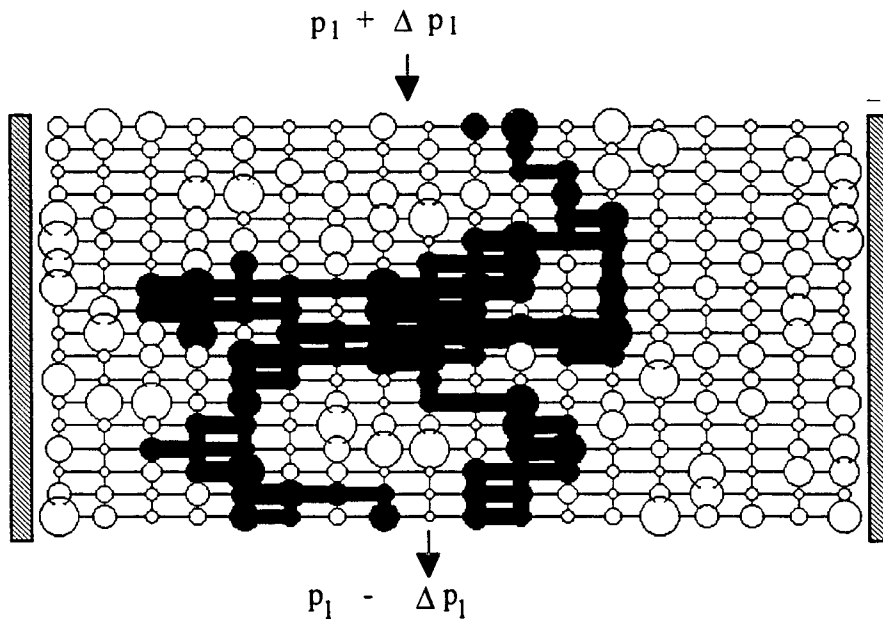


Figura 5.5 - Esquema da simulação. Rede 18X18 simulando a drenagem.
Etapa de percolação. Faces laterais impermeáveis.

5.3.2. - Os coeficientes elementares

Para um tubo de seção circular cheio de água capilar, Figura 5.6, a vazão em massa é dada pela lei de Poiseuille,

$$m_1 = \rho_1 \frac{\pi D^4}{128\mu} \frac{\Delta p_c}{L}, \quad (5.23)$$

onde m_1 é fluxo de líquido através do elemento cilíndrico, L é o comprimento do tubo, D é o diâmetro do tubo, ρ_1 é a massa específica do líquido, e Δp_c é o gradiente de pressão a que está sujeito o tubo.

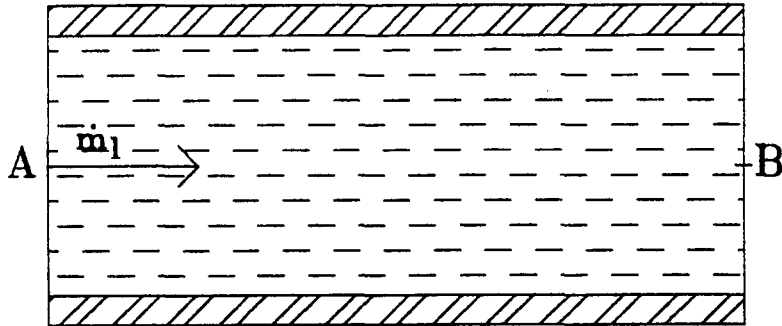


Figura 5.6 - Tubo preenchido por água capilar

Para a viscosidade, μ , da água adota-se a expressão [29,109],

$$\mu = \mu_0 \exp[184 / D], \quad (5.24)$$

onde D é dado em angstroms e μ_0 é a viscosidade da água livre, longe do campo de atuação das forças de interação sólido/líquido. Esta expressão corrige a viscosidade da água dentro de pequenas cavidades onde a água capilar tem uma mobilidade reduzida pela atuação do campo de forças de interação sólido/líquido [109].

A expressão da vazão pode ser escrita como:

$$m_1 = k_{lc} \Delta p_c, \quad (5.25)$$

sendo,

$$k_{lc} = \frac{\rho_l \pi D^4}{128 L}, \quad (5.26)$$

e k_{lc} representa a condutância de um elemento cilíndrico ocupado pela fase molhante.

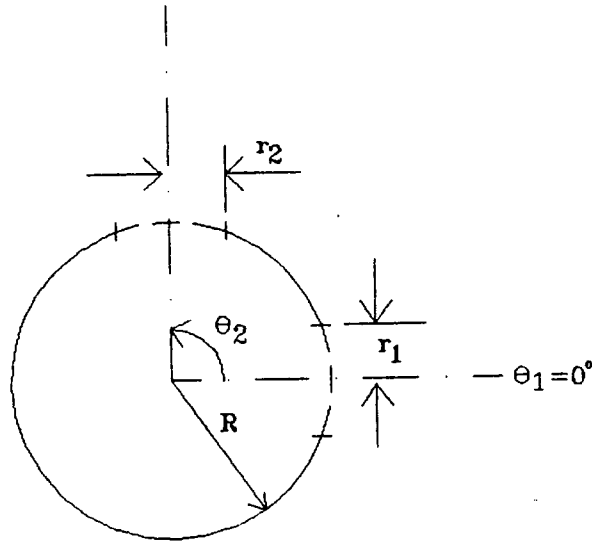


Figura 5.7 - Geometria de um poro esférico.

Neste trabalho utiliza-se poros esféricos e desse modo deve-se ter a expressão da vazão para um elemento esférico, Figura 5.7. Uma expressão aproximada é obtida para representar o fluxo de massa do centro do elemento esférico até uma abertura(janela), seção 1.2.1. A expressão, segundo Koplík [22], mostra que o fluxo é igual ao fluxo através de um elemento cilíndrico equivalente, considerando um comprimento equivalente do cilindro de $2D/\pi$,

$$k_{le} = \frac{\rho_l \pi D^4}{128 \mu} \frac{\pi}{2D}, \quad (5.27)$$

onde k_{le} representa a condutância de um elemento esférico ocupado pela fase molhante e D representa o diâmetro da janela.

Para um tubo de seção circular ocupado pelo vapor, Figura 5.8, o fluxo de massa é dada por:

$$\dot{m}_v = \rho_{vs} \pi (D/2 - e_a)^2 D_r \frac{M}{\rho_l \mathfrak{R} T} h \frac{\Delta p_c}{L}, \quad (5.28)$$

onde \dot{m}_v é o fluxo de vapor através do elemento cilíndrico, ρ_{vs} é a massa específica do vapor d'água saturado, M é o peso molecular da água, T é a temperatura, \mathfrak{R} é a constante dos gases perfeitos, D_r é o coeficiente de difusão do vapor d'água em meio poroso, dado pela Equação (5.6), e e_a é a espessura da camada adsorvida, dada pela expressão,

$$e_a = \frac{1}{a} \ln \left(\frac{-\varepsilon_0}{\mathfrak{R} T} \right) - \frac{1}{a} \ln \left[\ln \left(\frac{1}{h} \right) \right], \quad (5.29)$$

onde $a = 0,3449 \times 10^{10} \text{ m}$ é uma constante relativa à polarizabilidade da água e $\varepsilon_0 = -7,90357 \times 10^6 \text{ J/kgmol}$ é potencial de interação na superfície [39,45].

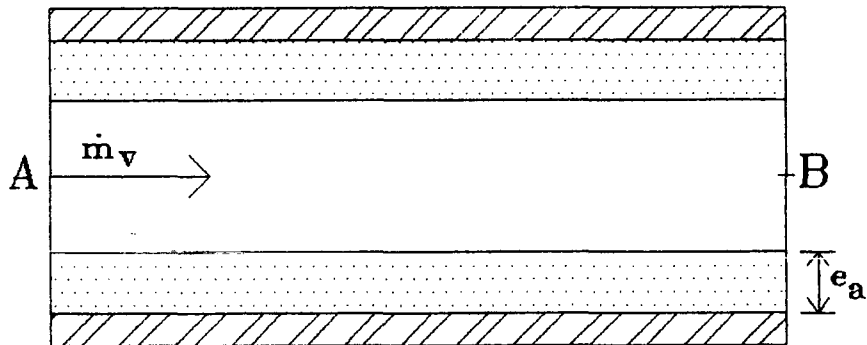


Figura 5.8 - Tubo cujas paredes são cobertas por uma camada de água adsorvida

A expressão da vazão pode ser escrita como:

$$\dot{m}_v = k_{vc} \Delta p_c, \quad (5.30)$$

com,

$$k_{vc} = \left[\rho_{vs} \pi (D/2 - e_a)^2 D_r \frac{M}{\rho_l \mathcal{R}T} h \right] \frac{1}{L}, \quad (5.31)$$

e k_{vc} representa a condutância de um elemento cilíndrico ocupado pela fase não molhante.

Para o caso de um elemento esférico utiliza-se a mesma expressão aproximada usada no caso do elemento esférico ocupado pela fase molhante e dessa forma tem-se:

$$k_{ve} = \left[\rho_{vs} \pi (D/2 - e_a)^2 D_r \frac{M}{\rho_l \mathcal{R}T} h \right] \frac{\pi}{2D}, \quad (5.32)$$

onde k_{ve} representa a condutância de um elemento esférico ocupado pela fase não molhante e D representa o diâmetro da janela, Figura 5.7.

5.3.3 - Esquema numérico - analogia com uma rede de resistências elétricas

Considere quaisquer dois sítios vizinhos a e b de uma rede de sítios, Figura 5.9. A diferença de pressão entre os centros dos dois sítios é a soma da diferença de pressão nos dois sítios:

$$\Delta p_{ab} = p_a + p_b. \quad (5.33)$$

onde p_a é a diferença de pressão no sítio a e p_b é a diferença de pressão no sítio b (é a diferença de pressão entre o centro do sítio e janela, Figura 5.7)

Ainda, o fluido é incompressível e o fluxo é conservado em cada sítio:

$$\sum_{a \rightarrow b} m_{ab} = 0, \quad (5.34)$$

e

$$m_{ab} = k_{ab} \Delta p_{ab}, \quad (5.35)$$

onde a soma é sobre todos os sítios 'a' conectados diretamente aos sítios 'b', k_{ab} é a condutância equivalente de um ramo da rede e m_{ab} é o fluxo de fluido.

As Equações (5.34) e (5.35) são análogas às equações de uma rede de resistências elétricas, Figura 5.9, onde a diferença de pressão corresponde à diferença de voltagem, o fluxo do fluido corresponde ao fluxo de corrente elétrica e k_{ab} corresponde a uma condutância elétrica. Dessa forma pode-se utilizar os mesmos métodos para resolvê-las.

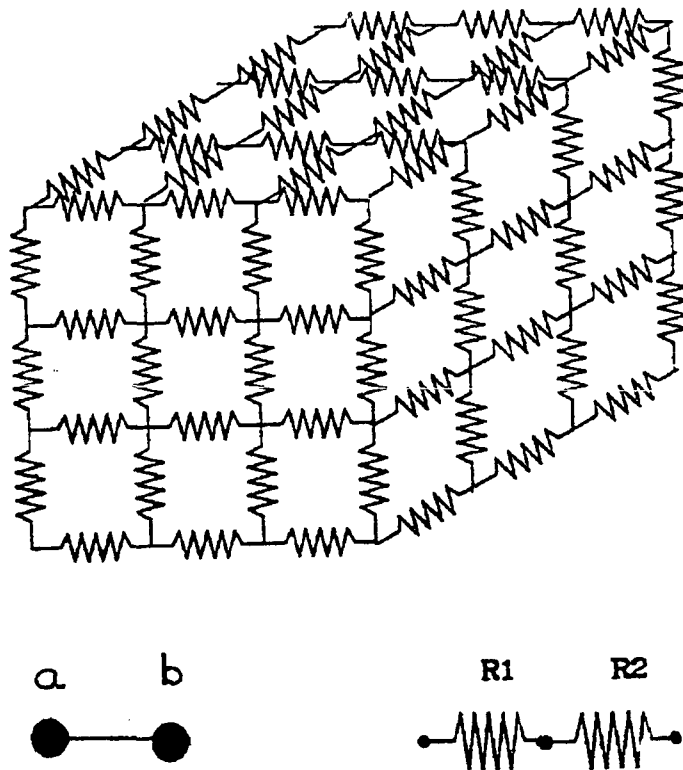


Figura 5.9 - Esquema da rede de resistências elétricas equivalentes.

R_1 e R_2 : resistências dos sítios "a" e "b" respectivamente.

Inserindo-se (5.35) em (5.34) tem-se:

$$\sum_{a \rightarrow b} k_{ab} \Delta p_{ab} = 0. \quad (5.36)$$

Numa forma matricial a Equação (5.36) pode ser representada por:

$$[C].[P] = [B] \quad (5.37)$$

onde [C] é a matriz condutância, [P] é a matriz coluna das pressões no centro dos sítios e [B] é a matriz coluna dos termos independentes.

Com as Equações (5.27) e (5.32) determina-se os coeficientes elementares de cada ramo da malha(rede), em função do estado de ocupação de cada elemento. Para o caso onde os dois sítios estão ocupados pela fase molhante:

$$\frac{1}{k_{ab}} = \frac{1}{k_a} + \frac{1}{k_b} = \left(\frac{128\mu}{\rho_l \pi D^4} \right) \left(\frac{4D}{\pi} \right) \quad (5.38)$$

Para o caso onde um dos sítios está ocupado pela fase molhante e o outro sítio está ocupado pela fase não molhante:

$$\frac{1}{k_{ab}} = \frac{1}{k_a} + \frac{1}{k_b} = \left\{ \left[\rho_{vs} \pi (D/2 - e_a)^2 D_r \frac{M}{\rho_l \mathfrak{R}T} h + \frac{\rho_l \pi D^4}{128\mu} \right] \left(\frac{\pi}{D} \right) \right\}^{-1} \quad (5.39)$$

Para o caso onde os dois sítios estão ocupados pela fase não molhante:

$$\frac{1}{k_{ab}} = \frac{1}{k_a} + \frac{1}{k_b} = \left(\rho_{vs} \pi (D/2 - e_a)^2 D_r \frac{M}{\rho_l \mathfrak{R}T} h \right)^{-1} \left(\frac{4D}{\pi} \right) \quad (5.40)$$

Resolve-se as equações da rede (5.34), (5.35), (5.38), (5.39) e (5.40) numericamente pelo seguinte método. A configuração do fluxo é escolhida de modo que todos os sítios da face de entrada estejam a uma pressão p_e , Figura 5.10, e todos os sítios da face de saída estejam a uma pressão p_s , e superfícies laterais impermeáveis.

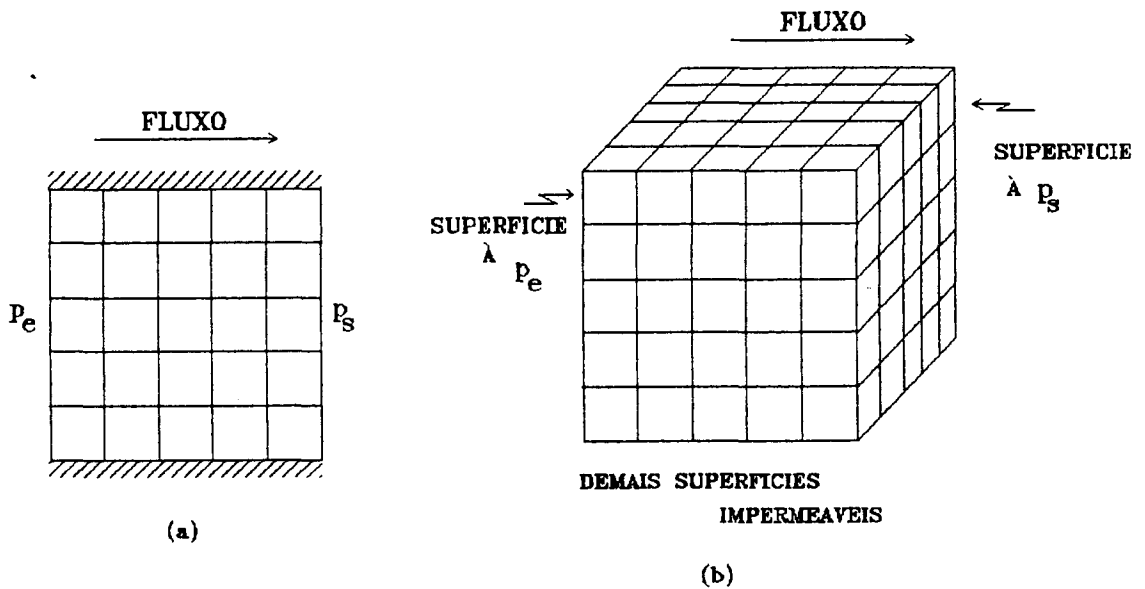


Figura 5.10 - Configuração do fluxo para a obtenção da rede de condutância.

O problema consiste em determinar a pressão no centro dos sítios, ou nós da rede, levando-se em conta a condutância da cada ramo da malha. Trata-se portanto, de determinar a condutância equivalente quando um pequeno incremento na pressão é aplicado entre as duas faces opostas da rede.

Assim o problema é análogo ao problema da determinação de resistência equivalente de uma rede 3-D de resistências.

Considere um ponto corrente de cálculo (i,j,k) , Figura 5.11,

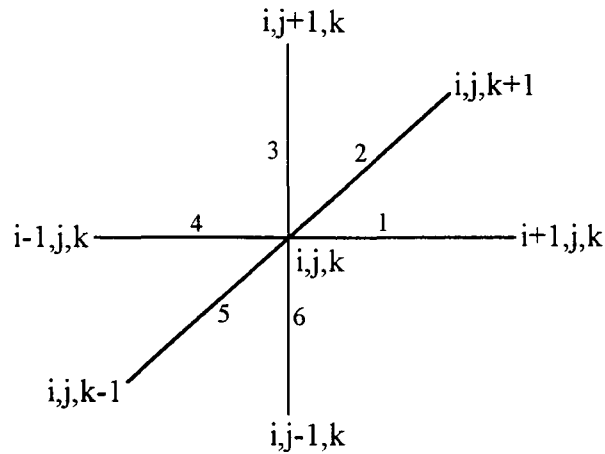


Figura 5.11 - Esquema de um ponto (i,j,k) de cálculo.

onde $i=1,\dots,N$; $j=1,\dots,N$; $k=1,\dots,N$ e N é o tamanho da rede. Aplicando (5.34) tem-se:

$$\sum m = 0,$$

com:

$$\begin{aligned} m_1 &= k_1(p_{i+1,j,k} - p_{i,j,k}), \\ m_2 &= k_2(p_{i,j,k+1} - p_{i,j,k}), \\ m_3 &= k_3(p_{i,j+1,k} - p_{i,j,k}), \\ m_4 &= k_4(p_{i-1,j,k} - p_{i,j,k}), \\ m_5 &= k_5(p_{i,j,k-1} - p_{i,j,k}), \\ m_6 &= k_6(p_{i,j-1,k} - p_{i,j,k}), \end{aligned} \tag{5.41}$$

onde os k_i são os coeficientes elementares de cada ramo da malha chegando ao ponto (i,j,k) .

Da Equação (5.34) resulta:

$$\begin{aligned} &-(k_1 + k_2 + k_3 + k_4 + k_5 + k_6)p_{i,j,k} + k_1 p_{i+1,j,k} + k_2 p_{i,j,k+1} \\ &+ k_3 p_{i,j+1,k} + k_4 p_{i-1,j,k} + k_5 p_{i,j,k-1} + k_6 p_{i,j-1,k} = 0, \end{aligned} \tag{5.42}$$

sujeita às condições de contorno: face de entrada na pressão p_e e a face de saída na pressão p_s , Figura 5.10.

As condutâncias, ou os coeficientes elementares de cada ramo da rede, são calculadas de acordo com o estado de ocupação de cada sítio e obedecendo à distribuição de cada um deles na rede. Forma-se assim a matriz condutância $[C]$, pentadiagonal para redes bidimensionais e heptadiagonal para redes tridimensionais, Figura 5.13. Resulta um sistema linear, Equação (5.37), para a qual são testados vários métodos de resolução do ponto de vista de precisão e do tempo de cálculo (seção 5.5). Controla-se a conservação da massa e a resolução é julgada correta quando o cálculo das vazões sobre três seções da rede (seção de entrada, seção do meio, seção de saída) são idênticas.

O fluxo global é calculado permitindo a obtenção da condutância equivalente,

$$k_{eq} = \frac{\langle m \rangle}{p_e - p_s}, \quad (5.43)$$

onde $\langle m \rangle$ representa o fluxo total médio. A condutância equivalente está relacionada à condutividade hidráulica do meio, por fatores que dependem da geometria global e não de detalhes da distribuição da condutância.

Para cada modo de ocupação dos sítios invadidos o cálculo da condutância equivalente é repetido para todos os estados de saturação da rede.

A condutividade hidráulica é definida através da equação (5.7):

$$J = -\rho_l K \nabla \psi, \quad (5.44)$$

onde $\psi = \frac{p}{\rho_l g} + z$ é o potencial de retenção do líquido. Desprezando-se o potencial gravitacional, tem-se:

$$J = -\rho_l K \frac{\nabla p}{\rho_l g}, \quad (5.45)$$

ou

$$Jg = -K\nabla p, \quad (5.46)$$

mas

$$m = JA, \quad (5.47)$$

assim

$$m = \frac{KA}{g} \frac{\Delta p}{L}. \quad (5.48)$$

Comparando a Equação (5.48) com a Equação (5.35) obtém-se:

$$k = \frac{KA}{gL}, \quad (5.49)$$

onde A é a área de um bloco equivalente à rede, transversal ao fluxo de líquido e L é o comprimento de um bloco equivalente à rede, na direção do fluxo de líquido.

Para uma rede 2-D,

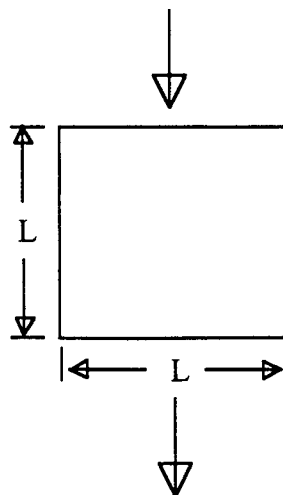


Figura 5.12 (a) - Esquema do bloco equivalente a uma rede 2-D.

Para uma rede 3-D,

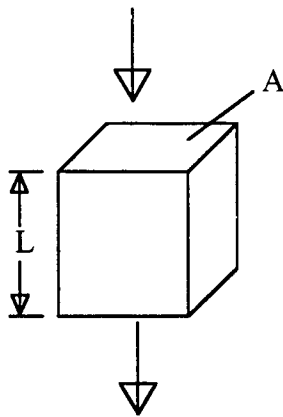


Figura 5.12 (b) - Esquema do bloco equivalente a uma rede 3-D.

No caso do bloco equivalente a uma rede 3-D, o comprimento L é dado por:

$$L = L_{\text{rede}} = \bar{D}_{\text{sítios}} \cdot N, \quad (5.50)$$

onde N é a dimensão linear da rede e $\bar{D}_{\text{sítios}}$ é o diâmetro médio dos sítios, dado por:

$$\bar{D}_{\text{sítios}} = \frac{\sum n_i D_i}{\sum n_i}, \quad i = 1, \dots, 30 \quad (5.51)$$

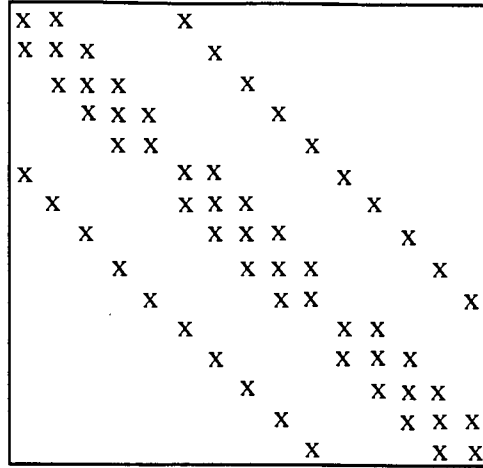
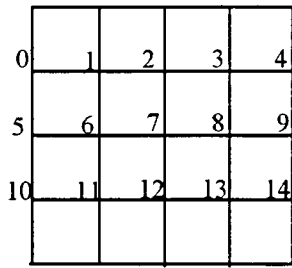
onde n_i é a frequência em número de cada diâmetro de sítio.

A área A é dada por:

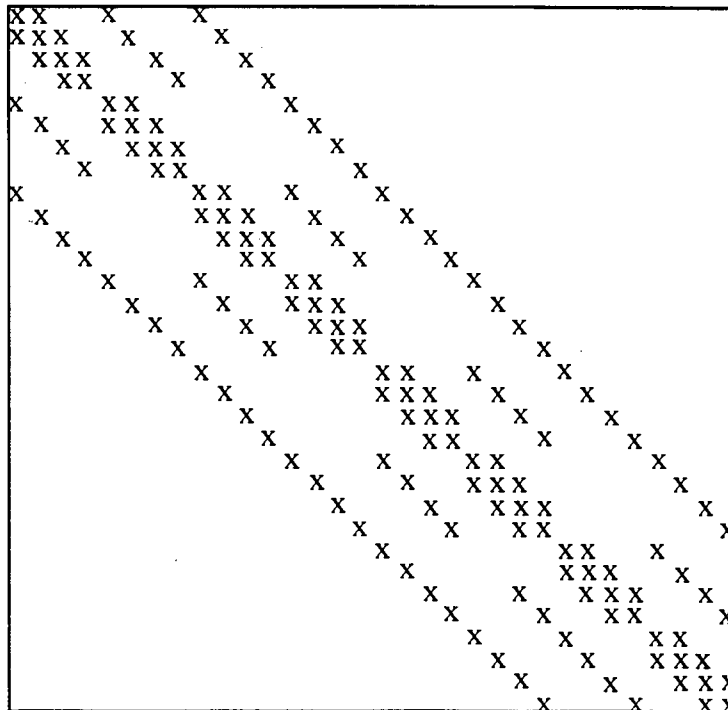
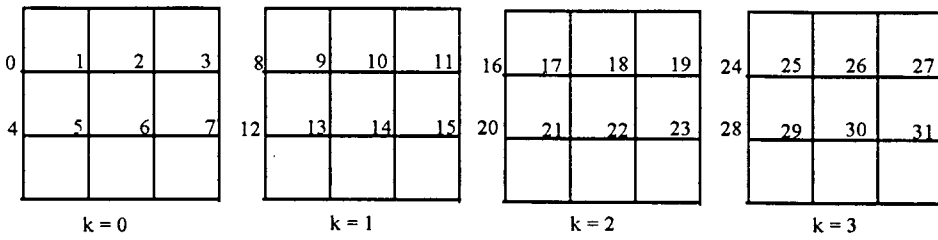
$$A = \frac{A_{\text{rede}}}{\varepsilon_{\text{ap.}}} = \frac{(\pi D_{\text{sítios}}^2 / 4) \cdot N^2}{\varepsilon_{\text{ap.}}}, \quad (5.52)$$

onde $\varepsilon_{\text{ap.}}$ é uma porosidade aparente expressada por:

$$\varepsilon_{\text{ap.}} = \frac{V_{\text{sítios}}^{1000-10000 \text{ \AA}}}{V_{\text{bloco}}^{0-10000 \text{ \AA}}}, \quad (5.53)$$



(a)



(b)

Figura 5.13 - Matriz condutância.
 (a) rede 2-D, N = 5; (b) rede 3-D, N = 4.

onde $V_{\text{sítios}}^{1000-10000 \text{ \AA}}$ representa a proporção de sítios com diâmetro entre 1000 e 10000Å e $V_{\text{bloco}}^{0-10000 \text{ \AA}}$ representa a proporção de sítios com diâmetro entre 0 e 10000Å.

5.4 - Modelo de Maxwell - De Vries

5.4.1 - Justificativa do modelo

Na seção anterior simula-se a condutividade hidráulica da argamassa de cimento e cal utilizando-se a teoria da percolação através de uma rede de sítios. Nesta etapa de simulação utiliza-se apenas uma pequena faixa de diâmetros de poros, da ampla faixa existente, uma vez que cada elemento da rede representa um poro. Em função da variada gama de diâmetros que constitui a argamassa de cimento e cal analisada, Figuras 3.3 à 3.9, fica difícil a simulação pelos processos usuais de percolação. Opta-se, então, em fazer a simulação dividindo-se em duas faixas de diâmetros. Os poros com diâmetros entre 1000 e 10000 Å são simulados por redes de percolação e poros com diâmetros acima de 10000 Å são simulados pelo modelo de Maxwell - De Vries.

5.4.2 - Definição do modelo

O esquema do modelo consiste de um meio contínuo dentro do qual elementos esféricos são distribuídos, Figura 5.14. O objetivo do problema é expressar a condutividade hidráulica deste meio utilizando as condutividades e as frações de volume dos seus constituintes. Aqui o meio contínuo representa a fração cinza, que inclui os poros com diâmetros menores ou iguais a 10000 Å e partículas sólidas e os elementos esféricos representam os poros com diâmetros acima de 10000 Å (macroporos).

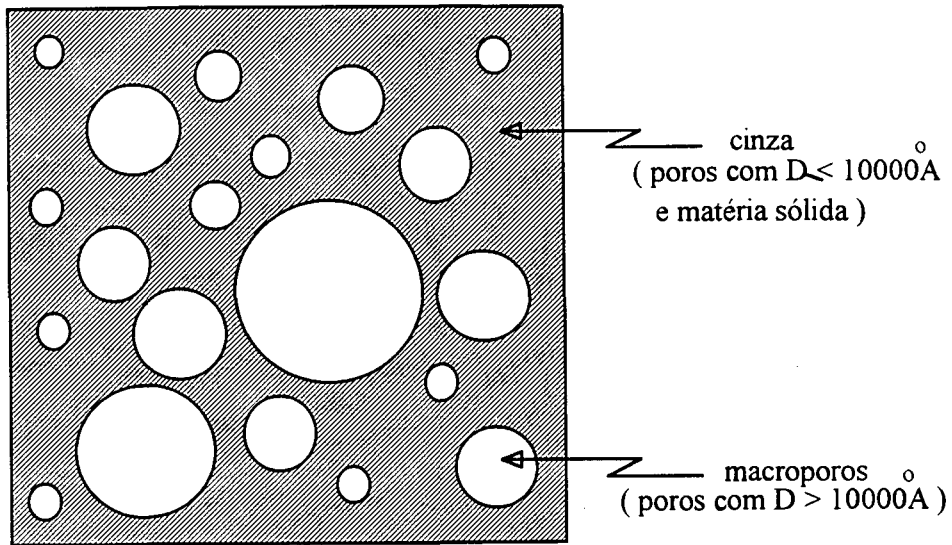


Figura 5.14 - Modelo físico para incluir os macroporos.

Modelo de Maxwell - De Vries [4].

O modelo é inspirado em um modelo conhecido em eletrostática, destinado a representar a constante dielétrica de um sólido formado por uma mistura de vários componentes e em um modelo matemático proposto por De Vries [4] para calcular a condutividade térmica de materiais granulares. De Vries [4] obtém um método de cálculo da condutividade térmica de solos concebidos como um meio contínuo (água ou ar) no qual "partículas" de solo e ar ou água são randomicamente distribuídos. Com suposições acerca da forma destas "partículas", valores da razão entre o gradiente da temperatura média nas "partículas" e no meio podem ser calculados das respectivas condutividades dos constituintes.

Estes modelos utilizam o fato de que é aplicável uma relação linear entre um vetor de fluxo conservativo (fluxo elétrico ou fluxo de calor) e o potencial motor (potencial elétrico ou temperatura) dentro de cada elemento constituinte. O coeficiente escalar desta lei é constante dentro de cada constituinte [4]. Também utilizam o fato de que o meio se compõe de um constituinte principal, contínuo dentro do volume elementar representativo, e dos constituintes adicionais sob a forma de elipsóides, isolados uns dos outros. Segundo De Vries [4] a escolha desta forma geométrica permite resolver de forma exata as equações resultantes da relação linear

entre o fluxo e o gradiente do potencial. A solução mais simples é apresentada por Maxwell [4], onde a interação entre os elementos constituintes é desprezível.

Em seguida apresenta-se as equações resultantes do modelo, inspiradas no modelo de De Vries[4], para a simulação da condutividade hidráulica da argamassa.

Aqui o constituinte principal representa a fração cinza (microporos + matéria sólida) cuja condutividade hidráulica é determinada pela teoria da percolação através de uma rede de sítios esféricos. Os constituintes adicionais representam os macroporos desconectados. Para o material estudado a fração cinza representa aproximadamente 29% e a fração de macroporos em torno de 5,5% e desse modo a soma dos dois representa aproximadamente 35%. Compondo o modelo com estes dois constituintes a nova fração cinza fica em torno de 84% e a de macroporos em torno de 16%.

A faixa completa de diâmetros de poros é dividida em 50 classes, estando cada classe associada a um valor de diâmetro, sendo 30 classes representativas da faixa de diâmetros entre 1000 e 10000 Å, Tabela 3.3, e 20 classes representativas da faixa de diâmetros acima de 10000 Å. Utiliza-se também para os diâmetros acima de 10000 Å uma distribuição em iso-número, Equação (3.12), ou seja, todas as classes tendo a mesma probabilidade de aparição, Tabela 5.1.

Tem-se um esquema de intervenção de duas fases, o vapor e a água capilar. Na simulação da drenagem admite-se inicialmente todo o meio saturado. Os macroporos por estarem desconectados só conseguem ser esvaziados na pressão correspondente ao ponto de percolação da fração cinza, o que corresponde ao diâmetro no qual a frente de secagem alcança a face de saída na rede de sítios esféricos, $p_c = 1,988 \times 10^6 \text{ N/m}^2$. A partir deste ponto, a cada mudança do estado de saturação há variação na proporção de elementos esvaziados. Na simulação da embebição, a cada passo de pressão altera-se o conteúdo de umidade.

Tabela 5.1 - Classes de diâmetros de poro com $D > 10000 \text{ \AA}$.

Diâmetro(\AA)	Proporção acum. em número	Diâmetro(\AA)	Proporção acum. em número
11193,0	0,05	14421,0	0,55
11400,0	0,10	15009,0	0,60
11623,0	0,15	15704,0	0,65
11865,0	0,20	16547,0	0,70
12127,0	0,25	17601,0	0,75
12415,0	0,30	18984,0	0,80
12731,0	0,35	20928,0	0,85
13081,0	0,40	24007,0	0,90
13473,0	0,45	30348,0	0,95
13915,0	0,50	185967,0	1,00

5.4.3 - Equações resultantes do modelo

O vetor fluxo é o fluxo de massa J , e o potencial motor é a pressão.

O modelo consiste em calcular o coeficiente macroscópico K_{eq} do conjunto, tal que:

$$J = -K_{eq} \cdot \nabla p. \quad (5.54)$$

Das Equações (5.8) e (5.17) tem-se que:

$$K = K_{eq} \cdot g. \quad (5.55)$$

O coeficiente K_{eq} é calculado segundo De Vries [4], da seguinte forma:

$$K_{eq} = \frac{(\Delta\eta_o) \cdot K_{eq_o} + \sum c_i (\Delta\eta_i) K_{eq_i}}{(\Delta\eta_o) + \sum c_i (\Delta\eta_i)}, \quad (5.56)$$

onde $(\Delta\eta_i)$ representa a proporção dos macroporos, constituintes adicionais i , $(\Delta\eta_o)$ representa a proporção de cinzas., constituinte principal. Como g está presente em todos os termos da equação acima, pode-se simplificá-lo e K_{eq} representa diretamente a condutividade hidráulica, K .

Dentro da Equação (5.56), K_{eq_o} é a condutividade hidráulica do constituinte principal. Corresponde ao valor obtido através da rede de sítios. Os coeficientes K_{eq_i} representam as condutividades hidráulicas dos constituintes adicionais i .

Os coeficientes c_i são calculados pela expressão [4]:

$$c_i = \frac{1}{3} \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{K_{eq_i}}{K_{eq_o}} - 1 \right) \gamma} + \frac{2}{1 + \left(\frac{K_{eq_i}}{K_{eq_o}} - 1 \right) \left(\frac{1-\gamma}{2} \right)} \right], \quad (5.57)$$

onde γ é um fator de forma ($\gamma = 1/3$ para esfera).

Deve-se agora definir os coeficientes dos elementos constituintes do modelo. O coeficiente do constituinte principal pode ser definido através da lei linear:

$$j = -K_{eq_o} \cdot \nabla p, \quad (5.58)$$

onde j representa o fluxo de massa microscópico, e K_{eq_o} é o coeficiente do constituinte principal definido pela lei de transferência macroscópica dada pela pelas Equações (5.8) e (5.17).

Para cada constituinte adicional de índice i , tem-se da lei linear:

$$j = -K_{eq_i} \cdot \nabla p, \quad (5.59)$$

onde K_{eq_i} é o coeficiente e depende do estado de ocupação do elemento.

Para o caso do elemento cheio de líquido, o fluxo da massa j , é dado por:

$$j = \frac{\rho_l D^2}{32\mu} \cdot \frac{\Delta p}{L}, \quad (5.60)$$

considerando um elemento cilíndrico.

Para o caso do elemento vazio, o fluxo de massa j , é dado por:

$$j = \left[\rho_{vs} \left(\frac{D/2 - e_a}{D/2} \right)^2 \cdot D_r \cdot \frac{M}{\rho_l \mathcal{R}T} \cdot h \right] \frac{\Delta p}{L}, \quad (5.61)$$

considerando um elemento cilíndrico.

Utiliza-se a fórmula aproximada apresentada por Koplik [22], para relacionar o fluxo de massa através de um elemento cilíndrico com o fluxo de massa através de um elemento esférico. Na seção 5.3 calcula-se o fluxo de massa em meia esfera. Neste modelo o fluxo de massa é através de todo o elemento esférico. Da aproximação de Koplik [22], ($L=2D/\pi$) as expressões (5.59) e (5.60) transformam-se em:

$$j = \frac{\rho_l D^2 \pi}{64\mu} \cdot \frac{\Delta p}{2D}, \quad (5.62)$$

quando a fase é líquida, e

$$j = \frac{\pi}{2} \left[\rho_{vs} \left(\frac{D/2 - e_a}{D/2} \right)^2 \cdot D_r \cdot \frac{M}{\rho_l \mathcal{R}T} \cdot h \right] \frac{\Delta p}{2D}, \quad (5.63)$$

quando a fase é vapor, e D representa o diâmetro da janela do sítio, Figura 5.15.

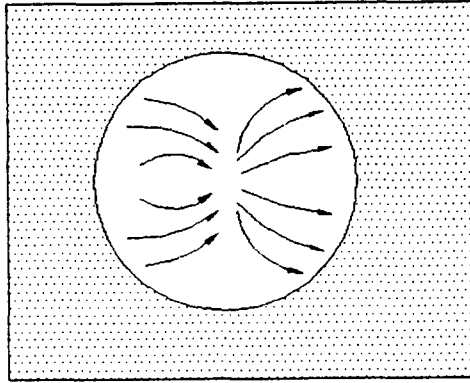


Figura 5.15 - Esquema do fluxo no sítio esférico quando o diâmetro da janela é igual ao diâmetro do sítio.

Neste modelo, a água capilar está em contato com o vapor sobre toda a superfície do poro esférico, Figura 5.15, contrariamente aos modelos usando elementos cilíndricos, onde o contato se dá somente através das extremidades.

5.5 - Métodos de solução para o sistema de equações.

No presente trabalho resolve-se o sistema linear de equações, resultante da simulação dos coeficientes de transferência (Equação (5.37), Figura 5.13), por métodos indiretos ou iterativos [121,122].

Considere o sistema linear, representado pela forma matricial:

$$[A].[x] = [B], \quad (5.64)$$

onde a matriz $[A]$, no presente caso, é simétrica, positiva definida e diagonal dominante, Figura 5.13. Os métodos iterativos são mais práticos, neste caso, porque a matriz $[A]$ é esparsa e de ordem elevada.

O método iterativo de Jacobi [122] é o método de solução mais simples e segue o seguinte algoritmo:

$$x_i^{n+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^n - \sum_{j=i+1}^N a_{ij} x_j^n \right], \quad (5.65)$$

onde N é a ordem da matriz e n representa o índice das iterações. No processo iterativo de Jacobi não se utiliza a informação mais recentemente obtida x_i^{n+1} . Por exemplo, x_1^n é usado no cálculo de x_2^{n+1} embora x_1^{n+1} já esteja calculado. Quando se utiliza, no processo iterativo, o valor calculado mais recente, obtém-se:

$$x_i^{n+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{n+1} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij} x_j^n \right], \quad (5.66)$$

que define o processo iterativo de Gauss-Seidel [122]. Com um parâmetro de relaxação, w , que acelere a convergência tem-se:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + w \left(\frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{n+1} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij} x_j^n \right] - x_i^n \right), \quad (5.67)$$

que define o processo iterativo de Gauss-Seidel com sobre relaxação (SOR) [121,122] e onde

$$0 < w < 2, \quad (5.68)$$

para o caso de uma matriz diagonal dominante.

Um terceiro método utilizado é o método do gradiente conjugado, desenvolvido por M. R. Hestenes e E. Stiefel em 1952 [121]. Jacobs [121] apresenta o princípio básico deste método e também uma generalização do mesmo para sistemas complexos (sistemas de equações cuja matriz $[A]$ é não simétrica e não singular). Aqui se apresenta o método básico do gradiente conjugado adequado para a solução de sistemas de equações cuja matriz $[A]$ é simétrica e positiva definida, Equação (5.64). A característica básica deste método é a minimização do erro pelo método dos deslocamentos(passos) sucessivos [121,122]. Para calcular:

$$[A].[x]=[B], \quad (5.64)$$

onde $[A]$ é uma matriz de ordem N , simétrica e positiva definida, $[B]$ é um vetor de ordem N e $[x_0]$ é a estimativa inicial da solução $[x]$, o método obedece o seguinte procedimento de solução:

* Calcula o resíduo inicial,

$$[r_0]=[B]-[A][x_0] \quad (5.69)$$

* Fixa a primeira direção,

$$[p_0]=[r_0] \quad (5.70)$$

* Para $i = 0, 1, 2, \dots$

- Calcula o coeficiente,

$$\alpha_i = \frac{(r_i, r_i)}{(p_i, Ap_i)} \quad (5.71a)$$

ou

$$\alpha_i = \frac{(p_i, r_i)}{(p_i, Ap_i)} \quad (5.71b)$$

- Calcula a nova estimativa,

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i \quad (5.72)$$

- Determina o novo resíduo,

$$r_{i+1} = B - Ax_{i+1} \quad (5.73a)$$

ou

$$r_{i+1} = r_i - \alpha_i Ap_{i+1} \quad (5.73b)$$

- Determina o coeficiente,

$$\beta_i = \frac{(r_{i+1}, r_{i+1})}{(r_i, r_i)} \quad (5.74a)$$

ou

$$\beta_i = \frac{(r_{i+1}, Ap_i)}{(p_i, Ap_i)} \quad (5.74b)$$

- Fixa a nova direção,

$$p_{i+1} = r_{i+1} + \beta_i p_i \quad (5.75)$$

e continua até r_i ou p_i ser zero.

Nas expressões acima o produto interno (x, y) é definido pela seguinte relação:

$$(x, y) = x^T y. \quad (5.76)$$

Utiliza-se como critério de convergência a variação relativa entre os fluxos de massa em três seções diferentes da rede (entrada, meio, saída). A diferença é comparada a uma tolerância pré-fixada.

Em relação ao tempo de resolução todos os três métodos são competitivos. Implementa-se todos os três métodos nos programas de simulação, mas os métodos de Jacobi e o Gradiente-conjugado são mais vantajosos em relação ao método de Gauss-Seidel (SOR), porque se adaptam às máquinas vetoriais (CONVEX-C210) que aceleram a convergência.

5.6 - Resultados.

Nas figuras que seguem mostram-se os resultados da simulação em relação aos processos de embebição e drenagem. A simulação exclui as fissuras e a influência das mesmas sobre os processos de transferência no meio poroso, que será tratado no capítulo seguinte.

O cálculo da condutividade hidráulica K é efetuado através de um modelo similar ao modelo de Maxwell-De Vries usando-se redes de 20^3 sítios para representar a distribuição de diâmetros de poros na faixa entre 1000 e 10000 Å. Os macroporos (diâmetros > 10000 Å) estão desconectados uns dos outros.

No processo de drenagem os macroporos ($D > 10000$ Å) são esvaziados somente na etapa de pressão correspondente ao ponto de percolação dos microporos ($p_c = 1,989 \times 10^6$ N/m², $D = 1448,00$ Å, Tabelas 3.3 e 5.1). Todo o meio permanece saturado até esta etapa de pressão. A condutividade hidráulica do constituinte principal no modelo Maxwell-De Vries tem um valor correspondente ao da saturação nos microporos, para todas as classes de diâmetro com valor acima do diâmetro onde ocorre a percolação na rede de sítios. Para as classes de diâmetro com valor abaixo do diâmetro crítico dos microporos, o valor da condutividade é aquele obtido através da simulação com a rede de sítios.

Na embebição os poros são preenchidos a cada etapa de pressão. A condutividade hidráulica do constituinte principal no modelo Maxwell-De Vries tem o valor variando conforme obtido na simulação através da rede de sítios. Para as classes de diâmetros correspondentes aos macroporos mantém-se o valor correspondente à saturação dos microporos, ou seja, o valor obtido no último passo de pressão. Isto corresponde à trigésima etapa de pressão, uma vez que no modelo utiliza-se 50 classes de diâmetros, sendo 30 classes correspondentes aos microporos e 20 classes correspondentes aos macroporos, Tabelas 3.3 e 5.1.

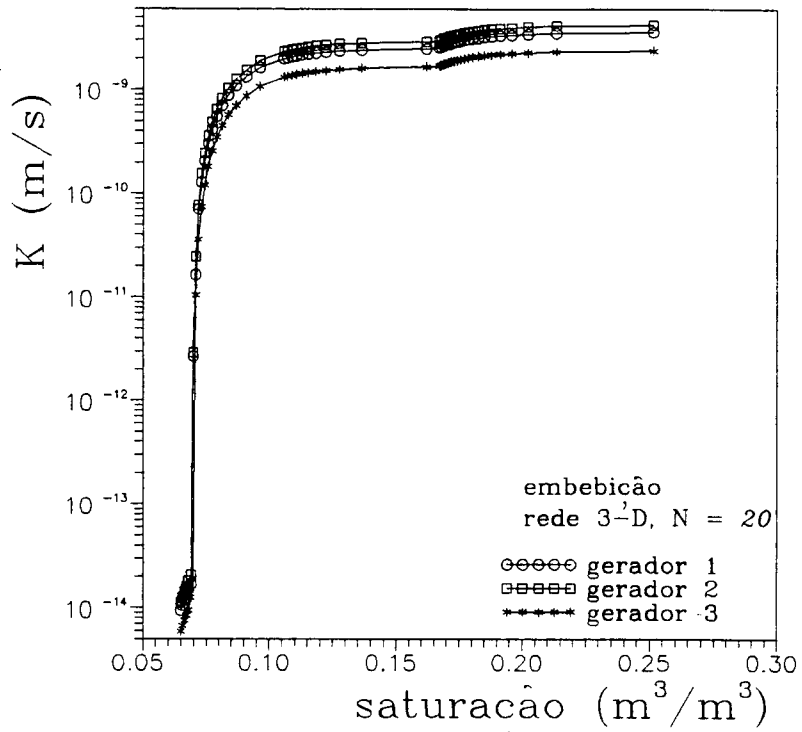
Nas Figuras 5.16 e 5.17 mostra-se a variação do coeficiente, K , com o grau de saturação, calculado a partir de redes de mesmo tamanho, para diferentes configurações espaciais aleatórias das classes de sítios na rede.

Aparentemente, o gerador de números aleatórios contribui modificando apenas a configuração do agrupamento percolante de sítios. Esse efeito é reduzido quando a dimensão linear da rede aumenta, Figuras 5.16 (b) e 5.17 (b).

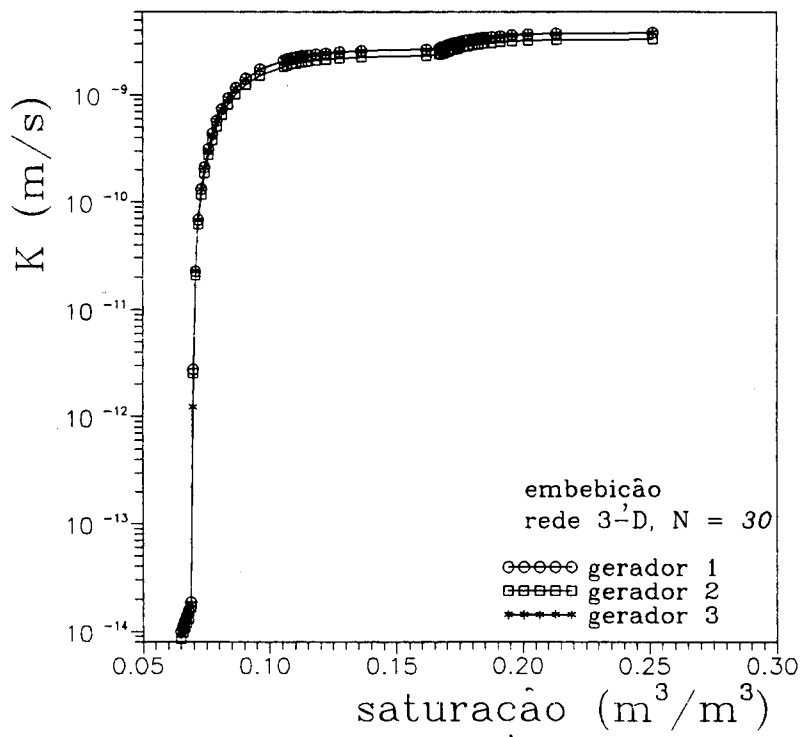
A curva da condutividade hidráulica K sofre um aumento brusco no ponto crítico, permanecendo, em seguida, essencialmente constante para valores maiores do grau de saturação. Esse comportamento é verificado, independentemente do gerador de números aleatórios utilizado. Para a rede utilizada neste trabalho, o ponto crítico corresponde à $0,069 \text{ m}^3/\text{m}^3$ (22,5% da saturação total).

Observa-se nas Figuras 5.17 e 5.18 uma diferença na escala em relação à Figura 5.16. Todavia, a dispersão das curvas da condutividade K , em função do grau de saturação, em relação à configuração espacial aleatória dos sítios na rede, é a mesma, tanto para os processos de drenagem quanto de embebição.

Nas Figuras 5.18 e 5.19 mostra-se a influência do tamanho da rede sobre as curvas da condutividade hidráulica K em função do grau de saturação. Para ambos os processos, observando-se a diferença de escala entre as Figuras 5.18 e 5.19, o comportamento é idêntico. À

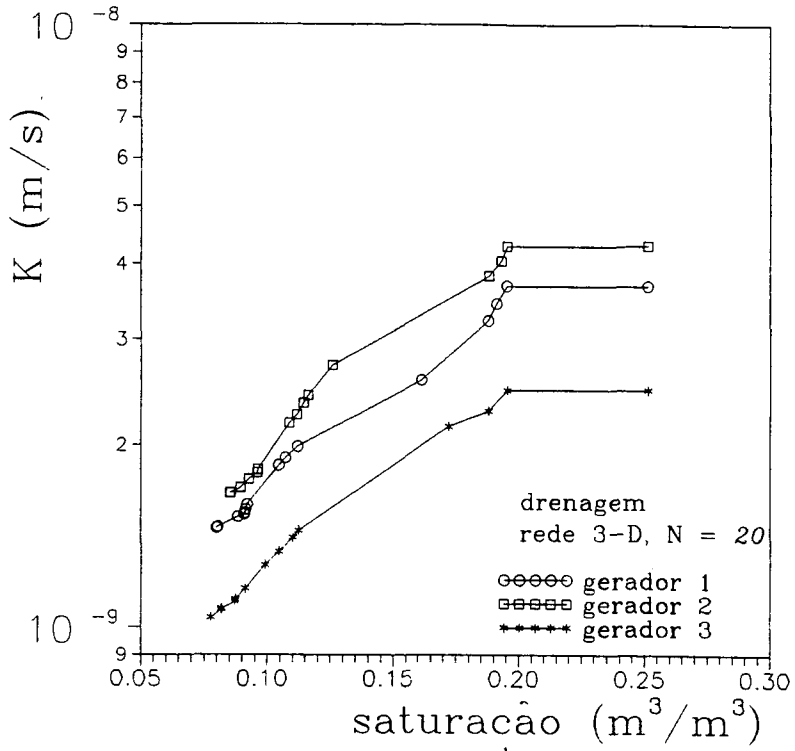


(a)

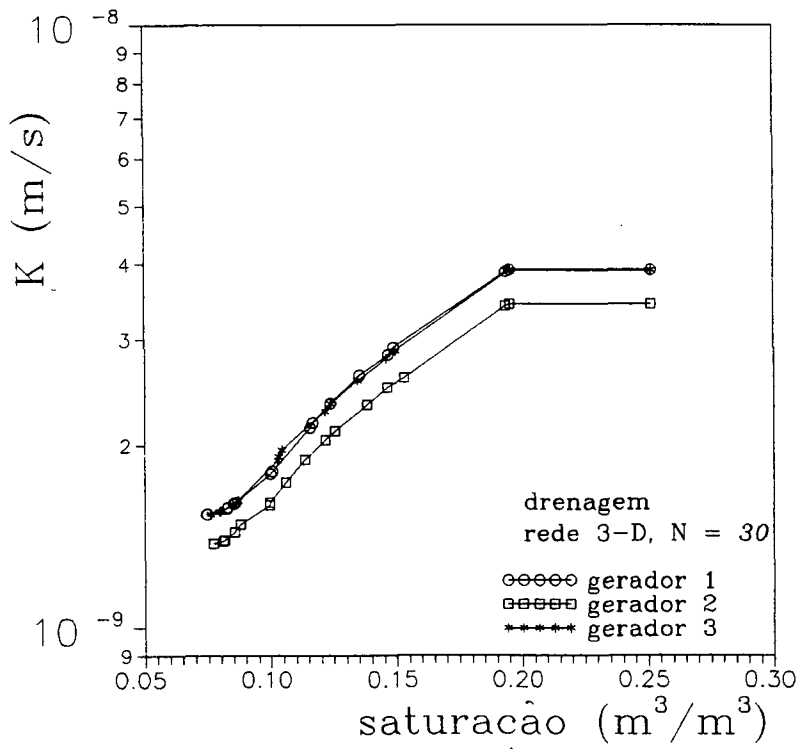


(b)

Figura 5.16 - Influência da configuração espacial aleatória dos poros sobre o coeficiente K, na embebicão.



(a)



(b)

Figura 5.17 - Influência da configuração espacial aleatória dos poros sobre o coeficiente K , na drenagem.

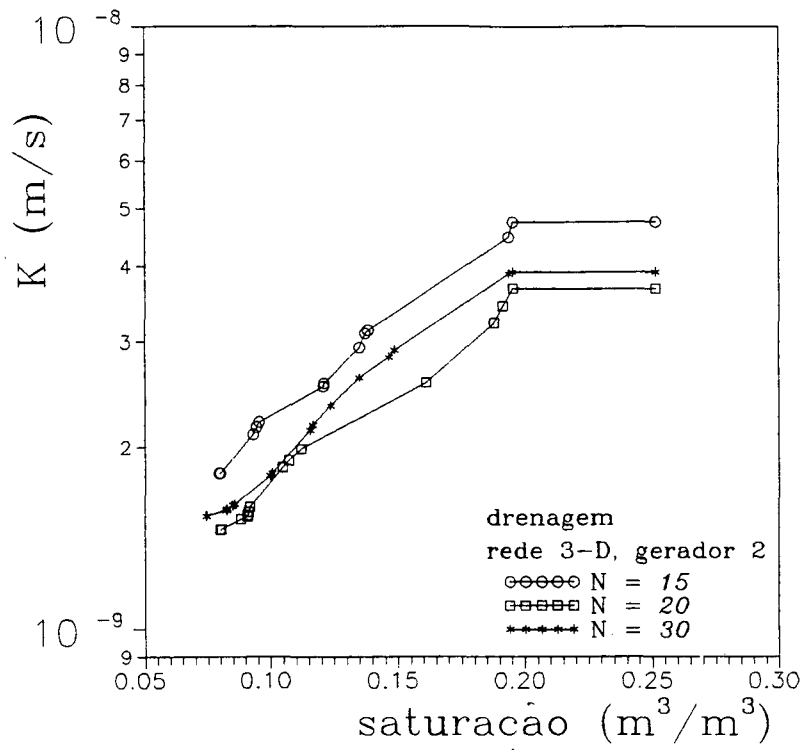


Figura 5.18 - Influência do tamanho da rede sobre o coeficiente K, na drenagem.

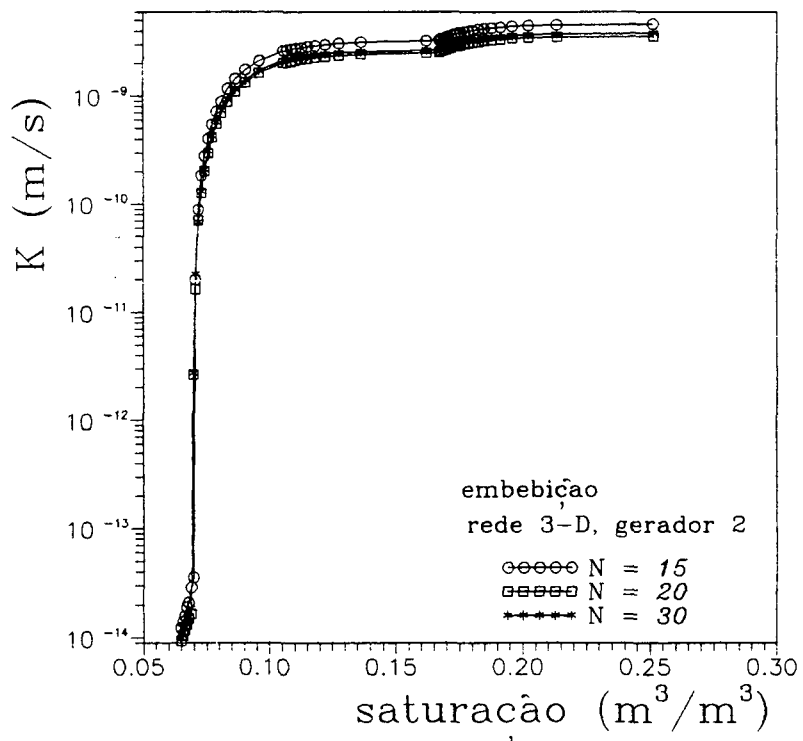


Figura 5.19 - Influência do tamanho da rede sobre o coeficiente K, na embebição.

medida que a dimensão da rede aumenta a dependência das curvas de condutividade hidráulica K em relação aos fatores aleatórios da geração da rede diminui.

Resultados similares são obtidos por Saliba [29], Figura 1.32, utilizando redes de mesmo tamanho para simular toda a faixa de diâmetros.

Para os processos simulados: a drenagem e a embebição, os coeficientes de transferência D_h e a condutividade K são praticamente função somente do grau de saturação, Figuras 5.20 e 5.21. Na simulação da drenagem não é possível esvaziar todos os sítios da rede, ficando ilhas de poros isoladas e conseqüentemente não é alcançado o mesmo grau de saturação inicial do processo de embebição.

O grau de saturação inicial para o processo de embebição corresponde à $0,065 \text{ m}^3/\text{m}^3$. Este valor representa a saturação dos poros com diâmetros inferiores à 1000 \AA .

Para um grau de saturação em torno de $0,069 \text{ m}^3/\text{m}^3$, correspondente ao limite de continuidade da fase líquida, a curva da condutividade hidráulica K , em função do grau de saturação, sofre um crescimento brusco. Após este ponto, para valores maiores do grau de saturação, a variação da condutividade K é bem pequena ou quase nula.

A distribuição de diâmetros de poros utilizada apresenta 15 classes sobre 50 (número de classes utilizadas) com diâmetros pequenos comparado às demais classes e tendo valores próximos uns dos outros com a mesma probabilidade de presença, em função da distribuição em isonúmeros. Estas 15 classes de diâmetros representam apenas uma pequena variação no grau de saturação, como mostrado nas Figuras 5.20 e 5.21. No caso da drenagem este ponto representa a saturação mínima atingida.

Os resultados de Saliba [29], Figuras 1.15, 1.16, 1.31, apresentam uma variação mais gradual comparada aos resultados obtidos neste trabalho, em todo o domínio da saturação.

Para Saliba, o ponto crítico corresponde à $0,4 \text{ m}^3/\text{m}^3$ (40% da saturação), que é consideravelmente maior que o ponto crítico associado à rede utilizada no presente trabalho,

0,069 m^3/m^3 (22,5% da saturação). Isso se deve à concepção de rede utilizada por Saliba: os poros pequenos são agrupados em feixes e associados a um único sítio da rede, de modo a preservar a frequência relativa dos mesmos.

Possivelmente a razão para o crescimento relativamente brando observado nos resultados de Saliba, Figuras 1.15 e 1.16, está também associada à rede utilizada pelo autor, pois a condutância equivalente para um elemento da rede (sítio e/ou ligação), representando um feixe de poros (tubos em paralelo), é maior que a condutância equivalente associada a um único poro.

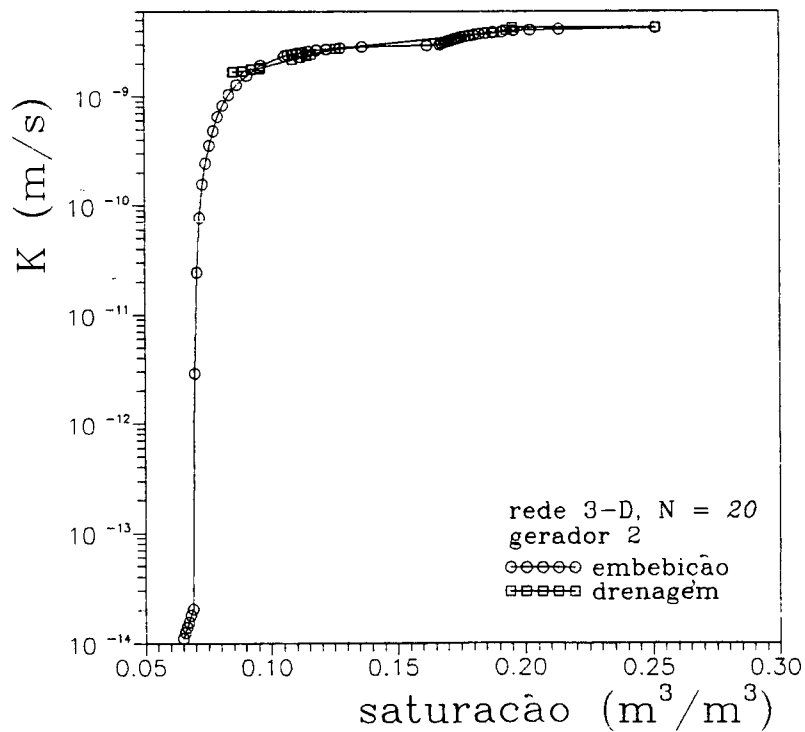
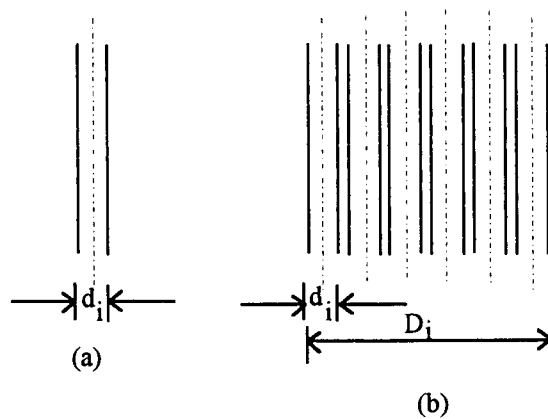


Figura 5.20 - A condutividade hidráulica, K , em função do processo simulado.

No processo de embebição, fica evidenciada a variação dos coeficientes de transferência D_h e da condutividade K para baixos graus de saturação. Este comportamento se deve à concepção da rede utilizada neste trabalho: cada sítio representa um poro. O primeiro agrupamento percolante engloba as classes formadas somente de poros pequenos representando 22,5% da saturação total. Estas classes correspondem à uma proporção em número de 0,29 em relação às demais classes e se aproximam do ponto de percolação das redes cúbicas infinitas encontrado na literatura (0,31), Figura 2.11. Desse modo, as curvas dos coeficientes de transferência apresentam uma evolução bastante acentuada para baixos graus de saturação correspondentes ao ponto crítico da rede.

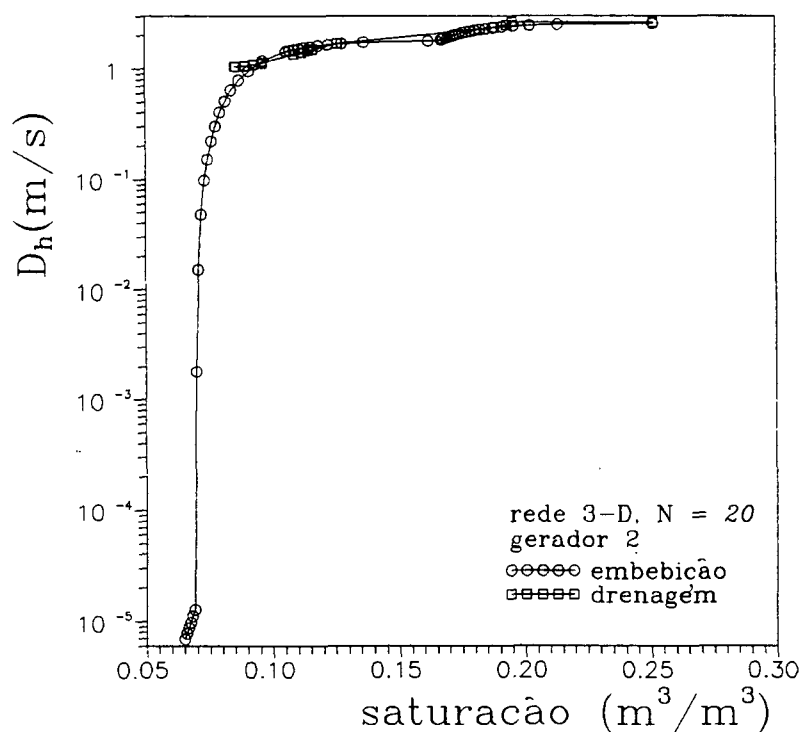


Figura 5.21 - O coeficiente de transferência, D_h , em função do processo simulado.

No caso da drenagem quando a fase não molhante percola, em função da dimensão da rede e da disposição aleatória dos poros na mesma, permanecem ilhas isoladas de microporos (15

classes de poros pequenos em relação ao número total de 50 classes utilizadas), preenchidos de líquidos, não permitindo no cálculo uma queda mais acentuada dos coeficientes de transferência para baixos graus de saturação.

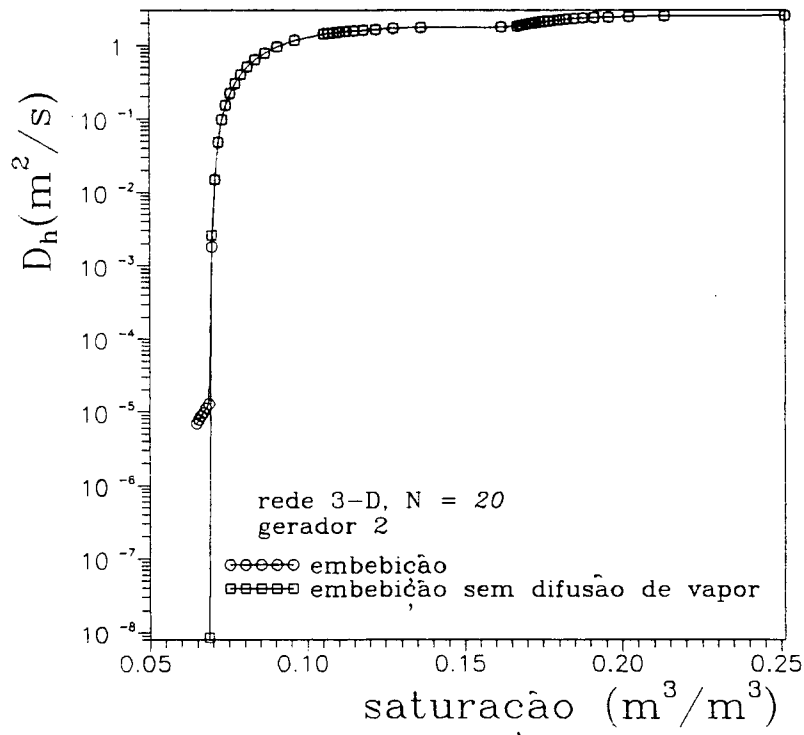


Figura 5.22 - Influência da difusão de vapor sobre o coeficiente de transferência D_h , na embebição.

Este comportamento pode ser explicado melhor quando se isola a contribuição das duas fases, difusão de vapor e migração de líquido, Figuras 5.22 e 5.23.

Na Figura 5.22 mostra-se a contribuição da migração de água capilar. Calcula-se o coeficiente D_{hl} anulando-se a condutância dos poros ocupados pelo vapor. Observa-se que a contribuição da fase líquida é dominante em quase todo o domínio de saturação, coincidindo com o limite de continuidade da água capilar. Na Figura 5.23 mostra-se uma ampliação da Figura 5.22 evidenciando-se o limite de continuidade da fase líquida.

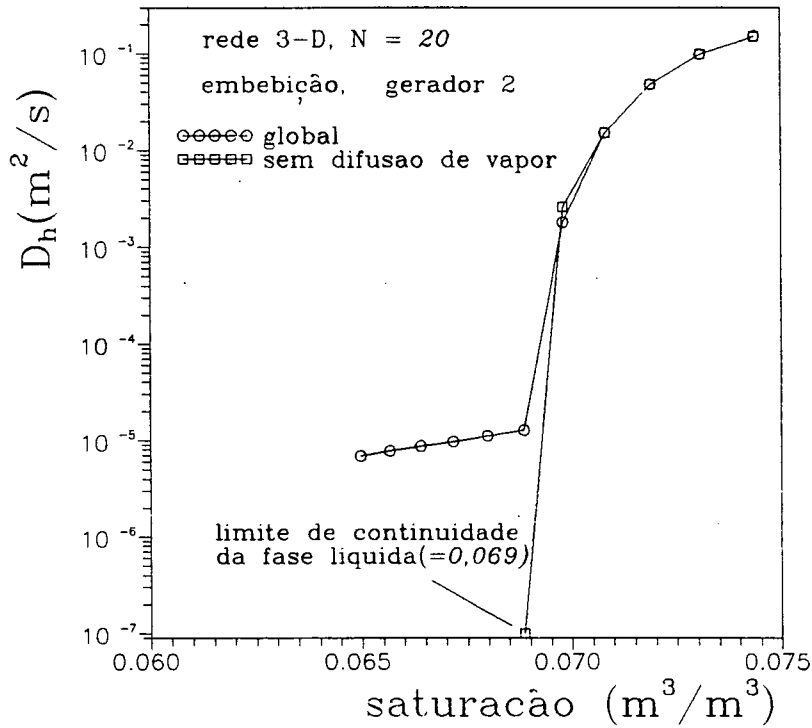


Figura 5.23 - Influência da difusão de vapor sobre o coeficiente de transferência D_h , na embebição evidenciando a região do limite de continuidade da fase líquida.

Para Saliba [29], Figuras 1.32, a contribuição da migração de líquido ocorre para graus de saturação um pouco acima do limite de continuidade da fase líquida.

Verifica-se também a validade da concepção clássica que considera as contribuições das duas fases (líquido e vapor) como aditivas. Calcula-se um terceiro modo de transferência, onde a condutância dos poros ocupados por água é anulada. Obtém-se desse modo somente a contribuição da difusão de vapor, Figura 5.24.

Na Figura 5.24 apresenta-se um coeficiente de transferência global D_h , um coeficiente de transferência D_{hl} evidenciando somente a migração de líquido, um coeficiente de transferência D_{hv} representando somente a difusão de vapor e por último a soma $D_{hl} + D_{hv}$, Figura 5.25. Observa-se que a soma das contribuições das duas fases, supostas isoladas, é inferior ao coeficiente global D_h numa região do domínio da saturação, próximo do limite de continuidade da

fase líquida. Isto mostra a contribuição dos processos de mudança de fase nesta região da saturação.

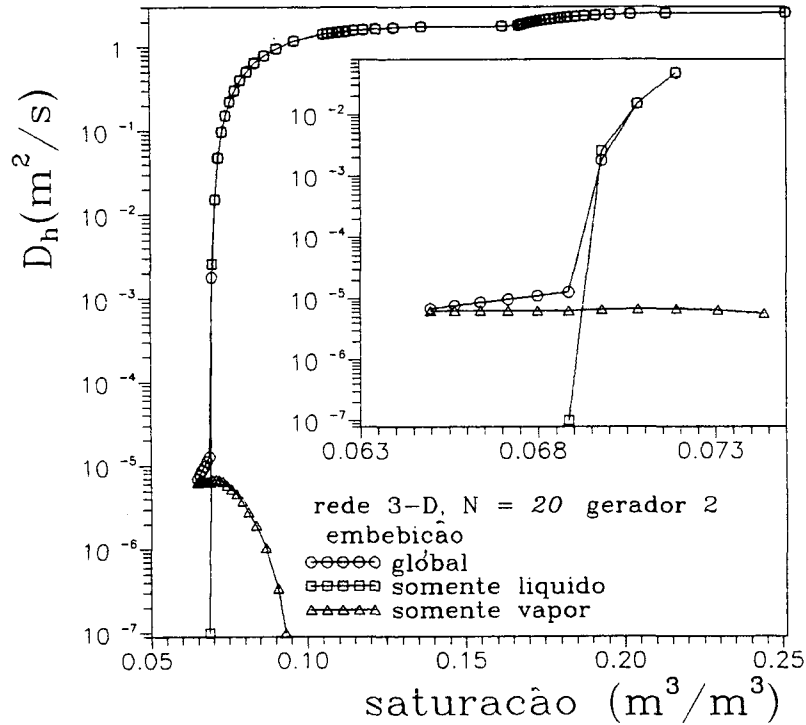


Figura 5.24 - Separação da difusão gasosa e da transferência capilar.

Os resultados apresentados mostram que é possível, de maneira satisfatória dentro de uma estrutura porosa única, simular os fenômenos de tipo estático e dinâmico observáveis à escala macroscópica.

Deve-se observar que para a obtenção destes resultados certas dificuldades de ordem física foram resolvidas de modo aproximado. Estas dificuldades estão associadas ao estado físico e a mobilidade da água dentro dos poros bem pequenos, dentro dos quais os conhecimentos físicos requerem ainda uma modelagem mais rigorosa.

Outra dificuldade encontrada foi em relação a capacidade de memória do computador exigida na simulação dos processos dinâmicos através das redes tridimensionais. Os programas de simulação foram desenvolvidos em linguagem C em microcomputadores PC-486, em função da sua facilidade operacional e, uma vez aprimorados, foram transferidos para um computador de

maior porte, IBM 3090 e/ou CONVEX - C210, acessados através de terminal. A transferência dos programas em linguagem C, desenvolvidos nos microcomputadores para o IBM 3090 apresenta no entanto, algumas dificuldades associadas à não compatibilidade gráfica. entre os dois sistemas, exigindo assim um tempo adicional para a adaptação dos mesmos. A transferência entre os microcomputadores e o CONVEX é mais simples uma vez que existe compatibilidade gráfica entre os mesmos, exigindo apenas modificações associadas ao direcionamento das funções (linguagem C). Esta transferência para computadores de maior porte fez-se necessária em função do tempo de processamento exigido pelos programas de modelagem da drenagem e embebição desenvolvidos, nas redes cúbicas para N acima de 5.

Na Tabela 5.2 apresenta-se o tempo de processamento exigido nas simulações realizadas em função do tipo de processo analisado e do tamanho da rede.

A análise através do modelo de Maxwell - De Vries [4] foi desenvolvida também em linguagem C em microcomputadores PC- 486.

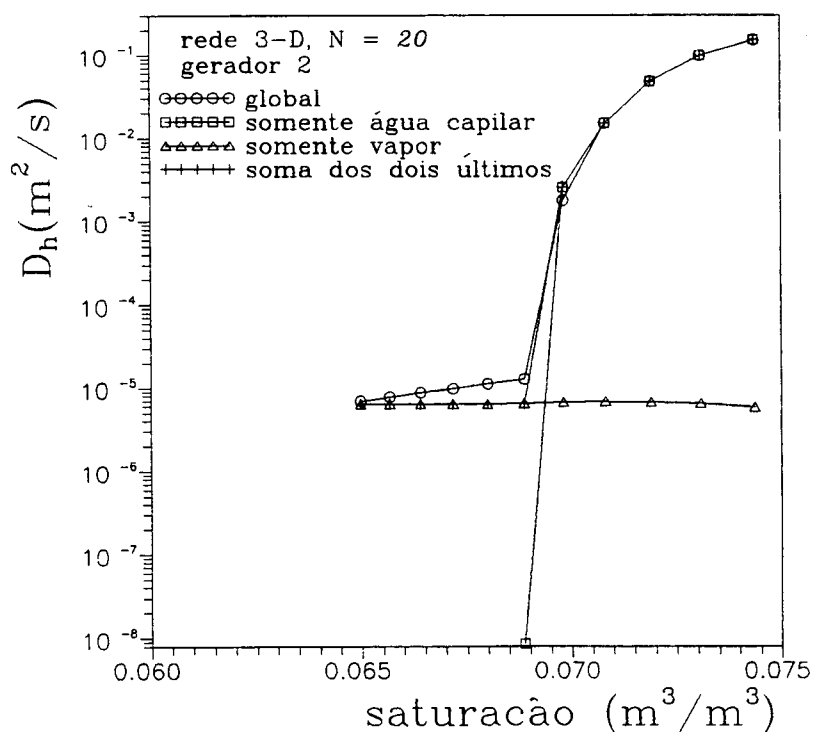


Figura 5.25 - Separação da difusão gasosa e a transferência capilar evidenciando a região no limite da continuidade da fase líquida.

Tabela 5.2 - Tempos de processamento para a modelagem da drenagem e embebição através de redes 3-D de sítios ($1000\text{Å} < D < 10000\text{Å}$). CONVEX - C210.

PROCESSO	TAMANHO DA REDE N	TEMPO DE PROCESSAMENTO (horas)
Drenagem	15 K, D_h	3,11
	20 K, D_h	14,08
	30 K, D_h	22,33
Embebição	15 K, D_h	0,41
	K, D_h	1,04
	20 D_{hl}	0,32
	D_{hv}	0,32
	30 K, D_h	3,78

5.7 - Conclusões

Observa-se nos resultados obtidos, que as curvas da condutividade hidráulica K, em função do grau de saturação, apresentam uma evolução mais acentuada comparada aos resultados de Saliba, [29], e aos resultados a partir do modelo de Childs e Collis-George [5].

Na Figura 5.26 mostra-se a condutividade hidráulica obtida pela simulação feita neste trabalho e através do modelo matemático desenvolvido por Childs e Collis-George, [5], Equação (1.4). A curva da condutividade calculada utilizando-se o modelo de Childs e Collis-George, mostrada na Figura 5.26, foi obtida considerando-se o parâmetro de proporcionalidade $\xi \frac{\rho g}{\mu}$, Equação (1.4), igual à condutividade hidráulica correspondente ao ponto de saturação.

A razão para esta diferença está associada ao efeito da topologia na modelagem. Na simulação utiliza-se uma rede cúbica com número de coordenação igual a 6 enquanto que no

modelo de Childs e Collis-George este efeito não é levado em consideração. No modelo de Childs e Collis-George o número de coordenação é infinito.

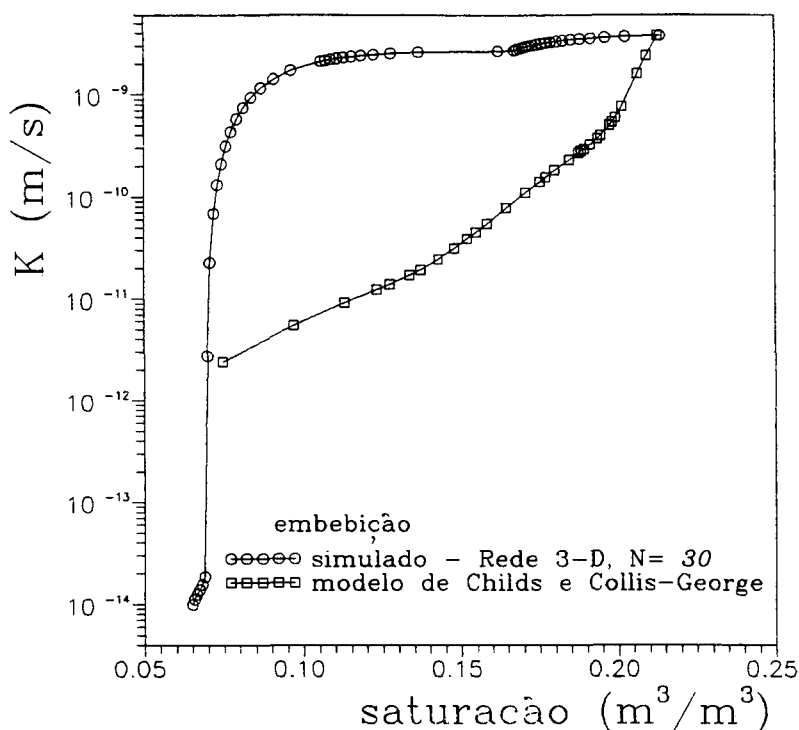


Figura 5.26 - A condutividade K segundo o modelo de Childs e Collis-George.

Em relação aos resultados de Saliba, [29], (seção 1.2.3, capítulo 1) a diferença está associada à distribuição de diâmetros de poros utilizada. Cada elemento da rede utilizada por Saliba, [29], representa um feixe de poros e desta forma a importância dos poros pequenos na simulação dos processos de transferência é diminuída. Observa-se assim, que as curvas obtidas por Saliba, [29], para os coeficientes de transferência K_1 , D_h , apresentam uma evolução mais gradual com o grau de saturação ao longo de todo o domínio da saturação.

A evolução da curva da condutividade hidráulica não é um problema de simulação e está diretamente ligada à rede(modelo) utilizada neste trabalho. Quando se utiliza a frequência em número o resultado mostra-se similar ao resultado de outros autores, Figura 5.27. Quando a

distribuição é em volume o resultado, em função da rede utilizada, difere dos resultados encontrados na literatura, como visto na Figura 5.26.

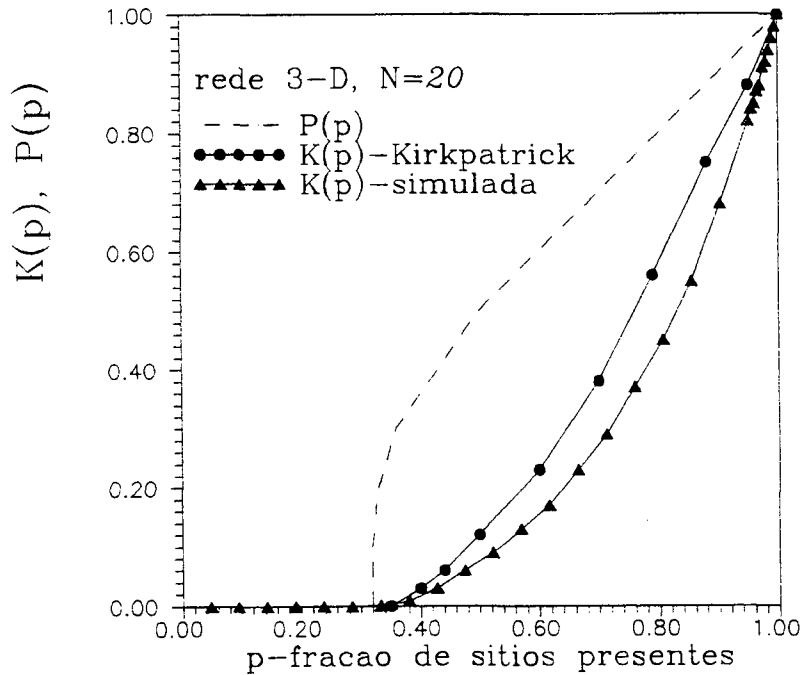


Figura 5.27 - A condutividade K segundo o modelo de Kirkpatrick [15].

Na Figura 5.27 $P(p)$ representa a função probabilidade de percolação (capítulo 2). No seu modelo, Kirkpatrick [15], usa a mesma resistência ao fluxo de massa para todos os sítios, enquanto neste trabalho, a resistência de cada elemento da rede, ao fluxo de massa, depende do estado de ocupação do mesmo.

6 - SIMULAÇÃO DA DIFUSIVIDADE MÁSSICA

6.1 - Introdução

A migração capilar desempenha um papel importante nos processos de transferência dentro de um meio poroso. Se o meio poroso apresenta fissuras, a migração capilar pode ser considerada ainda o mecanismo dominante, mas as respostas são alteradas pela interação com o sistema fraturado.

A difusividade mássica é usualmente obtida experimentalmente em colunas de material poroso, submetidos a processos de embebição isotérmica, Figura 6.1.

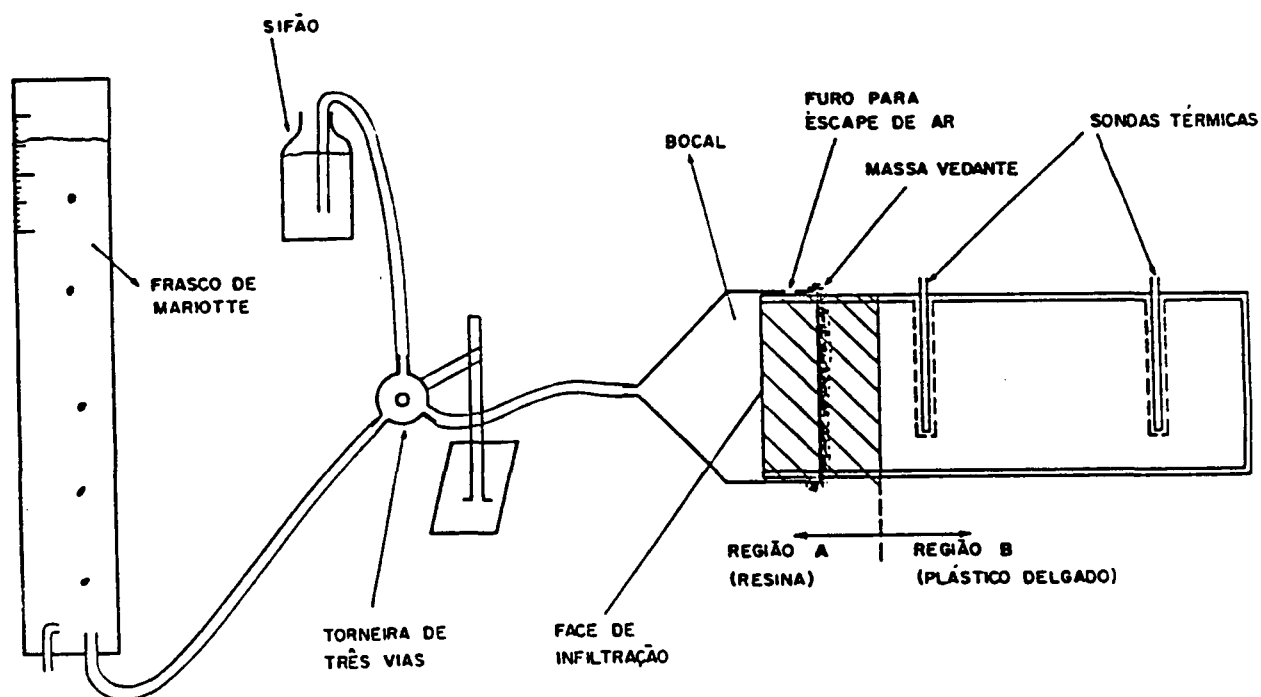


Figura 6.1 - Experimento de infiltração de água - sonda térmica, [119].

Desse modo, Fernandes [119], obteve as curvas de difusividade mássica mostradas na Figura 6.2, submetendo a coluna a uma sucção de 0,1 mca (metros de coluna d'água). Foram

utilizados os métodos da sonda térmica e de atenuação de raios gama na determinação dos perfis de conteúdo de umidade.

Para esses baixos valores de sucção, as fissuras desempenham um papel importante na transferência de umidade na fase líquida. Desse modo, os valores experimentais de difusividade mássica são afetados pela distribuição de fissuras no material.

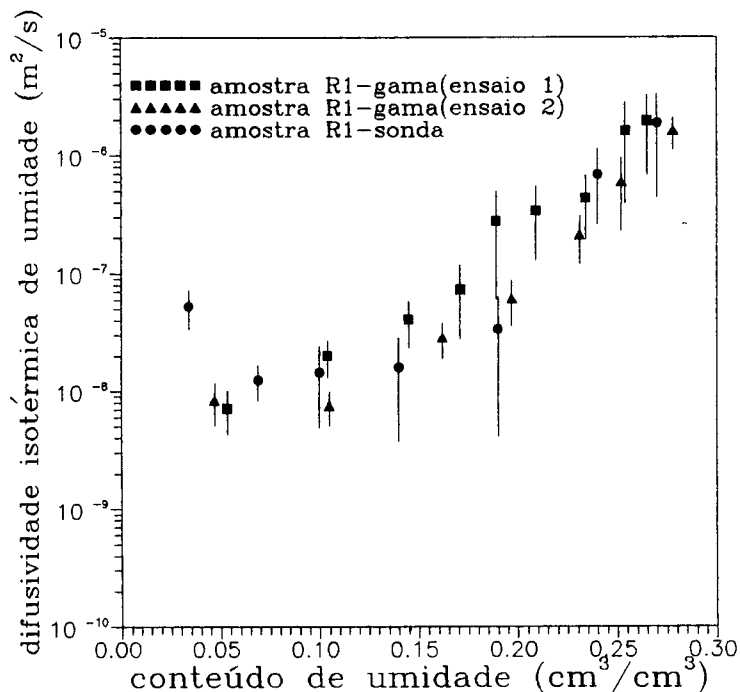


Figura 6.2 - Valores experimentais da difusividade isotérmica de massa em função da saturação, [119]. As barras verticais indicam a incerteza de medição avaliando-se a variação de D_θ através da Equação (6.53) quando de uma variação nos parâmetros θ e η .

O procedimento usual para obter a difusividade mássica, D_θ , a partir da condutividade hidráulica, K , é fazer:

$$D_\theta = K \frac{\partial \psi}{\partial \theta}, \quad (6.1)$$

onde ψ representa o potencial matricial considerando as fissuras homogeneamente distribuidas.

Mas o meio poroso em questão é não homogêneo apresentando fissuras. Os valores de D_0 obtidos em experimentos de embebição são, em princípio, afetados pelo processo de invasão nas fissuras. Desse modo obter D_0 pela Equação (6.1) não conduz a valores que possam ser comparados com os dados experimentais, em função do meio ser não homogêneo.

Em engenharia de petróleo o estudo de meios porosos com fissuras é importante no sentido de determinar o efeito das fissuras sobre o desempenho dos poços na produção de petróleo e também o comportamento transiente da pressão nos mesmos. Processos de transporte dentro de poços fraturados cheios de líquido têm sido modelados, Figura 6.3, usando um mecanismo de dupla migração capilar na fissura e no bloco poroso [57,58,59]. Vários modelos podem ser empregados para descrever o meio poroso com fissuras. Young e Kissling [59] usam uma rede de blocos (esferas, cubos, placas) e fissuras como modelagem do meio poroso com fissuras, Figura 6.4

Normalmente o fluxo dentro dos blocos é assumido puramente unidimensional (perpendicular à direção do fluxo na fissura) para pequenos intervalos de tempo. Fluxo lateral (paralelo à direção do fluxo na fissura) dentro dos blocos torna-se significante somente para longos intervalos de tempo.

A explicação física para este comportamento, segundo Young e Kissling [59] é que o fluxo lateral (horizontal) nos blocos permite à fissura aparecer como uma fonte linear, para tempos e distâncias suficientemente grandes, e a resposta da pressão é análoga à de um meio homogêneo. Isto é fisicamente razoável uma vez que depois de um intervalo de tempo bastante longo a maior parte do fluido, injetado à uma taxa constante na fissura, estará no interior dos blocos, e o comportamento da pressão será mais controlado pelo fluxo bidimensional nos blocos do que pelo fluxo unidimensional na fissura.

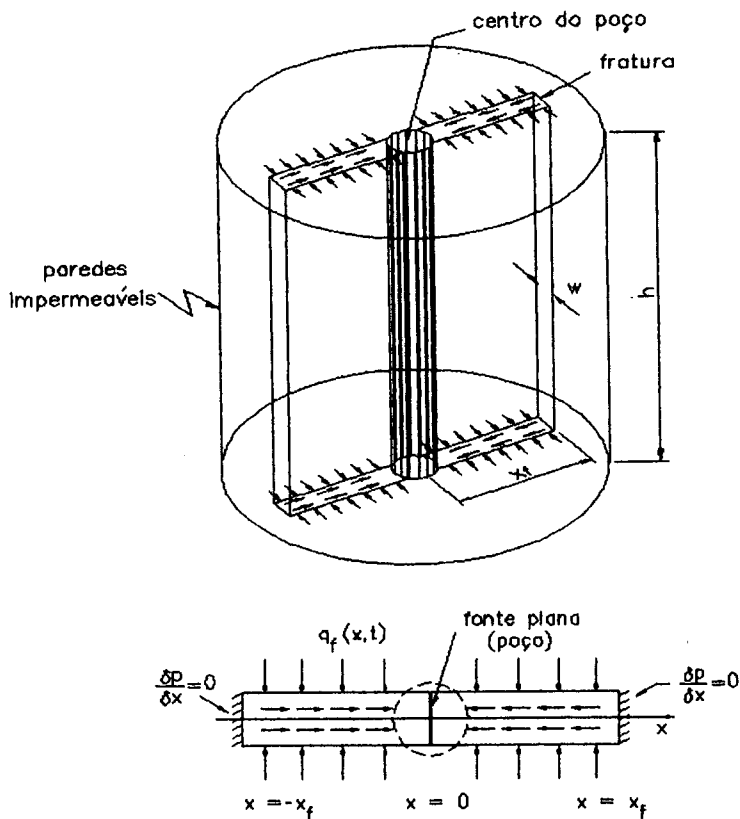


Figura 6.3 - a) Fratura vertical com condutividade finita num reservatório placa infinita; b) modelo de fluxo na fratura [57].

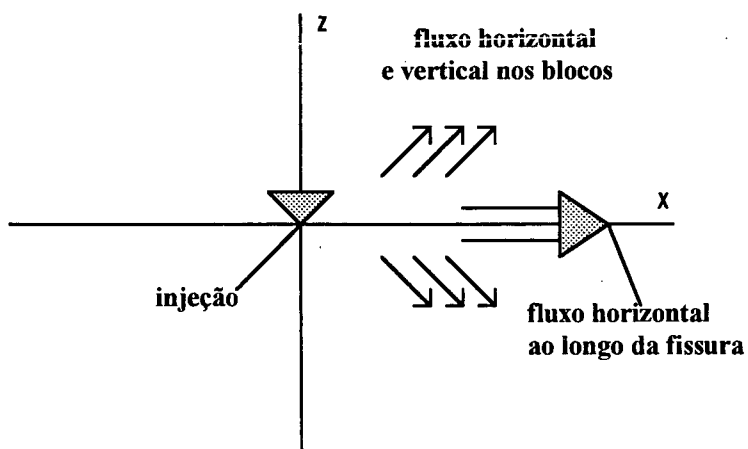


Figura 6.4 - Modelo incluindo o fluxo horizontal nos blocos com a condição de fluxo constante na origem [59].

Os autores apresentam uma extensão dos modelos de fluxo bilinear (fluxo unidimensional nos blocos), Figura 6.3, [58,59], para incluir o fluxo bidimensional nos blocos. O fluido é injetado, à pressão constante, numa fissura plana infinita contornada por dois blocos porosos e homogêneos. O fluido move-se ao longo da fissura e entra nos blocos sob a influência de um gradiente de pressão. A fissura é suposta como uma linha ao longo do eixo x e as quantidades físicas são funções das variáveis cartesianas e do tempo. Uma solução analítica na forma de uma equação integral é obtida.

Como visto no Capítulo 3, fissuras com diâmetro médio de aproximadamente $6\ \mu\text{m}$, separando os grãos de areia da pasta de ligantes, são evidenciadas pelas micrografias, Figuras (3.3) à (3.9) e Tabela 3.2. Estas fissuras são originadas por rupturas localizadas que acompanham os processos de cura e de secagem da argamassa de cimento e cal. Também é provável que o polimento e a evaporação da resina das amostras tenham contribuído para a formação de fissuras na estrutura porosa. Elas estão particularmente localizadas entre os grãos de areia e a pasta de ligantes, e o seu desenvolvimento é favorecido por uma carga mecânica exterior.

As fissuras constituem assim, caminhos preferenciais para o transporte de líquido dentro do material poroso.

No presente capítulo, apresenta-se uma modelagem da difusividade mássica na argamassa de cal e cimento, material não-homogêneo, em associação com o estudo da influência da distribuição de fissuras sobre a transferência de umidade no material estudado.

Simula-se o processo de embebição e os resultados obtidos são comparados com resultados experimentais.

6.2 - Modelo de fissuração utilizado

6.2.1.- Modelo físico

A questão da heterogeneidade de um material como a argamassa de cimento e cal é abordada pela literatura em função da presença das fissuras [49,50]. Yunes [39], Knab et alii [49] e Diamond et alii [50] mostram micrografias de argamassas onde aparecem fissuras de diâmetros médios da ordem de $6 \mu\text{m}$. Essas fissuras, como comentado anteriormente, estão particularmente localizadas no contato entre os grãos de areia e a pasta de ligantes. As micrografias mostram uma hierarquia de escalas, Philippi et alii [45], onde nas micrografias de baixa ampliação observa-se fissuras sempre ao redor dos grãos de areia e macroporos não conectados entre si, mas separados por aglomerados de microporos conectados, representados pelas micrografias de maior ampliação. Estas observações evidenciam o caráter heterogêneo da argamassa.

Neste trabalho a modelagem do meio poroso com fissuras é feita com uma malha regular de blocos (placas) onde as fissuras são dispostas regularmente. Na Figura 6.5, mostra-se o esquema bidimensional que representa o modelo da estrutura porosa com fissuras. A espessura da fissura é determinada obedecendo-se sua fração em volume na seção.

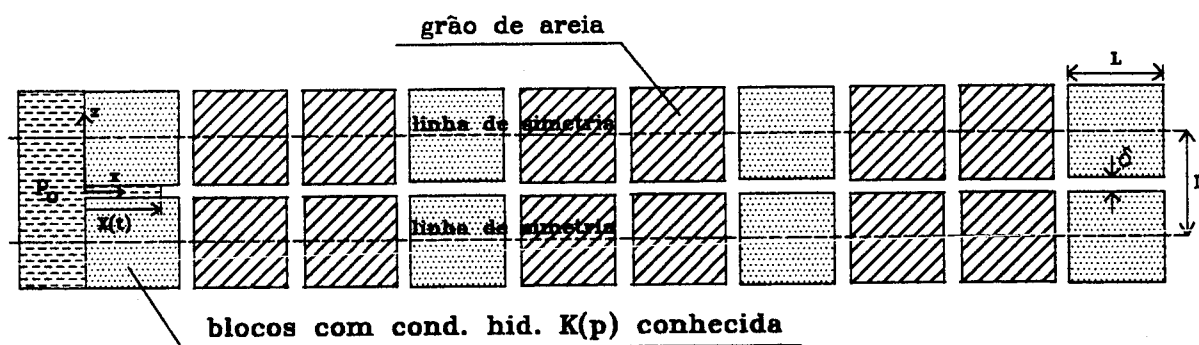


Figura 6.5 - Modelo físico bidimensional para um meio poroso com fissuras.

6.2.2 - Estimativa da condutividade das fissuras

No esquema da Figura 6.5, a espessura do canal, que representa a fissura, é calculada mantendo-se a proporção de fissuras na larga faixa de valores de diâmetros de poro da argamassa analisada. Isso é obtido obedecendo-se à fração volumétrica de fissuras numa seção.

Na Figura 6.6 mostra-se a seção de cálculo da espessura da fissura.

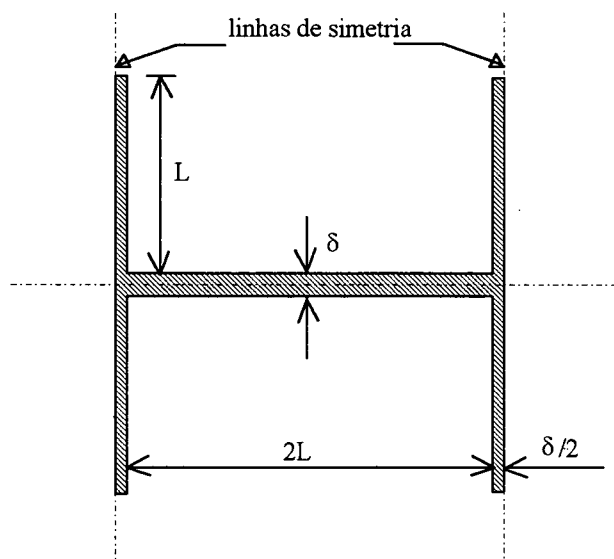


Figura 6.6 - Seção mostrando a fissura.

Assim,

$$A_f = \varepsilon_f A_T, \quad (6.2)$$

onde A_f é a área de fissuras, A_T é a área da superfície total e ε_f é a fração aparente de fissuras na seção (= fração volumétrica). A Equação (6.2) fornece o valor de δ , que é a espessura da fissura.

A fração aparente de fissuras ε_f é obtida da micrografia mostrada na Figura 3.4, através de uma imagem binarizada (preto = poro, branco = matriz sólida). Nesta imagem identifica-se as fissuras em torno dos grãos de areia e determina-se a razão entre a área ocupada pelas fissuras e a área total da imagem.

A fissura, no modelo representado na Figura 6.5, é um canal de seção $\delta \mu\text{m}^2$. Adota-se uma profundidade unitária. Nas micrografias mostradas nas Figuras 3.3 à 3.9, observa-se que as fissuras apresentam um diâmetro mínimo de $1 \mu\text{m}$, Tabela 3.2, mostrando que as mesmas não têm uma seção constante, mas apresentam reduções evidenciando a presença de gargantas.

Desse modo para a estimativa da condutividade das fissuras, K_f , supõe-se que as mesmas são canais apresentando uma constrição de seção $1 \mu\text{m}^2$. Supõe-se que a espessura da constrição é igual ao seu diâmetro ($l = d = 1 \mu\text{m}$), Figura 6.7.

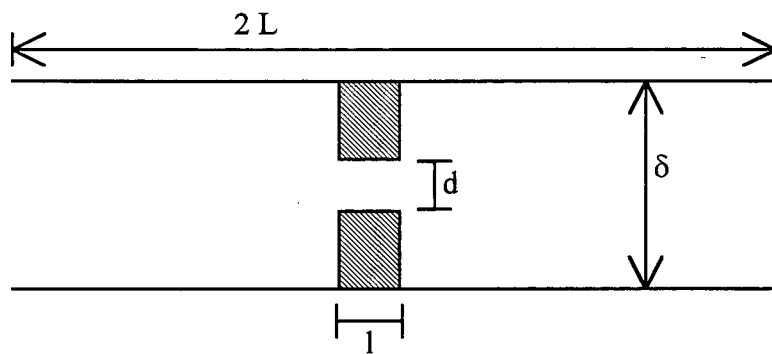


Figura 6.7 - Canal com constrição representando a fissura no modelo.

A vazão em função da queda de pressão para o escoamento laminar num canal [93], é dada pela expressão:

$$m = \rho_l \frac{\delta^3 w}{12\mu} \frac{\Delta p}{L}, \quad (6.3)$$

onde w representa a profundidade e portanto, a condutância é escrita de seguinte forma:

$$k = \frac{\rho_l \delta^3 w}{12\mu L}. \quad (6.4)$$

Segundo a Equação (5.49), a condutância está relacionada com a condutividade hidráulica por fatores geométricos, da seguinte forma,

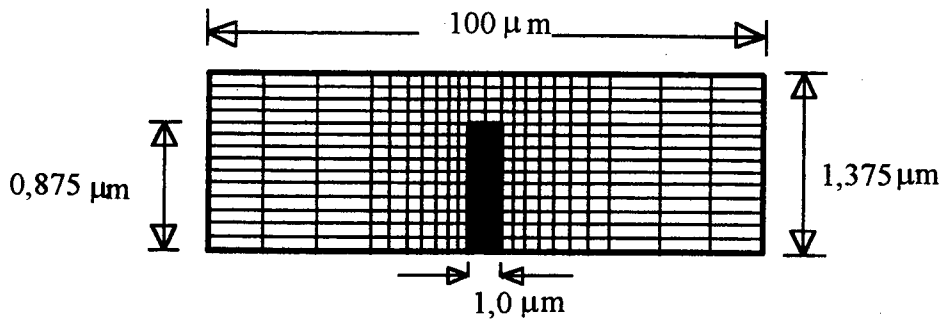
$$K_f = \frac{kgL}{A}, \quad (6.5)$$

onde K_f é a condutividade hidráulica na fissura, A é a seção transversal da fissura e L é o comprimento da fissura e aqui corresponde à dimensão do bloco do material homogêneo, Figura 6.5.

O valor de k obtido pela Equação (6.4), representa a condutância num canal sem constricção.

Utiliza-se o seguinte procedimento no cálculo da condutância num canal com constricção. Calcula-se as perdas de carga, h_{CC} e h_{SC} , para os canais com e sem constricção, respectivamente, através de tabelas e diagramas encontrados na literatura [114], em função das condições e tipo de escoamento, tais como número de Reynolds, regime do escoamento e geometria do canal e da constricção. O valor encontrado para a razão h_{CC}/h_{SC} foi de aproximadamente 2,0. Este é o fator proporcional a ser multiplicado pela condutância, Equação (6.4), para a obtenção da condutância de um canal com constricção.

Obtém-se também este fator numericamente através do programa desenvolvido por Patankar [115]. O programa utiliza a técnica dos volumes finitos e tem as seguintes características: a solução para o acoplamento velocidade/pressão é obtida pelo método *SIMPLE*, o sistema de equações algébricas resultante é resolvido pelo método *TDMA* e uma lei de potência define a função interpolação das velocidades nas interfaces dos volumes de controle [115,123]. Utiliza-se uma malha concentrada próximo à constricção e calcula-se a diferença de pressão para o canal, Figura 6.8, com e sem constricção respectivamente.



L_1 (valor de I para a posição do último ponto nodal em x) = 40

M_1 (valor de J para a posição do último ponto nodal em y) = 16

Figura 6.8 - Domínio de solução.

Um segundo modelo foi elaborado para as fissuras supondo-as dispostas como um colar de poros em série, Figura 6.9.

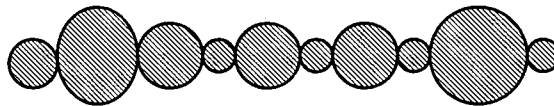


Figura 6.9 - Colar de poros esféricos.

A condutância equivalente, para um dado comprimento de fissura, é dado pela seguinte expressão:

$$\frac{1}{k_{eq}} = \sum \left(\frac{1}{k_i} \right), \quad (6.6)$$

onde k_i é a condutância da cada poro, cheio de líquido, constituinte das fissuras e é dada pela expressão, Equação (5.26):



$$k_i = \frac{1}{2} \frac{\rho_i \pi D_i^4}{128 \mu} \frac{\pi}{2 D_i}, \quad (6.7)$$

e desse modo

$$\frac{1}{k_{eq}} = \sum \left(\frac{512 \mu}{\rho_i \pi D_i^3} \right), \quad (6.8)$$

onde D_i é o diâmetro do poro i .

Os diâmetros dos poros pertencentes às fissuras estão na faixa entre 10000 à 110000 Å, segundo análise das micrografias da argamassa de cimento e cal analisada, Tabela 3.2. Para o cálculo de k_{eq} , Equação (6.8), divide-se estes diâmetros em 11 classes, obedecendo-se à proporção volumétrica de cada classe, e assim:

$$\frac{1}{k_{eq}} = \sum_{i=1}^{11} n_i \left(\frac{512 \mu}{\rho_i \pi D_i^3} \right), \quad (6.9)$$

onde n_i representa a frequência em número de cada classe.

Segundo à Equação (5.49), a condutância equivalente está relacionada à condutividade hidráulica por fatores geométricos, da seguinte forma,

$$K_{colar} = \frac{k_{eq} g L}{A}, \quad (6.10)$$

onde K_{colar} é a condutividade hidráulica do colar construído com os poros que formam as fissuras em série, A é a seção transversal da fissura e L é o comprimento da fissura.

Tendo calculado K_{colar} , a condutividade hidráulica para um dado comprimento de fissura, pode ser estimada pela relação:

$$K_f \cdot \delta \cdot l = K_{colar} \cdot \varepsilon_f \cdot L \cdot l. \quad (6.11)$$

onde δ representa a espessura da fissura, ϵ_f representa a fração aparente de fissuras na seção e L corresponde à dimensão de um bloco de material homogêneo ou grão de areia, Figura 6.5.

6.2.3 - Equações governantes

O problema consiste em estudar a transferência hídrica sobre um domínio plano bidimensional munido de uma fissura de geometria conhecida. A fissura é considerada como um canal de seção ($\delta \mu\text{m}^2$) conhecida, onde se desloca um menisco. A posição do menisco na fissura é definida por $X(t)$. A condutividade hidráulica da fissura na saturação, K_f , e a pressão capilar no menisco, p_m , são conhecidas. O meio homogêneo em volta da fissura tem características hidrodinâmicas conhecidas, como a pressão capilar, $p_c(\theta)$, a condutividade hidráulica, $K(p_c)$, sendo θ o teor volumétrico em líquido.

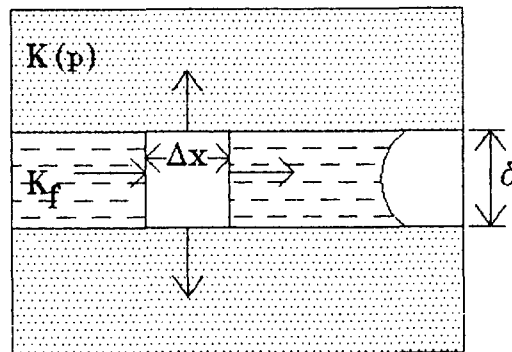


Figura 6.10 - Esquema do volume de controle para o balanço de massa na fissura.

Fazendo-se um balanço de massa na fissura, Figura (6.10), obtém-se:

$$\left[-\rho_l K_f \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_x \cdot \delta \cdot 1 \right] - \left[-\rho_l K_f \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_{x+\Delta x} \cdot \delta \cdot 1 \right] = \left[-\rho_l K(p_c) \left(\frac{\partial p}{\partial z} \right)_{z=0} \cdot \Delta x \cdot 1 \right] \quad (6.12)$$

Desse modo, para $z=0$ e $x < X(t)$,

$$K_f \left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right) + \frac{K(p)}{\delta} \left(\frac{\partial p}{\partial z} \right) = 0. \quad (6.13)$$

Para $z=0$ e $x > X(t)$,

$$p = p_\infty, \quad (6.14)$$

onde p_∞ é o potencial (m de coluna d'água) correspondente à condição inicial da amostra (função apenas da umidade relativa).

Para $z = 0$ e $x = X(t)$,

$$p = p_{cm} = p_m, \quad (6.15)$$

sendo $p_m = -\frac{2\sigma}{\delta}$.

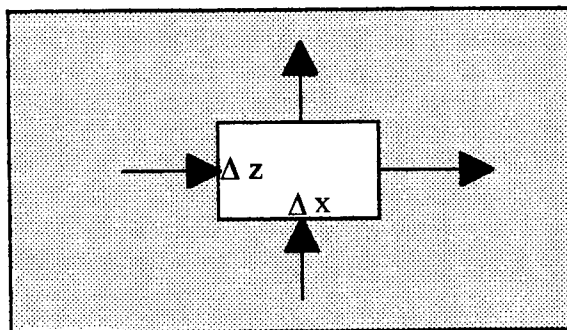


Figura 6.11 - Esquema do volume de controle para o balanço de massa nos blocos.

No interior dos blocos, Figura (6.11), o balanço de massa resulta em:

$$(q_x) \cdot \Delta z \cdot 1 - (q_{x+\Delta x}) \cdot \Delta z \cdot 1 + (q_z) \cdot \Delta x \cdot 1 - (q_{z+\Delta z}) \cdot \Delta x \cdot 1 = \frac{\partial \theta}{\partial t} \cdot \Delta x \cdot \Delta z \cdot 1. \quad (6.16)$$

Desse modo, para $z > 0$ e $\forall x$,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K(p) \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K(p) \frac{\partial p}{\partial z} \right) = \frac{\partial \theta}{\partial t}, \quad (6.17)$$

mas,

$$\theta = \theta(p), \quad (6.18)$$

é uma função conhecida de p , sobre a curva de embebição. Isto permite explicitar a equação acima em termos da pressão p .

Ainda, a condição de simetria, para $z = L/2$ e $\forall x$,

$$\frac{\partial p}{\partial z} = 0, \quad (6.19)$$

e para $x = 0$ e $\forall z$,

$$p = p_0, \quad (6.20)$$

sendo p_0 o potencial correspondente à condição de injeção do líquido na amostra.

A seguir discute-se o problema na bifurcação. Caso não houvesse migração para o interior dos blocos, da Equação (6.13):

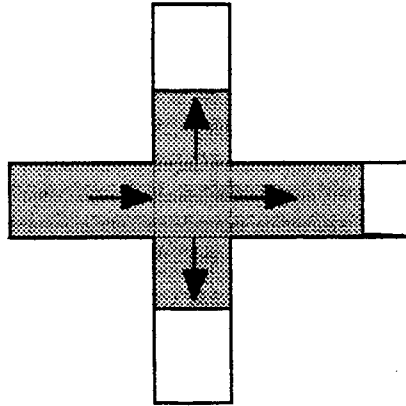


Figura 6.12 - Esquema do volume de controle para o balanço de massa na bifurcação.

$$K_f \left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right) = 0, \quad (6.21)$$

sujeita as seguintes condições de contorno:

para $x = 0$,

$$p = p_o, \quad (6.22)$$

e para $x = X(t)$,

$$p = p_m. \quad (6.23)$$

A solução da Equação (6.21) é, então:

$$p(x) = p_o + \frac{(p_m - p_o)}{X(t)} x, \quad (6.24)$$

e $X(t)$, a posição do menisco, poderia ser obtido de :

$$-\frac{K_f}{g} \frac{\partial p}{\partial x} = \rho_l \frac{dX}{dt} \quad (\text{Lei de Darcy}) \quad (6.25)$$

Da Equação (6.24) obtém-se:

$$-\frac{K_f}{g} \frac{p_o - p_m}{X(t)} = \rho_l \frac{dX}{dt}, \quad (6.26)$$

e após integração tem-se:

$$X(t) = \sqrt{\frac{2K_f}{g\rho_l} (p_o - p_m)t}. \quad (6.27)$$

Para o presente caso, há migração para o interior dos blocos e desse modo, para cada x,

$$-\frac{K_f}{g} \frac{\partial p}{\partial x} = \rho_l \frac{dX}{dt} \quad (\text{Lei de Darcy}) \quad (6.25)$$

mas,

$$\frac{\partial p}{\partial x} \neq \frac{p_o - p_m}{X(t)}, \quad (6.28)$$

em função do processo de difusão para o interior dos blocos.

As equações acima são resolvidas numericamente. A solução conduz ao valor médio da pressão capilar, p , expressa em metros de coluna d'água.

O processo de transferência é afetado pelas seguintes características: a geometria da fissura; a condutividade hidráulica equivalente, K_f , da fissura; a pressão capilar na origem, p_o ; a seção e a densidade de fissuração.

A fim de restringir o número de simulações numéricas limita-se a estudar a sensibilidade da resposta ao valor do tamanho da amostra e ao valor de K_f .

Uma questão importante na resolução das equações é a determinação da frente capilar dentro da fissura e o passo de tempo correspondente. Esta questão é discutida na seção seguinte.

6.3 - Esquema numérico

6.3.1 - O domínio de cálculo

Por razões de tempo de cálculo e espaço de memória no computador, faz-se um cálculo bidimensional baseado no método de diferenças finitas no lugar de um cálculo tridimensional como é feito nas simulações mostradas no capítulos anteriores deste trabalho.

Como o sistema é simétrico utiliza-se somente parte do esquema físico. O domínio de cálculo que resulta é um retângulo com fissuras espaçadas regularmente, Figura 6.13.

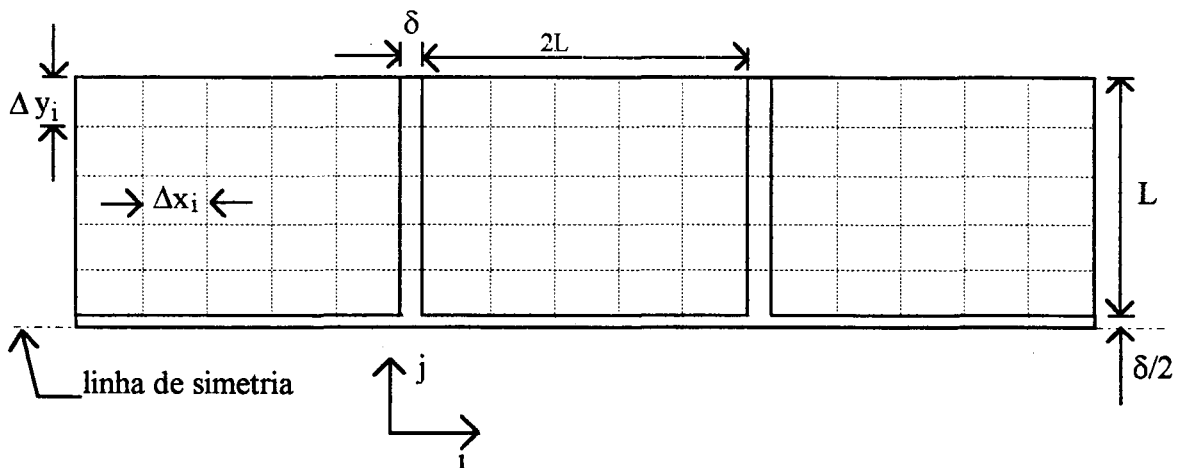


Figura 6.13 - Esquema do domínio de cálculo.

Tem-se um potencial de pressão constante na face de entrada, as duas faces laterais estão sujeitas à condição de simetria (condição de fluxo nulo) e a face de saída, considerando-se um

elemento muito longo em relação a largura, sujeita à condição inicial. O traçado da fissura determina uma grade principal que é dividida por grades menores.

6.3.2 - Discretização espacial

O domínio é dividido por uma malha principal que acompanha o traçado da fissuração. Esta malha é retangular de dimensão $2L \times L$, onde L é o lado do bloco. A malha principal é sub dividida em uma malha mais refinada. Dentro da malha final pode-se distinguir as sub divisões pertencentes às fissuras ou pertencentes aos blocos.

Nos blocos, as sub divisões são dadas por:

$$\Delta x_i = \frac{2L}{NVI}, \quad (6.29)$$

e

$$\Delta y_i = \frac{L}{NVJ}, \quad (6.30)$$

onde NVI é o número de volumes elementares em x para cada bloco e NVJ é o número de volumes elementares em y na malha final sem considerar a fissura.

Na fissura,

$$\begin{aligned} \Delta x_i &= \delta, \\ \Delta y_i &= \frac{L}{NVJ}, \end{aligned} \quad (6.31)$$

na parte vertical e,

$$\begin{aligned} \Delta x_i &= \frac{2L}{NVI}, \\ \Delta y_i &= \frac{\delta}{2}, \end{aligned} \quad (6.32)$$

na parte horizontal.

Utiliza-se o modelo de Patankar, Prática B [115], para a locação das faces dos volumes de controle. Os pontos nodais são colocados no centro dos volumes de controle. No contorno, os pontos nodais estão sobre as faces dos volumes de controle vizinhos, Figura 6.14.

Deve-se também distinguir os pontos nodais pertencentes aos blocos e os pontos nodais pertencentes às fissuras.

A cada ponto nodal corresponde um volume elementar $Vol(i,j)$.

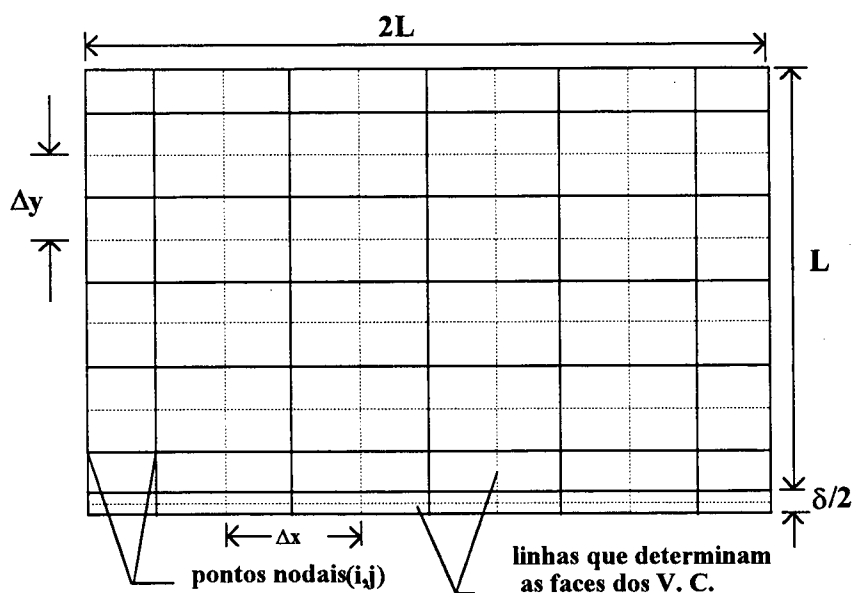


Figura 6.14 - Locações das faces dos volumes de controle, mostrando o contorno.

6.3 - Balanço local

Considere um ponto nodal (i,j) , Figura 6.15. Fazendo-se um balanço de massa local entre os instantes de tempo t e $t+\Delta t$, tem-se para os blocos:

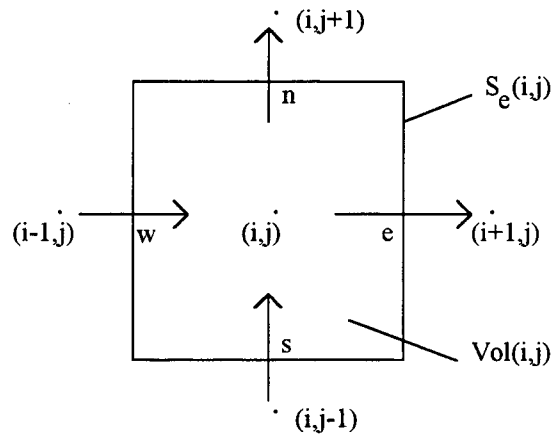


Figura 6.15- Volume de controle elementar e as seções de fluxo.

$$\begin{aligned}
 & -K_w^t(p)S_w \frac{p_{i,j}^{t+\Delta t} - p_{i-1,j}^{t+\Delta t}}{\Delta l_i} - K_s^t(p)S_s \frac{p_{i,j}^{t+\Delta t} - p_{i,j-1}^{t+\Delta t}}{\Delta l_j} - \left(-K_e^t(p)S_e \frac{p_{i+1,j}^{t+\Delta t} - p_{i,j}^{t+\Delta t}}{\Delta l_i} \right) \\
 & - \left(-K_n^t(p)S_n \frac{p_{i,j+1}^{t+\Delta t} - p_{i,j}^{t+\Delta t}}{\Delta l_j} \right) = \frac{\theta_{i,j}^{t+\Delta t} - \theta_{i,j}^t}{\Delta t} \cdot \text{Vol}(i,j),
 \end{aligned} \tag{6.33}$$

onde $K_w(p)$, $K_s(p)$, $K_e(p)$, e $K_n(p)$ são as condutividades hidráulicas nas interfaces dos volumes de controle; θ é o teor em água; p é a pressão capilar em metros de coluna d'água(mca); Δl_i e Δl_j representam a distância entre dois pontos nodais vizinhos em x e em y , respectivamente e são função da posição do ponto nodal na malha; e S_w , S_s , S_e , e S_n representam as seções de fluxo. Estas seções são calculadas para cada ponto nodal em função da sua posição na grade. A expressão acima representa um esquema totalmente implícito com a determinação explícita das condutividades internodais. Uma vez que $\theta = \theta(p)$, tem-se:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial \theta}{\partial p} \cdot \frac{\partial p}{\partial t}, \tag{6.34}$$

e assim o segundo membro da equação de balanço pode ser escrita sob a seguinte forma discretizada:

$$\frac{\theta_{i,j}^{t+\Delta t} - \theta_{i,j}^t}{\Delta t} \cdot \text{Vol}(i, j) = \left(\frac{\partial \theta}{\partial p} \right)_{i,j}^t \frac{p_{i,j}^{t+\Delta t} - p_{i,j}^t}{\Delta t} \text{Vol}(i, j), \quad (6.35)$$

onde a parcela $\left(\frac{\partial \theta}{\partial p} \right)_{i,j}^t$ é calculada da curva de embebição.

Isto fornece uma equação para o ponto nodal sob a seguinte forma:

$$\begin{aligned} & -\frac{K_w^t(p)S_w}{\Delta l_i} p_{i,j}^{t+\Delta t} - \frac{K_s^t(p)S_s}{\Delta l_j} p_{i,j}^{t+\Delta t} - \frac{K_e^t(p)S_e}{\Delta l_i} p_{i,j}^{t+\Delta t} - \frac{K_n^t(p)S_n}{\Delta l_j} p_{i,j}^{t+\Delta t} \\ & + \frac{K_w^t(p)S_w}{\Delta l_i} p_{i-1,j}^{t+\Delta t} + \frac{K_s^t(p)S_s}{\Delta l_j} p_{i,j-1}^{t+\Delta t} + \frac{K_e^t(p)S_e}{\Delta l_i} p_{i+1,j}^{t+\Delta t} + \frac{K_n^t(p)S_n}{\Delta l_j} p_{i,j+1}^{t+\Delta t} \\ & = \frac{1}{\Delta t} \left[\left(\frac{\partial \theta}{\partial p} \right)_{i,j}^t \cdot \text{Vol}(i, j) \cdot p_{i,j}^{t+\Delta t} - \left(\frac{\partial \theta}{\partial p} \right)_{i,j}^t \cdot \text{Vol}(i, j) \cdot p_{i,j}^t \right], \end{aligned} \quad (6.36)$$

ou,

$$A_p^t p_{i,j}^{t+\Delta t} = A_w^t p_{i-1,j}^{t+\Delta t} + A_e^t p_{i+1,j}^{t+\Delta t} + A_s^t p_{i,j-1}^{t+\Delta t} + A_n^t p_{i,j+1}^{t+\Delta t} + b, \quad (6.37)$$

com,

$$A_w^t = \frac{K_w^t(p)S_w}{\Delta l_i}, \quad (6.38)$$

$$A_s^t = \frac{K_s^t(p)S_s}{\Delta l_j}, \quad (6.39)$$

$$A_n^t = \frac{K_n^t(p)S_n}{\Delta l_j}, \quad (6.40)$$

$$A_e^t = \frac{K_e^t(p)S_e}{\Delta l_i}, \quad (6.41)$$

$$A_p^t = A_w^t + A_e^t + A_s^t + A_n^t + A_{p_o}^t, \quad (6.42)$$

$$A_{p_o}^t = \left(\frac{\partial \theta}{\partial p} \right)_{i,j}^t \cdot \frac{\text{Vol}(i, j)}{\Delta t}, \quad (6.43)$$

$$b = A_{p_o}^t \cdot p_{i,j}^t. \quad (6.44)$$

Se o ponto nodal pertence à fissura, a equação discretizada é idêntica com $A_{p_o}^t = 0$. O número de equações depende da dimensão do modelo adotada. Define-se NPM como número de blocos (material homogêneo + grãos de areia) na malha, e que representa, desta forma, o tamanho da amostra. Assim, tem-se um sistema de $NPM \times NVJ$ equações que são resolvidas a cada passo de tempo, observando-se as condições de contorno.

Se o ponto nodal pertence às fronteiras da linha simétrica, considera-se que o fluxo, sobre o lado do volume de controle ao longo da fronteira, é nulo. Nos pontos onde se considera que a pressão é constante a equação resulta em:

$$p_{i,j}^{t+\Delta t} = p_o \quad (6.45)$$

6.3.4 - As condutividades internodais

Nas Equações (6.33) à (6.44) a condutividade K_w representa o valor de K pertencente à face w do volume de controle; similarmente, K_s refere-se à interface s , K_n refere-se à interface n e K_e à interface e .

Utiliza-se a média harmônica [115] na obtenção das condutividades nas interfaces. A média harmônica é demonstrada por Patankar [115] como uma forma efetiva na determinação das condutividades interfaciais. Considere dois nós vizinhos (i,j) e $(i+1,j)$,

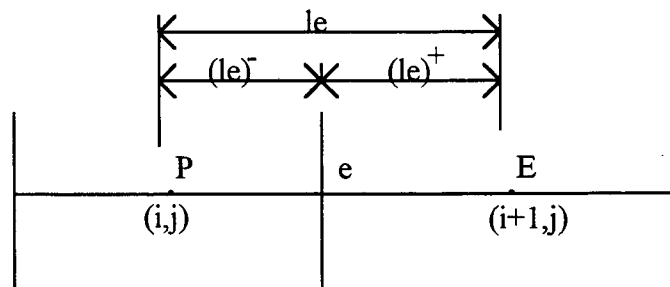


Figura 6.16 - Esquema da distância entre os pontos nodais.

a condutividade na interface é dada por:

$$K_e = \frac{l_e}{\frac{(l_e)^-}{K_{i,j}} + \frac{(l_e)^+}{K_{i+1,j}}}, \quad (6.46)$$

e de forma similar obtém-se K_e , K_s e K_n .

6.3.5 - As curvas características

Em relação ao meio homogêneo (os blocos) as curvas características correspondem às curvas simuladas dentro do capítulo 4, no que se refere à curva $p(\theta)$ e dentro do capítulo 5, no que se refere à curva da condutividade hidráulica $K(p)$.

Quando o menisco capilar avança dentro da fissura, ele define uma zona onde a condutividade é descontínua: a condutividade equivalente da fissura, K_f , dentro da região saturada e a condutividade correspondente à difusão de vapor na região após o menisco. A fissura está saturada na região anterior ao menisco, $\theta = 1$, e está praticamente seca na região após o menisco, $\theta \approx 0$.

6.4 - Metodologia de cálculo

6.4.1 - Metodologia usada

Uma das questões importantes na solução do sistema de equações é como acoplar as Equações (6.12), (6.17) e (6.25), e determinar a posição da frente capilar dentro da fissura. O procedimento de cálculo adotado é descrito a seguir.

Arbitra-se um incremento de tempo Δt , e calcula-se as pressões nodais na fissura, considerando-a impermeável. Observa-se as seguintes alternativas:

(i) Antes da primeira bifurcação, para $0 < x < X(t)$, valem as Equações (6.21) à (6.24) e quando $x = X(t)$ valem as Equações (6.25) e (6.27).

(ii) Na bifurcação, Figura 6.17, faz-se o seguinte balanço de massa,

$$\frac{K_f}{g} \frac{p_o - p_p}{2L} = 3 \frac{K_f}{g} \frac{p_p - p_m}{X_f(t)}, \quad (6.47)$$

e desse modo a pressão na bifurcação é dada por:

$$p_p = \frac{p_o + \frac{6Lp_m}{X_f(t)}}{1 + \frac{6L}{X_f(t)}}, \quad (6.48)$$

onde $X_f(t)$ é a posição da frente em relação à bifurcação.

Por outro lado para cada ramo da bifurcação, vale a Equação (6.25):

$$\frac{K_f}{g} \frac{p_p - p_m}{X_f} = \rho_l \frac{dX_f(t)}{dt}, \quad (6.49)$$

cuja solução é:

$$X_f(t) = \sqrt{\frac{2K_f(p_p - p_m)t}{\rho_l g}}. \quad (6.50)$$

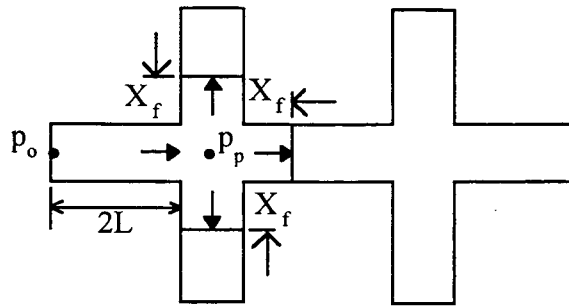


Figura 6.17 - Esquema do balanço de massa na bifurcação.

(iii) Quando t é t_1 e $X_f \geq L$, Figura 6.18, a pressão será a mesma em todos os pontos dos ramos laterais e igual a p_p . Neste caso o balanço de massa é expressado por:

$$\frac{K_f}{g} \frac{p_p - p_m}{2L + X_f(t)} = \rho_l \frac{dX_f(t)}{dt}, \quad (6.51)$$

cuja solução é:

$$X_f(t) = \sqrt{2 \frac{K_f (p_o - p_m) t}{\rho_l g}} - 2L. \quad (6.52)$$

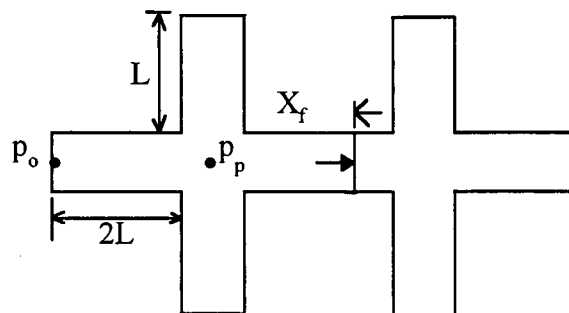


Figura 6.18 - Esquema da posição da frente na fissura impermeável quando $t = t_1$.

Nas bifurcações seguintes, repete-se o procedimento até que $t = t_1$ seja o primeiro intervalo de tempo estipulado. Em seguida calcula-se as pressões nodais nos blocos levando-se em conta as pressões nodais já calculadas nas fissuras, consideradas como impermeáveis. Com as pressões nos blocos recalcula-se as pressões nas fissuras usando a Equação (6.13), aplicando volumes finitos.

Calculadas as pressões nas fissuras, localiza-se a posição da frente, comparando-se as pressões obtidas com o valor de p_m . O procedimento é repetido até que $p = p_m$ (final de invasão). Determinada a nova posição do menisco dentro da fissura, calcula-se todo o campo de pressão na malha, sempre admitindo que a fissura após o menisco, tem condutividade correspondente à difusão do vapor e seu θ é nulo.

6.4.2 - Os casos estudados

Mantém-se a proporção volumétrica de 60% (grãos de areia + alumina) na distribuição dos grãos de areia no modelo, Figura 6.5. Para cada 10 blocos de dimensão $2L \times L$ tem-se então, 6 blocos de areia e faz-se esta distribuição uniformemente, Figuras 6.5 e 6.19.

Nos casos estudados mantém-se a largura do meio ($2L + \delta$), variando-se o valor de NPM que representa o número de blocos de material homogêneo e grãos de areia de dimensão $2L \times L$ cada um, Figura 6.19. Estuda-se os seguintes casos:

(i) caso "A": $L = 50 \mu\text{m}$

$$\delta = 2,75 \mu\text{m}$$

$$\text{NPM} = 100$$

$$\text{NVI} = 5$$

$$\text{NVJ} = 5$$

(ii) caso "B" $L = 50 \mu\text{m}$

$$\delta = 2,75 \mu\text{m}$$

$$\text{NPM} = 150$$

$$\text{NVI} = 5$$

$$\text{NVJ} = 5$$

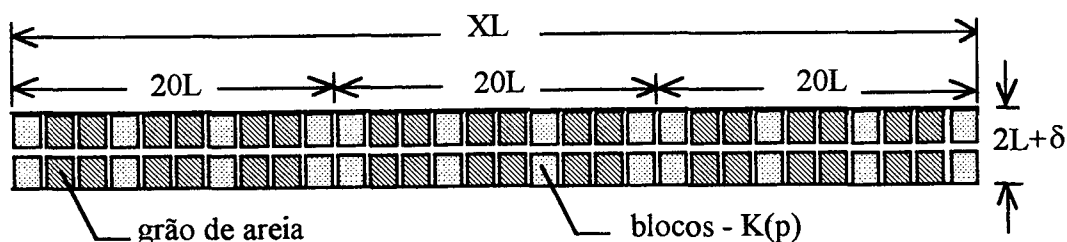


Figura 6.19 - Esquema do domínio de cálculo mostrando a distribuição de fissuras.

Estuda-se o processo de embebição transitório dentro de um domínio bidimensional de comprimento XL , determinado em função de NPM conforme Figura 6.19, e de espessura $2L + \delta$.

Apresenta-se os dados experimentais que servem de referência para a análise dos coeficientes de transferência, calculados pela simulação sobre a modelagem com fissuras. Estes dados são tirados do trabalho de Fernandes, C. P.; Philippi, P. C. e Da Cunha, J. A. B, [119].

6.5 - Resultados. Comparação com os dados experimentais

Para se obter a comparação entre os dados simulados e os dados experimentais calcula-se os coeficientes de transferência D_{θ}^* , em função dos perfis hídricos médios, pela Equação (6.53).

* Na literatura são apresentados vários métodos experimentais para a determinação dos coeficientes de transporte em meios porosos [109,116,117,118,119]. Alguns destes métodos são diretos e destrutivos como no caso da análise de solos onde há a interferência com o fluxo de líquido, não sendo aplicáveis a materiais rígidos tais como rochas, cerâmicas e materiais de edificações.

$$D_{\theta}(\theta) = -\frac{1}{2 \frac{d\theta}{d\eta}} \int_{\theta_i}^{\theta} \eta d\theta. \quad (6.53)$$

A Equação (6.53) acima representa a solução da equação de difusão não linear [110,111],

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D_{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) = \frac{\partial \theta}{\partial t}, \quad (6.54)$$

sujeita às condições :

$$\theta = \theta_0, \quad x > 0, \quad t = 0 \quad (6.55)$$

$$\theta = \theta_1, \quad x = 0, \quad t > 0 \quad (6.56)$$

onde $\theta = \theta(x,t)$, utilizando-se a transformação de Boltzmann,

$$\eta = \frac{x}{\sqrt{t}}, \quad (6.57)$$

Conhecendo-se a função $\theta(\eta)$ pode-se calcular o coeficiente $D_{\theta}(\theta)$, a partir do perfil $\theta(\eta)$, pela Equação (6.53).

Os perfis de saturação médios são calculados tomando a média do conteúdo de umidade numa região equivalente à 10 blocos de dimensão $2L \times L$ e aplicando este valor médio no centro

Gummerson et alii [116] usam uma técnica de ressonância magnética nuclear (NMR) para monitorar a dinâmica da distribuição do conteúdo de umidade no interior de vários materiais porosos inorgânicos durante o fenômeno de capilaridade.

Fernandes et alii [119] utilizando o método de infiltração horizontal baseado em Bruce e Klute [120] apresentam resultados experimentais associados ao processo de embebição, sob forma de perfis de teor em água. É utilizado o método da sonda térmica e de atenuação de raios gama para a determinação dos perfis de conteúdo de umidade. Daian [109] utiliza o mesmo método e usa somente raios gama na determinação dos perfis.

da região, o que transforma o domínio bidimensional em um domínio unidimensional. O total de 10 blocos de dimensão $2L \times L$ constitui a célula unitária do modelo considerando-se a proporção dos grãos de areia (na verdade grãos de areia + alumina) de 60%.

O processo de transferência é afetado pelas seguintes características: a geometria da fissura, a condutividade equivalente, K_f , a pressão capilar na origem, p_0 , a seção e a densidade de fissuração. Restringe-se o número de simulações numéricas, limitando-se ao estudo da sensibilidade do processo de embebição em relação ao valor da condutividade equivalente K_f e tamanho da amostra.

O processo de embebição está associado às seguintes condições iniciais e de contorno:

$$\begin{aligned}
 t < 0 & \quad p(i,j) = -138,95 \text{ mca} \quad \forall i,j \\
 t \geq 0 & \quad p(0,j) = -0,1 \text{ mca}, \quad \forall j \\
 & \quad p(XL,j) = -138,95 \text{ mca}, \quad \forall j
 \end{aligned} \tag{6.58}$$

A condição de pressão inicial, $p = -138,95$ mca, corresponde à situação de um meio poroso sujeito a uma umidade relativa de 99%. Da curva de embebição, Figura 4.6, isto corresponde a uma saturação inicial de 9,7%.

Para facilitar a apresentação dos resultados, a partir das saturações calculadas em todos os pontos da malha, define-se uma saturação média, calculada dentro de uma célula unitária correspondente à dimensão de $20L \times L$ (10 blocos = 40% de material homogêneo + 60 % de grãos de areia e alumina), Figura 6.19.

Os intervalos de tempo foram obtidos a partir do instante final de simulação calculado na condição de fissura impermeável, Equação (6.27).

Nas figuras que se seguem apresenta-se 9 instantes de simulação. Os instantes t_1 e t_2 correspondem, respectivamente, a um intervalo de tempo, Δt_1 , e a um intervalo de tempo, Δt_2 , e representam uma posição da frente de molhamento ainda dentro da primeira célula unitária. Para

$t = 0$ todo o modelo está na saturação inicial de 9,7%. Os instantes restantes t_3, t_4, \dots, t_9 representam intervalos de tempo sucessivos a cada 10 incrementos de Δt . Estes instantes são mantidos em todas as simulações.

Nas Figuras 6.20 até 6.25 mostra-se os perfis do teor em água (conteúdo de umidade) em vários intervalos de tempo de simulação.

Cada figura mostra a influência da condutividade K_f para uma dada dimensão do modelo. Constata-se que a velocidade de progressão da frente de molhamento aumenta com a condutividade da fissura K_f , Figuras 6.20 à 6.25. Observa-se pelas Figuras 6.20 à 6.25 que atrás da frente de molhamento, depois de um certo intervalo de tempo, todo o meio está saturado.

Nas Figuras 6.26, 6.27, 6.28 mostra-se os perfis hídricos em função da transformada de Boltzmann para $NPM = 100$.

Na Figura 6.27 (b) mostra-se uma ampliação da Figura 6.27 (a) mostrando a evolução dos perfis numa pequena parte do domínio de saturação. A figura mostra a tendência à estabilização dos perfis hídricos em função do tempo.

Nas Figuras 6.29, 6.30 e 6.31 mostra-se os perfis hídricos em função da transformada de Boltzmann para $NPM = 150$. As Figuras 6.29 (b), 6.30(b) e 6.30(b) apresentam uma ampliação das Figuras 6.29(a), 6.30(a) e 6.31(a) respectivamente. Evidencia-se o comportamento dos perfis hídricos em função do tempo numa parte do domínio de saturação mostrando a estabilização dos perfis.

Calcula-se o coeficiente $D_\theta(\theta)$, a partir do perfil $\theta(\eta)$, pela Equação (6.53). Os perfis hídricos em função de η , $\theta(\eta)$, apresentados nas Figuras 6.26 - 6.31, para os casos dados, têm poucos pontos no intervalo onde ocorre maior variação de θ com η .

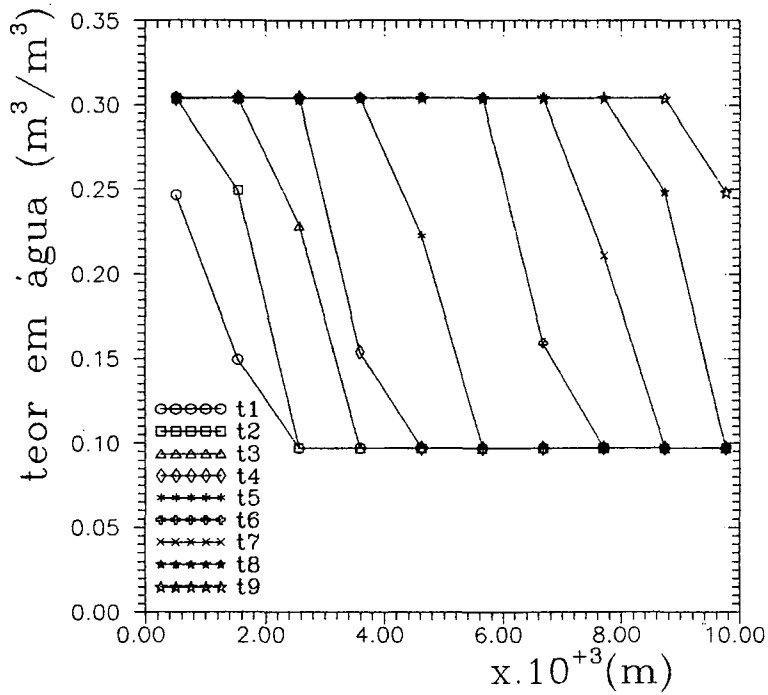


Figura 6.20- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação

$K_f = 7,15 \times 10^{-6} \text{ m/s}$ - Canal. NPM = 100.

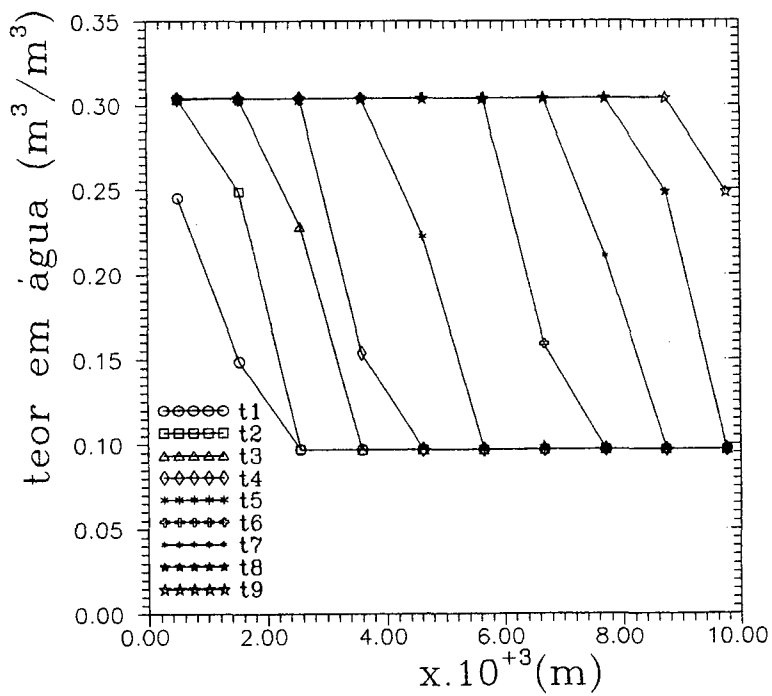


Figura 6.21- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação

$K_f = 3,60 \times 10^{-6} \text{ m/s}$ - Canal com constricção. NPM = 100.

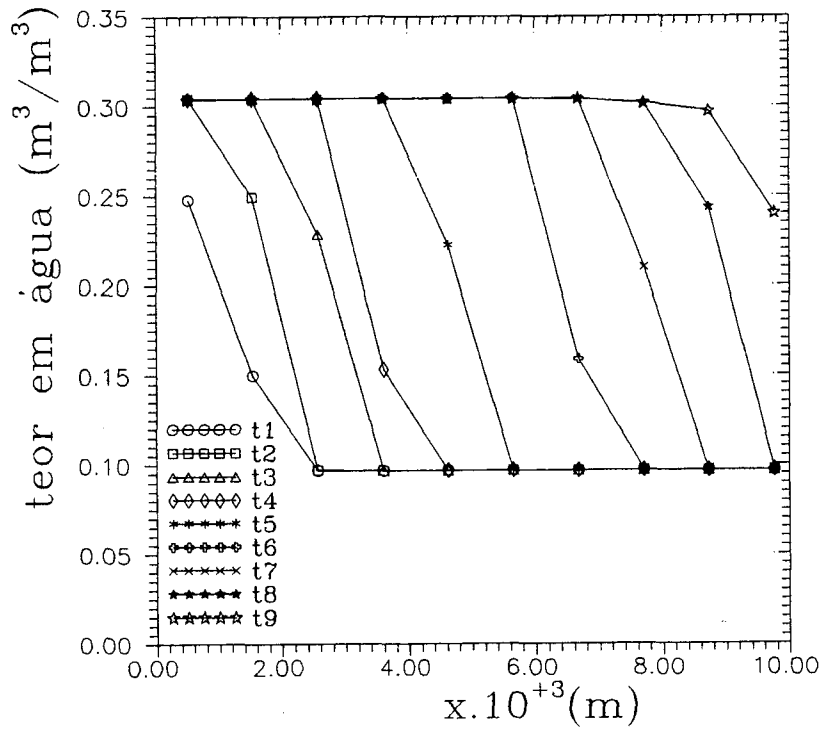


Figura 6.22- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação

$K_f = 4,23 \times 10^{-7}$ m/s - Colar. NPM = 100.

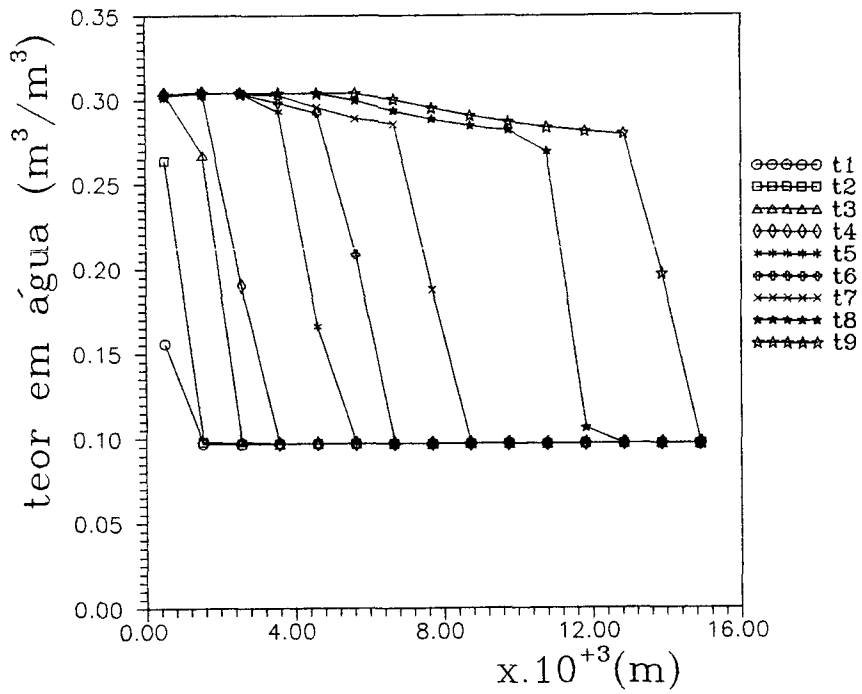


Figura 6.23- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação

$K_f = 7,15 \times 10^{-6}$ m/s - Canal. NPM = 150.

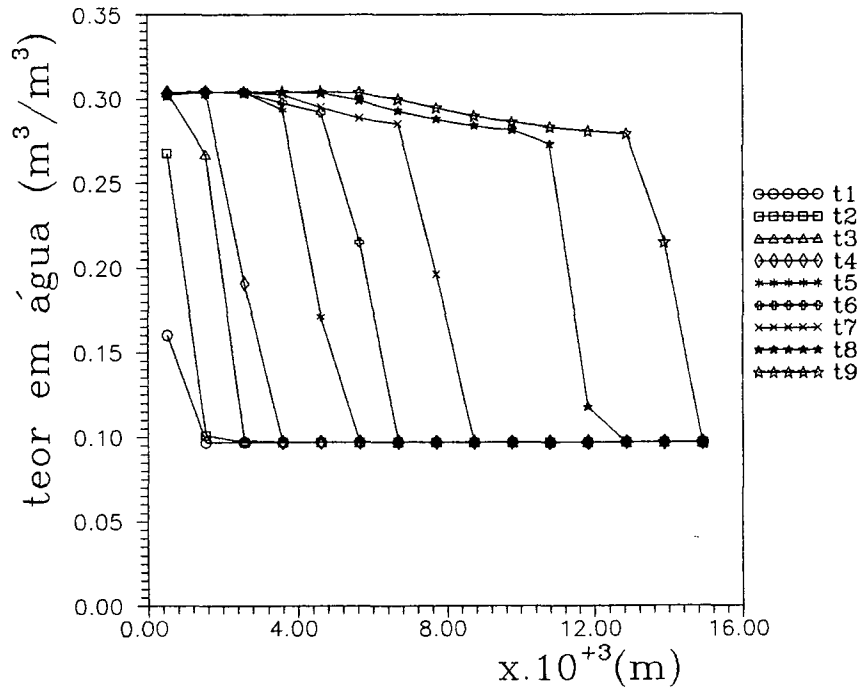


Figura 6.24- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação

$K_f = 3,60 \times 10^{-6} \text{ m/s}$ - Canal com constrição. NPM = 150.

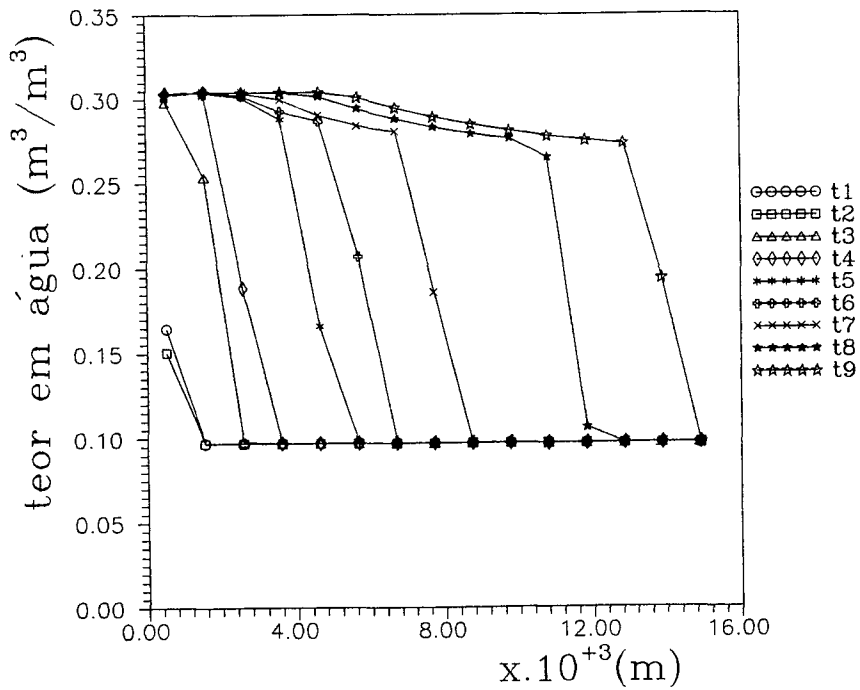


Figura 6.25- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação

$K_f = 4,23 \times 10^{-7} \text{ m/s}$ - Colar. NPM = 150.

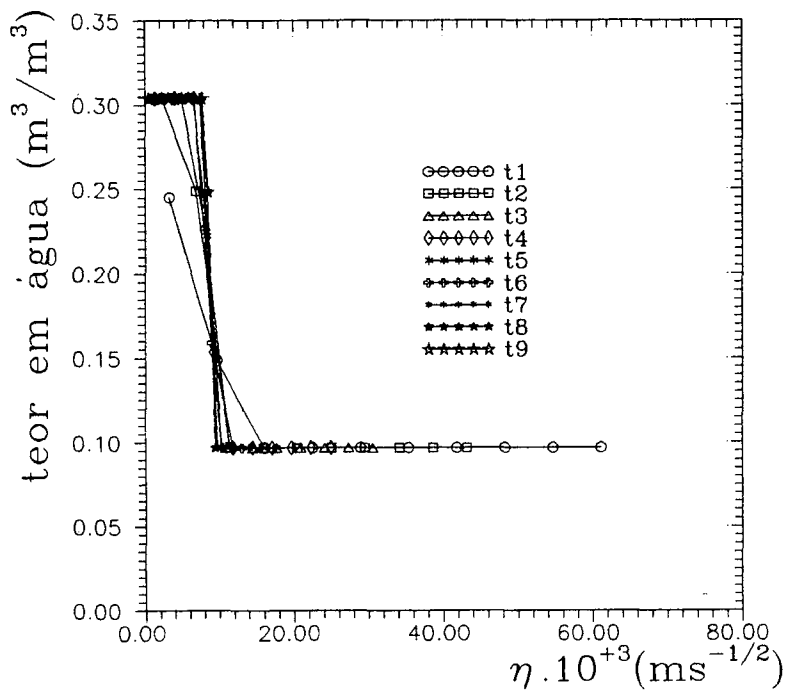
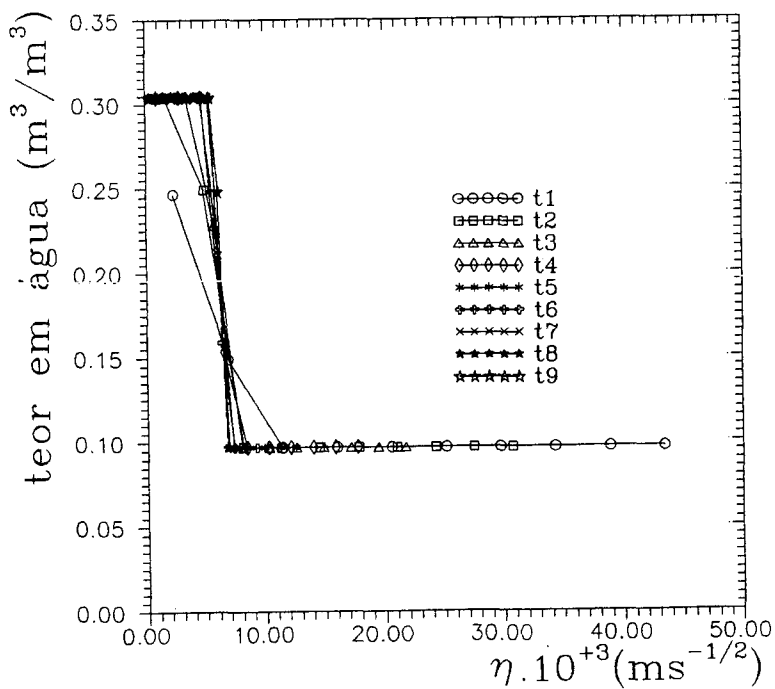


Figura 6.26- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação

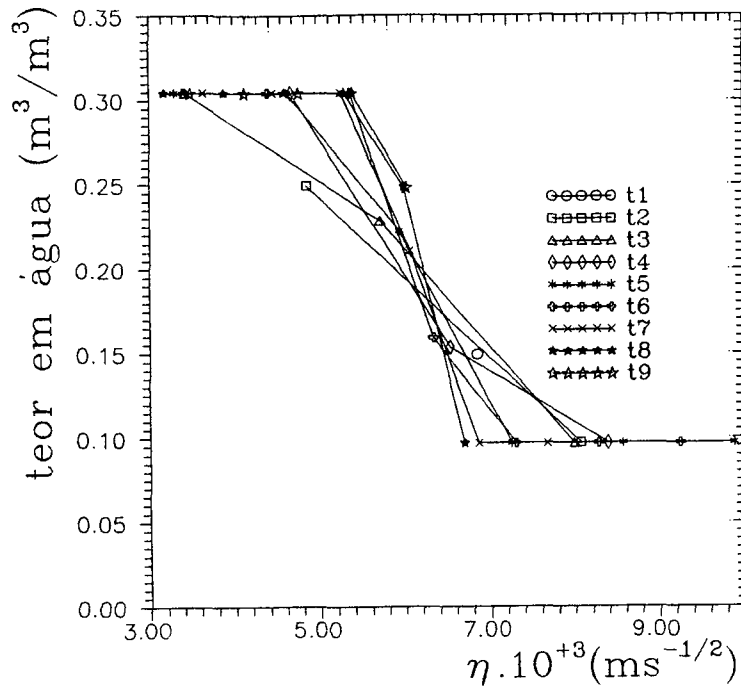
$K_f = 7,15 \times 10^{-6}$ m/s - Canal. NPM = 100.



(a)

Figura 6.27- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação

$K_f = 3,60 \times 10^{-6}$ m/s - Canal com constricção. NPM = 100.



(b)

Figura 6.27- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação

$K_f = 3,60 \times 10^{-6}$ m/s - Canal com constrição. NPM = 100.

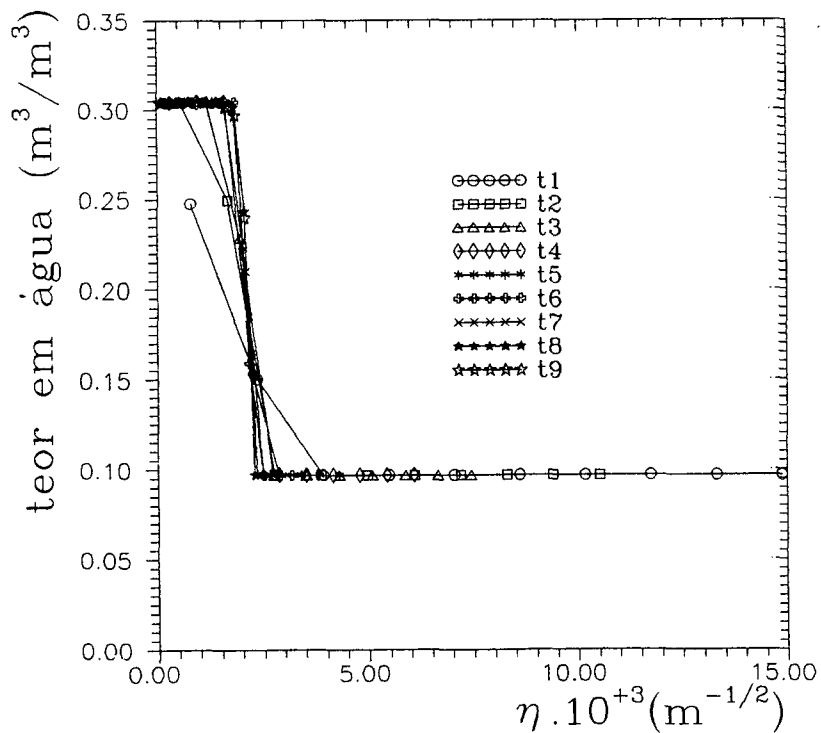


Figura 6.28- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação

$K_f = 4,23 \times 10^{-7}$ m/s - Colar. NPM = 100.

Na Figura 6.32 mostra-se um exemplo do ajuste de uma curva para a obtenção de mais pontos relacionando θ e η . A curva ajustada na Figura 6.32 corresponde à uma curva mostrada na Figura 6.28. O programa de ajuste apresenta as seguintes características: aplica o princípio do método *spline* que ajusta um polinômio de terceiro grau de três em três pontos mantendo a continuidade da função, e apresenta um fator de flexibilidade que permite aproximar a curva aos pontos dados. Quanto maior este fator de flexibilidade maior a aproximação com os pontos dados. No cálculo de $D_{\theta}(\theta)$ utiliza-se somente a parte da curva mais vertical [124].

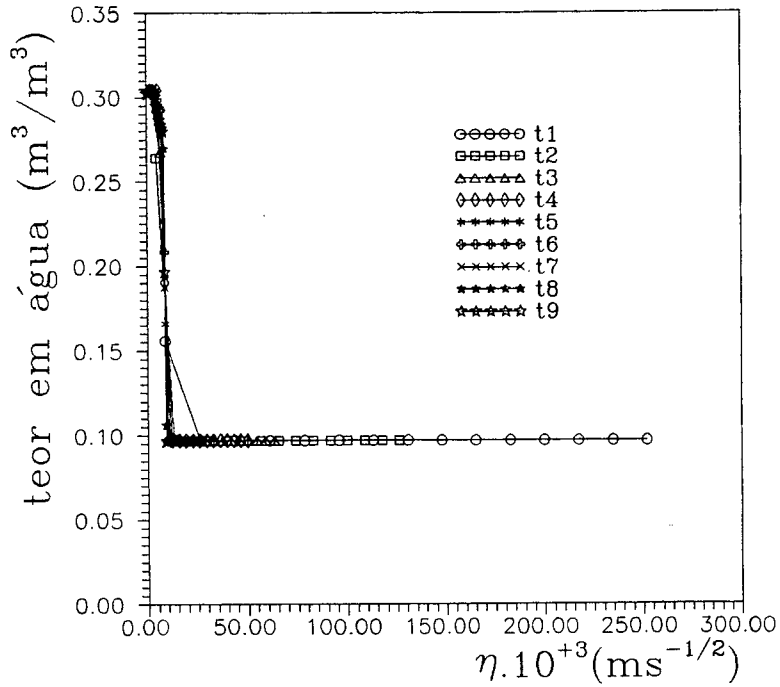
Todas as curvas que definem o perfil $\theta(\eta)$ utilizado na Equação (6.53) para o cálculo de $D_{\theta}(\theta)$, correspondem ao instante de simulação para o qual já ocorre a estabilização do perfil

Na Figura 6.33 mostra-se os coeficientes de transferência de massa simulados e experimentais.

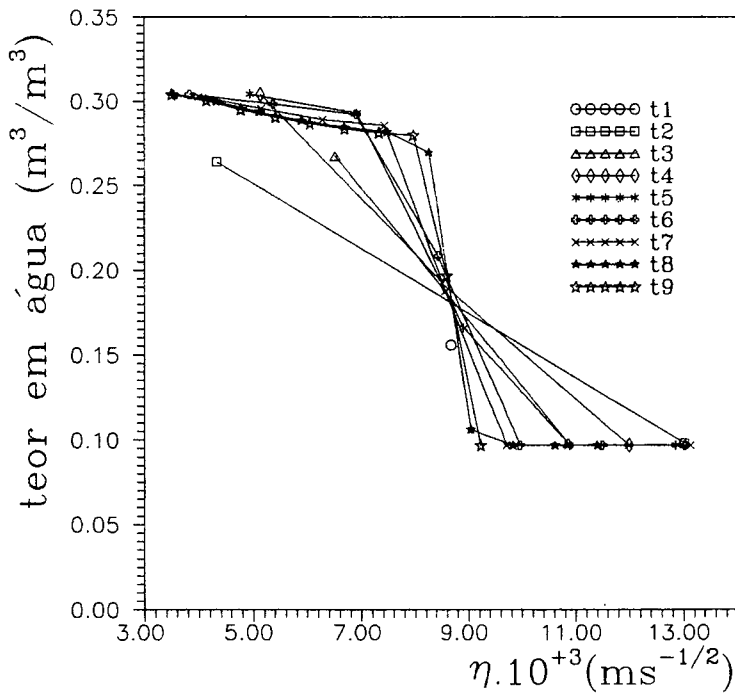
Nas Figuras 6.34, 6.35 e 6.36 mostra-se o comportamento dos coeficientes de transferência de massa simulados, para uma condutividade de fissuração dada, em função do tamanho da amostra. Observa-se uma melhor concordância de D_{θ} com o aumento de NPM na maior parte do domínio de saturação.

Um aumento no tamanho da amostra, NPM, conduziu a valores de $D_{\theta}(\theta)$ mais próximos dos experimentais, a custo todavia de um maior tempo de simulação: 22,5h para NPM = 150 contra 14,48h para NPM = 100, no computador CONVEX -C210 (Tabela 6.1). Nesse sentido, levando-se em consideração os equipamentos computacionais disponíveis, o uso de tamanho de amostra correspondente a NPM = 150 constitui, aparentemente, um limite superior para as simulações.

Na obtenção dos coeficientes de transferência de massa através do modelo de fissuração não se leva em conta simultaneamente todos os parâmetros, tais como a geometria, as condições iniciais e de contorno, a condutividade equivalente das fissuras, que interferem no processo de embebição como no caso da experimentação.



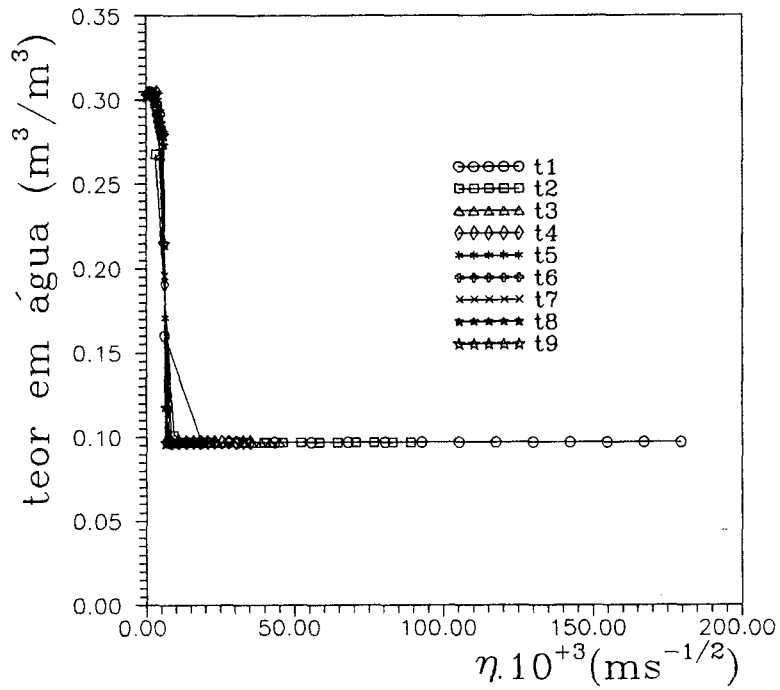
(a)



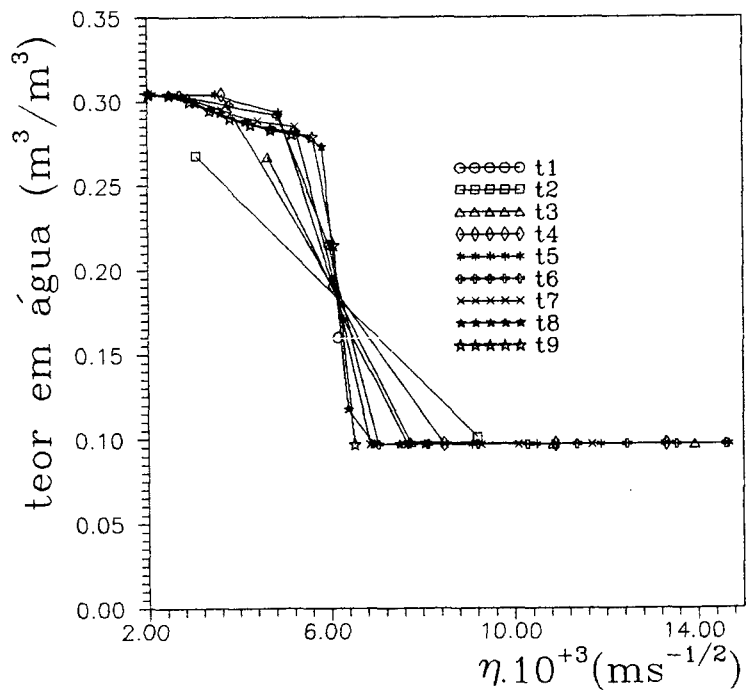
(b)

Figura 6.29- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação

$K_f = 7,15 \times 10^{-6}$ m/s - Canal. NPM = 150. (a) todo o domínio, (b) parte do domínio.



(a)

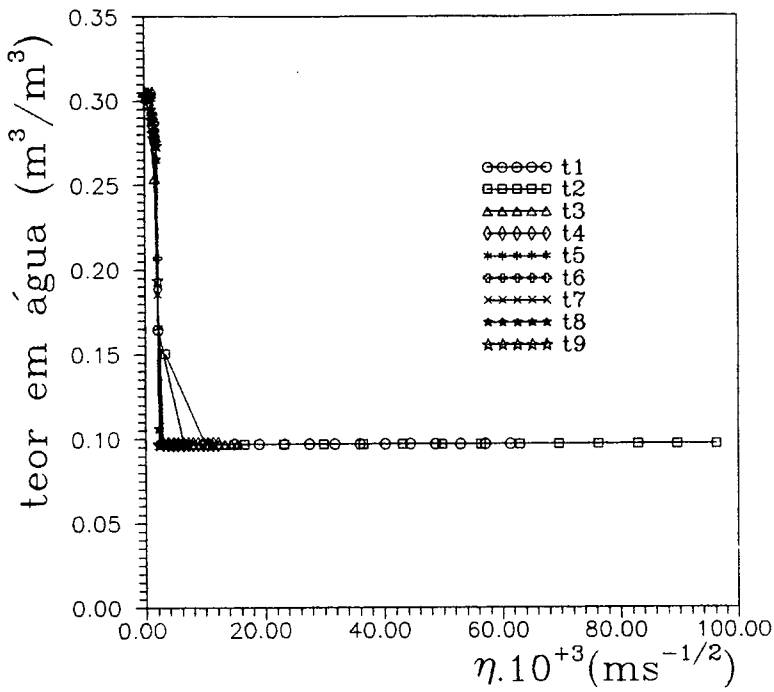


(b)

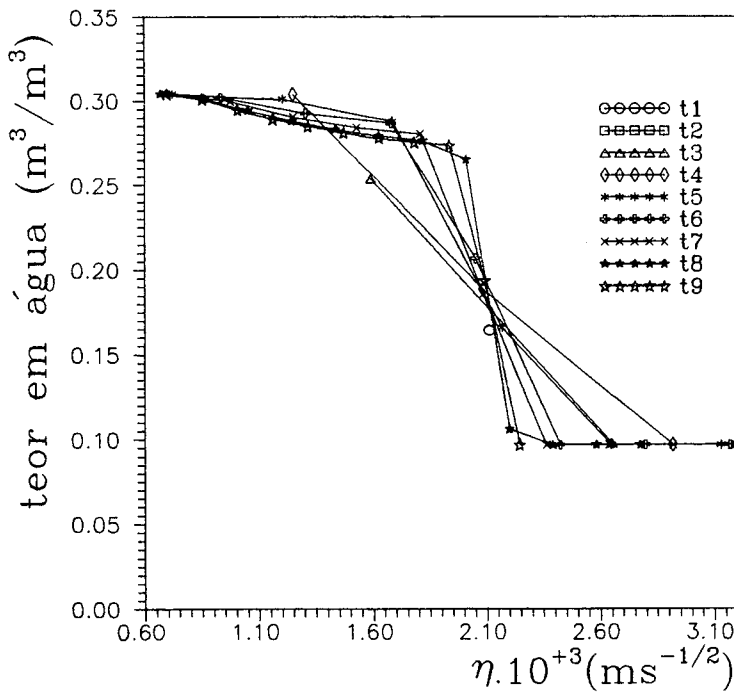
Figura 6.30- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação

$K_f = 3,60 \times 10^{-6}$ m/s - Canal com constricção. NPM = 150.

(a) todo o domínio, (b) parte do domínio.



(a)



(b)

Figura 6.31- Perfis de teor em água em vários instantes de simulação

$K_f = 4,23 \times 10^{-7} \text{ m/s}$ - Colar. NPM = 150. (a) todo o domínio, (b) parte do domínio.

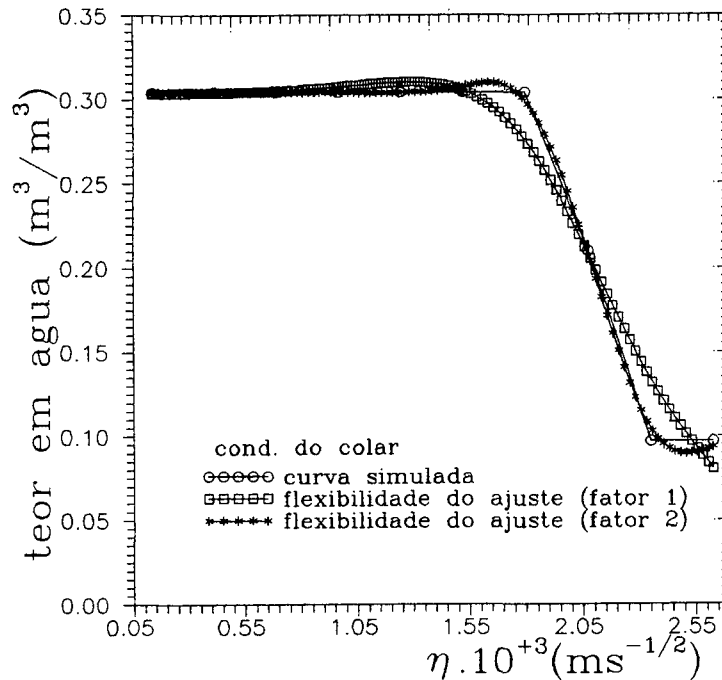
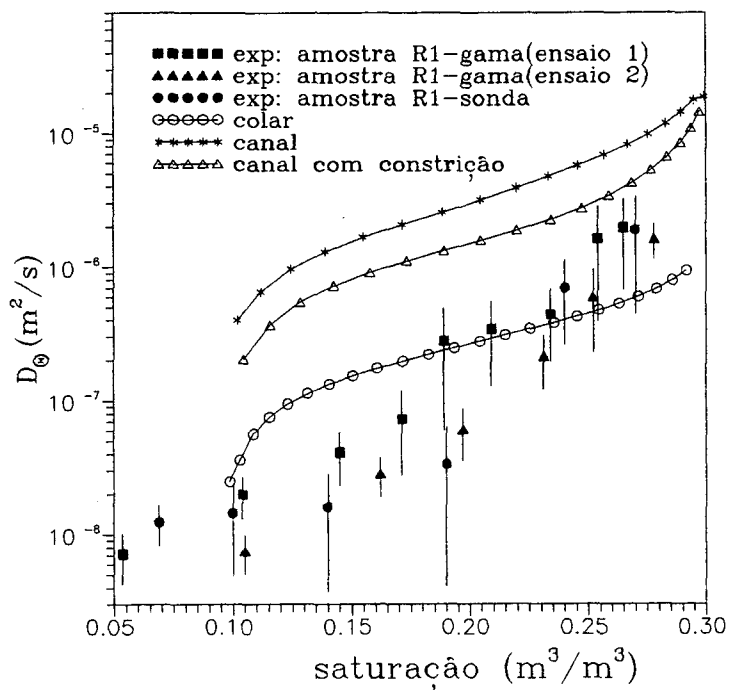


Figura 6.32- Perfil de teor em água .

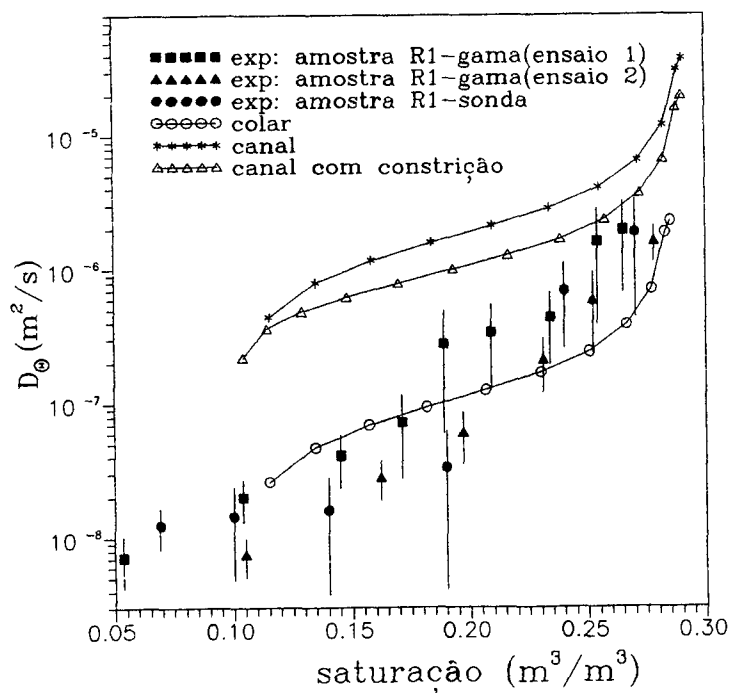
$K_f = 4,23 \times 10^{-7}$ m/s - Colar. NPM = 100. O fator 1 representa um fator de flexibilidade igual a 100 e o fator 2 representa um fator de flexibilidade igual a 2000

Observa-se que a modelagem com fissuras fornece resultados qualitativos bastante coerentes com o fenômeno estudado.

Salienta-se nesse sentido que a coluna de argamassa de seção de 70×70 mm² e 150 mm de comprimento, usada na experimentação [119], é representada por um modelo plano bidimensional com fissuras uniformemente distribuídas. Além disso, parâmetros como a geometria, a condutividade hidráulica das fissuras, parâmetros que interferem no processo de transferência, têm seus valores estimados, uma vez que valores reais não são disponíveis.



(a)



(b)

Figura 6.33 - Difusividade de massa em função de perfis médios.

(a) NPM = 100, (b) NPM = 150 .

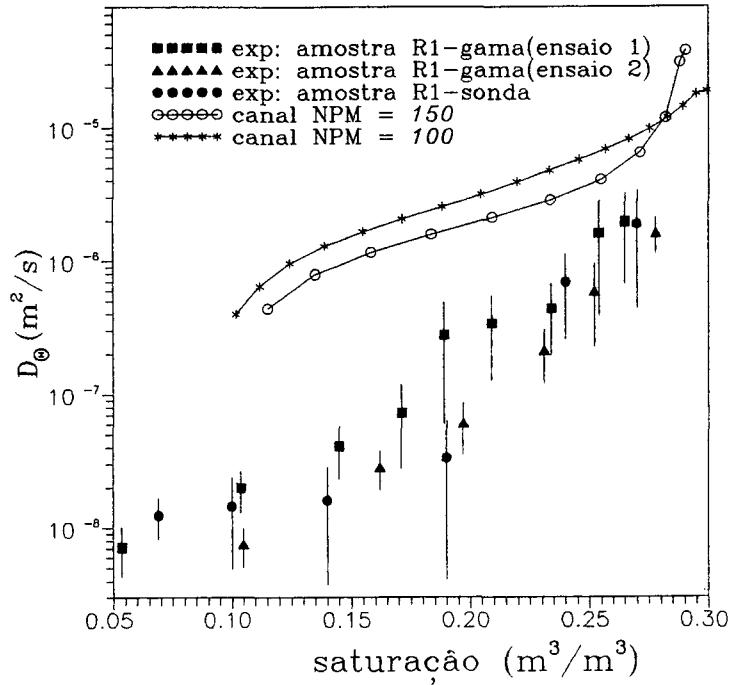


Figura 6.34 - Difusividade de massa em função de perfis médios e da densidade de fissuração . $K_f = 7,15 \times 10^{-6}$ (canal).

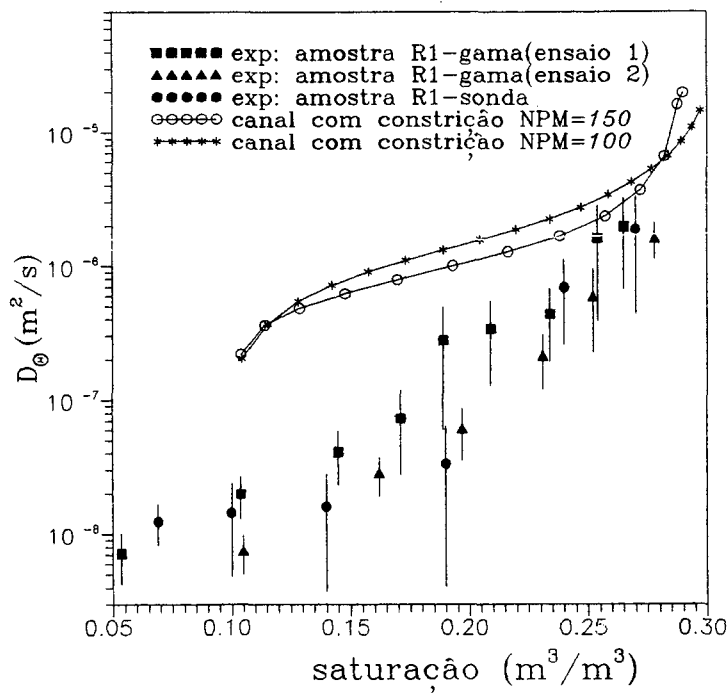


Figura 6.35 - Difusividade de massa em função de perfis médios e da densidade de fissuração . $K_f = 3,60 \times 10^{-6}$ (canal com constricção).

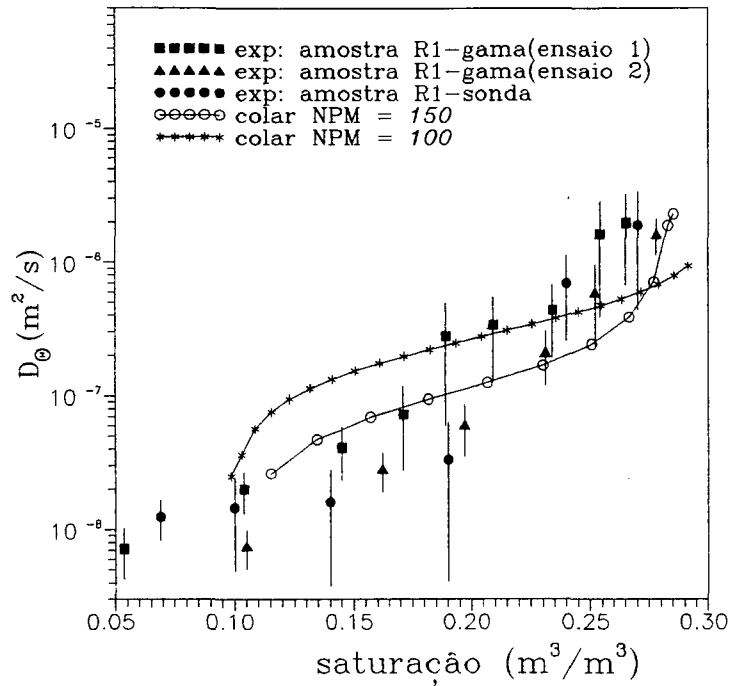


Figura 6.36 - Difusividade de massa em função de perfis médios e da densidade de fissuração . $K_f = 4,23 \times 10^{-7}$ (colar).

O programa de simulação foi desenvolvido em linguagem C e executado em computadores de grande porte tipo CONVEX - C210. O sistema de equações algébricas resultante é resolvido pelo método de Jacobi, seção 5.5, e a convergência é verificada através de um tolerância pré-fixada.

As fissuras influem sobre a difusividade mássica em toda a faixa do grau de saturação para uma sucção de 0,1 mca. Num meio poroso real as fissuras não estão tão interligadas, no plano, como se mostram no modelo aqui utilizado. As micrografias mostradas nas Figuras 3.3 à 3.9 evidenciam que uma interligação maior das fissuras ocorre na terceira dimensão.

Tabela 6.1 - Tempos de processamento para simulação.

TAMANHO DA AMOSTRA (NPM)	TEMPO DE PROCESSAMENTO - CONVEX-C210 (horas)
100	14,48
150	22,19

Na Figura 6.37 mostra-se uma comparação entre os valores da difusividade mássica experimentais, simulado e calculado através da Equação (6.1), em função do conteúdo de umidade.

Observa-se que a curva da difusividade mássica calculada através da Equação (6.1), está abaixo das curvas resultantes dos dados experimentais e simulados, evidenciando a importância do processo de invasão nas fissuras.

O modelo colar apresenta melhores resultados para D_{θ} , comparado aos dados experimentais, do que o modelo canal. Aparentemente isto ocorre porque no modelo colar as fissuras apresentam uma constrição sequencial aproximando-se mais da estrutura porosa real.

No primeiro modelo canal, as fissuras foram aproximadas por um canal de largura δ escolhida de forma a conservar a área aparente das fissuras observada nas micrografias.

No segundo modelo canal, foram introduzidas constrições com diâmetros iguais ao menor diâmetro observado nas fissuras, a partir das micrografias. A introdução destas constrições, ainda que aproximando melhor os dados experimentais, não se mostrou suficiente para representar o escoamento nas fissuras.

No modelo colar as fissuras foram aproximadas por uma sequência de constrições cujos diâmetros e frequências foram obtidos a partir da distribuição de poros presentes nas fissuras, observados nas micrografias.

Desse modo, a condutividade K_f do canal de largura δ e profundidade unitária é escolhida de forma a conservar o fluxo que se observa através de um conjunto de colares dispostos em paralelo e aparentando uma área molhada igual à fração em área das fissuras observadas nas micrografias (Eq. 6.11).

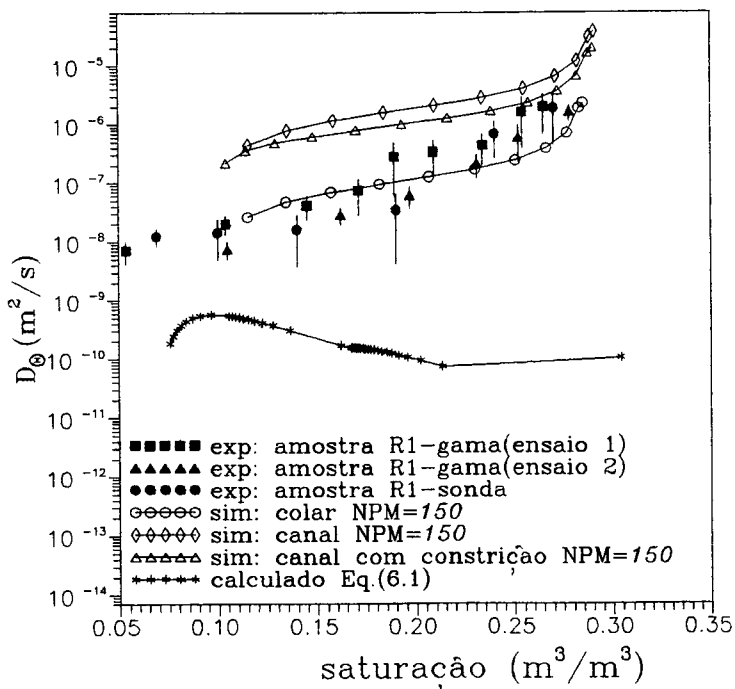


Figura 6.37 - Difusividade isotérmica de massa.

7 - CONCLUSÃO

O propósito principal desse trabalho foi o desenvolvimento de um modelo geométrico para representar a estrutura porosa de uma argamassa de cimento e cal, como a utilizada no revestimento interno de edificações, com o objetivo de simular os processos de invasão no interior do material. A modelagem geométrica constituiu-se de redes de percolação na representação dos poros com diâmetros entre 1000\AA e 10000\AA , de um modelo similar ao de Maxwell-De Vries na representação dos poros com diâmetros maiores que 10000\AA e de um modelo plano bidimensional na representação da rede de fissuras, observada nas micrografias da estrutura porosa do material estudado.

A simulação dos processos de invasão através de uma rede cúbica não correlacionada de sítios, onde cada sítio representa um diâmetro de poro, mostrou as curvas dos coeficientes de transferência D_h e da condutividade hidráulica K , em função do grau de saturação, com uma evolução bastante acentuada comparada aos resultados obtidos por outros autores. Possivelmente este comportamento se deve à concepção de rede utilizada neste trabalho: os poros são homogeneamente distribuídos na rede de acordo com a sua frequência em número. Os poros de pequeno diâmetro ($D \sim 1000\text{\AA}$) possuem frequência bastante superior aos poros de grande diâmetro. Desse modo o ponto crítico da rede corresponde a um diâmetro relativamente pequeno ($D = 1448\text{\AA}$), comparado à extensa faixa de diâmetros da argamassa de cal e cimento.

Observa-se ainda, que a evolução das curvas de D_h e K em função do grau de saturação está diretamente ligada ao agrupamento percolante. O agrupamento percolante é dominado pelos poros pequenos, representando assim, um crescimento relativamente brusco das curvas dos coeficientes D_h e K para baixos graus de saturação.

O modelo de Maxwell-De Vries permitiu a simulação dos macroporos que se apresentam desconectados e separados uns dos outros dentro da estrutura porosa da argamassa estudada, como mostraram as micrografias.

O caráter não homogêneo da argamassa de cimento e cal em associação com o estudo da influência da distribuição de fissuras sobre a transferência de umidade no material estudado foi abordado através de um modelo plano bidimensional apresentando as fissuras homogeneamente distribuídas, obedecendo-se sua fração em área observada nas micrografias. A modelagem permite a simulação da difusividade isotérmica de massa e fornece resultados qualitativos bastante coerentes com o fenômeno estudado em comparação com os resultados experimentais.

As limitações deste trabalho estão associadas à estimativa dos parâmetros tais como a geometria das fissuras, a condutividade hidráulica das fissuras e à modelagem da rede de fissuras, através de um modelo plano bidimensional, onde se superestima a interligação das fissuras a nível do plano. O trabalho se encontra da mesma forma limitado ao tempo de processamento exigido nas simulações em função dos equipamentos disponíveis.

A possibilidade no momento, da utilização do super computador, elimina o problema do tempo de processamento exigido nas simulações e permite uma modelagem da rede de fissuras variando-se o tamanho da amostra numa faixa bem mais ampla.

Um outro parâmetro importante é a densidade de fissuração cuja interferência na simulação pode ser avaliada como uma continuação deste trabalho.

Desse modo torna-se possível na simulação da difusividade isotérmica de massa considerar a influência simultânea dos parâmetros tais como a densidade de fissuração, o tamanho da amostra e a geometria das fissuras.

Um outro ponto a ser estudado está relacionado à geração da rede de percolação para representação dos poros com diâmetros entre 1000\AA e 10000\AA . Neste sentido pode ser estudada a possibilidade da geração de uma rede correlacionada de sítios. Um estudo neste sentido serviria

como base para a análise da importância ou não do agrupamento percolante na evolução das curvas de D_h e K em função do grau de saturação.

8-REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] BEAR, Jacob. *Dynamics of fluids in porous media*. New York , Dover Publications Inc., 1972. 513p.
- [2] DULLIEN, F. A. L. *Porous media: Fluid transport and pore structure*. New York, Academic Press, 1979. 396p.
- [3] HILLEL, D. *Fundamentals of soil physics*. New York, Academic Press, 1980. 413p.
- [4] DE VRIES, D. A. The thermal conductivity of granular materials. *Bull. Inst. Intern. du Froid*. p.115 - 131, 1952.
- [5] CHILDS, E. C. & COLLIS-GEORGE, N. The permeability of porous materials. *Proc. Royal Soc.*, London. v.201, p.392 - 405, 1950.
- [6] MARSHALL, T. J. A relation between permeability and size distribution of pores. *Journal of Soil Science*. v. 9, n. 1, p. 1 - 8, 1958.
- [7] FATT, I. The network model of porous media. I - Capillary pressure characteristics. *Petroleum Transactions, AIME*. v.207, p. 144 - 159, 1956.
- [8] _____ The network model of porous media. I I - Dynamic properties of a single size tubenetwork. *Petroleum Transactions, AIME*. v.207, p. 160 -163,1956.
- [9] _____ The network model of porous media. III - Dynamic properties of networks with tube radius distribution. *Petroleum Transactions, AIME*. v. 207, p. 164 - 181, 1956.
- [10] DODD, C.G. & KIEL, O. G. Evaluation of Monte Carlo methods in studying fluid-fluid displacement and wettability in porous rocks. *J. Phys. Chem*. v. 63, p. 1646 - 1652, 1959.

- [11] PAYATAKES, A.C. ; TIEN, C.; TURIAN, R.M. A new model for granular porous media:
Part I - Model formulation. *AICHE Journal*. v. 19, n. 1, p.59 -67, 1973.
- [12] CHATZIS, I. & DULLIEN, F. A. L. Modelling pore structure by 2-D and 3-D networks
with application to sandstones. *The Journal of Canadian Petroleum*. p. 97- 108, 1977.
- [13] _____ Mise en oeuvre de la théorie de la percolation pour
modéliser le drainage des milieux poreux et la perméabilité relative au liquide non
mouillant injecté. *Revue de L'Institut Français du Pétrole*. v. 37, n. 2, p. 183 - 205,
1982.
- [14] DULLIEN, F. A. L. & DHAWAN, G. K. Characterization of pore structure by a
combination of quantitative photomicrography and mercury porosimetry. *Journal of
Colloid and Interface Science*. v. 47, n. 2, p. 337 - 349, 1974.
- [15] KIRKPATRICK, S. Percolation and conduction. *Reviews of Modern Physics*. v. 45, n. 4,
p. 574 - 588, 1973.
- [16] VAN BRAKEL, J. Pore space models for transport phenomena in porous media. Review
and evaluation with special emphasis on capillary liquid transport. *Powder Technology*.
v.11, p. 205 - 236, 1975.
- [17] SINGHAL, A.K. & SOMERTON, W. H. Quantitative modelling of immiscible
displacement in porous media. - a network approach. *Revue de L'Institut Français du
Pétrole*. v. 32, n. 6, p. 897 - 920, 1977.
- [18] ADAMSON, A. W. *Physical chemistry of surfaces*. New York, John Wiley & Sons, 1982.
- [19] ROSE, W. & HEINS, R. W. Moving interfaces and contact angle rate- dependency. *J. of
Colloid Science*. v. 17, p. 39 -48, 1962.
- [20] ELLIOTT, G. E. P. & RIDDIFORD, A. C. Dynamic contact angles. *J. of Colloid and
Interface Science*, v. 23, p. 389 - 398, 1967.

- [21] LENORMAND, R. *Déplacements polyphasiques en milieu poreux sous l'influence des forces capillaires - Etude expérimentale et modélisation de type percolation*. Thèse de Doctorat d'État, Toulouse, Institut National Polytechnique, 1981. 327 p.
- [22] KOPLIK, J. Creeping flow in two-dimensional networks. *J. Fluid Mech.* v. 119, p. 219 - 247, 1982.
- [23] _____ On the effective medium theory of random linear networks. *J. Phys. C. : Solid State Phys.* v.14, p. 4821 - 4837, 1981.
- [24] MILLS, R. D. Computing internal viscous flow problems for the circle by integral methods. *J. Fluid Mech.* v. 79, n. 3, p. 609 - 624, 1977.
- [25] QUIBLIER, J. A. A new three-dimensional modeling technique for studying porous media. *Institut Français du Pétrole*. p. 84 - 102, 1983.
- [26] YANUKA, M.; DULLIEN, F. A. L.; ELRICK, D. E. Percolation processes and porous media. I - Geometrical and topological model of porous media using a three-dimensional joint pore size distribution. *Journal of Colloid and Interface Science.* v.112, n.1, p. 24 - 41, 1986.
- [27] YANUKA, M. Percolation processes and porous media. II - Computer calculations of percolation probabilities and cluster formation. *Journal of Colloid and Interface Science.* v. 127, n. 1, p. 35 - 47, 1989.
- [28] _____ Percolation processes and porous media. III - Prediction of the capillary hysteresis loop from geometrical and topological information of pore space. *Journal of Colloid and Interface Science.* v. 127, n. 1, p. 48 - 58, 1989.
- [29] SALIBA, J. *Propriétés de transfert hydrique du mortier de ciment: modélisation à l'échelle macroscopique des effets dynamiques des hétérogénéités*. Thèse de Doctorat, Grenoble, Université Joseph Fourier, 1990. 295p.

- [30] DAIAN, J. F. & SALIBA, J. Determination d'un reseau aléatoire de pores pour modéliser la sorption et la migration d'humidité dans un mortier de ciment. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, v. 34, n. 8, p. 2081 - 2096, 1991.
- [31] PAYATAKES, A. C. ; TIEN, C.; TURIAN, R. M. A new model for granular porous media: Part II - Numerical solution of steady state incompressible Newtonian flow through periodically constricted tubes. *AIChE Journal*. v. 19, n. 1, p. 68 - 76, 1973.
- [32] PAYATAKES, A. C. & NEIRA, M. A. Model of the constricted unit cell type of isotropic granular porous media. *AIChE Journal*. v. 23, n. 6, p. 922 - 930, 1977.
- [33] GANOULIS, J. *Remplacement d'un fluide par un autre dans des domaines de géométrie aléatoire ou non cylindrique*. Thèse de Doctorat d'Etat, Toulouse, Université Paul Sabatier, 1974. 364p.
- [34] DIAS, N. M. & PAYATAKES, A. C. Network models for two-phase flow in porous media. Part. I - Immiscible microdisplacement of non-wetting fluids. *J. Fluid Mech.* v. 164, p. 306 -336, 1986.
- [35] _____ Network models for two-phase flow in porous media: Part. II - Motion of oil ganglia. *J. Fluid Mech.* v. 164, p. 337 - 358, 1986.
- [36] TELETZKE, G. F.; DAVIS, H. T.; SCRIVEN, L. E. Wetting hydrodynamics. *Revue Phys. Appl.* v. 33, p. 989 - 1007, 1988.
- [37] WILKINSON, D. & WILLEMSSEN, J. F. Invasion percolation: a new form of percolation theory. *J. Phys. A.* v. 16, p. 3365 - 3376, 1983.
- [38] LENORMAND, R.; ZARCONE, C.; SARR, A. Mechanisms of the displacement of one fluid by another in a network of capillary ducts. *J. Fluid Mech.* v. 133, p. 337 - 353, 1983.

- [39] YUNES, Pablo Rosendo. *Determinação da distribuição de poros de uma argamassa de cimento e cal usando as isotermas de equilíbrio e dados de microscopia eletrônica*. Dissertação de Mestrado, Florianópolis, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Sta Catarina, 1992.
- [40] PARLAR, M. & YORTSOS, C. Percolation theory of vapor adsorption-desorption processes in porous media. *J. of Colloid and Interface Science*. v. 124, n. 1, p. 162 - 176, 1988.
- [41] MANDELBROT, B. B. *The fractal geometry of nature*. San Francisco, Freeman, 1982. 468p.
- [42] LENORMAND, R. & ZARCONE, C. Invasion percolation in a etched network: Measurement of a fractal dimension. *Physical Review Letters*. v. 54, n. 20, p. 2226 - 2229, 1985.
- [43] AVNIR, D.; FARIN, D.; PFEIFER, P. Surface geometric irregularity of particulate materials: the fractal approach. *J. of Colloid and Interface Science*. v. 103, n.1 , p. 112 - 123, 1985.
- [44] JACQUIN, C. G. & ADLER, P. M. Fractal porous media II: Geometry of porous geological structures. *Transport in Porous Media*. v. 2, p. 571 - 596, 1987.
- [45] PHILIPPI, P. C.; YUNES, P. R.; FERNANDES, C. P. ; MAGNANI, F. S. The microestructure of porous building materials: study of a cement and lime mortar. *Transport In Porous Media*. (Accepted for publication), 1993.
- [46] ANDROUTSOPOULOS, G. P. & MANN, R. Mercury porosimeter experiments using a network pore structure model. *Chemical Engineering Science*. v. 34, p. 1203 - 1212, 1979.

- [47] MANN, R.; ANDROUTSOPOULOS, G. P.; GOLSHAN, H. Application of a stochastic network pore model to oil-bearing rock with observations relevant to oil recovery. *Chemical Engineering Science*. v. 36, p. 337 - 346, 1981.
- [48] SCHILDT, Herbert. *Turbo C avançado - guia do usuário*. Trad. Célia M. O. Mayer e Roberto C. Mayer, rev. por Roberto C. Mayer. São Paulo, McGraw-Hill, 1990. 457p.
- [49] KNAB, L. I.; WALKER, H. N.; CLIFTON, J. R.; FULLER JR, E. R. Fluorescent thin sections to observe the fracture zone in mortar. *Cement and Concrete Research*. v. 14, p. 339 -344, 1984.
- [50] DIAMOND, S.; MINDESS, S.; LOVELL, J. Use of a Robinson backscatter detector and wet cell for examination of wet cement paste and mortar specimens under load. *Cement and Concrete Research*. v. 13, p. 107 - 113, 1983.
- [51] PEDRINI, Aldomar. Determinação de características petrofísicas de meios porosos. *Relatório interno do Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas de Materiais*, Departamento de Engenharia. Mecânica, Florianópolis, Universidade Federal de Sta Catarina, 1990.
- [52] GOLDEN, J. Percolation theory and model of unsaturated porous media. *Water Resources Research*. v. 16, p. 201 -209, 1980.
- [53] MASON, G. The effect of pore space connectivity on the hysteresis of capillary condensation in adsorption-desorption isotherms. *Journal of Colloid and Interface Science*. v. 88, p. 36 -46, 1982.
- [54] WALL, G. C. & BROWN, R. J. The determination of pore size distribution from sorption isotherms and mercury penetration in interconnected pores: the application of percolation theory. *Journal of Colloid and Interface Science*. v. 82, p. 141 - 149, 1981.

- [55] NEIMARK, A. V. A percolation method for calculating the pore size distribution in materials of intermediate porosity based on the adsorption and desorption isotherms in the hysteresis region. *Russian J. Phys. Chem.* v. 60, p. 1045 - 1048, 1986.
- [56] MUALEN, Y. A conceptual model of hysteresis. *Water Resources Research.* v.10, p. 514 - 520, 1974.
- [57] CINCO-LEY, H.; SAMANIEGO-V, F.; DOMINGUES, N. A. Transient pressure behavior for a well with a finite-conductivity vertical fracture. *Soc. Pet. Eng. J.* p.253 - 264, 1978.
- [58] CINCO-LEY, H. & SAMANIEGO-V, F. Transiente pressure analysis for fractured wells. *J. Pet. Tech.* p. 1749 - 1766, 1981.
- [59] KISSLING, W. & YOUNG, R. M. Two-dimensional flow in a fractured medium. *Transport in Porous Media.* v. 4, p. 335 - 369, 1989.
- [60] DE GENNES, P. G. & GUYON, E. Lois générales pour l'injection d'un fluide dans un milieu poreux aléatoire. *Journal de Mécanique.* v. 17, n. 3, p. 403 - 432, 1978.
- [61] BRETHERTON, F. P. The motion of long bubbles in tubes. *J. Fluid Mech.* v.10, p. 166 - 188, 1961.
- [62] SCHWARTZ, L. W.; PRINCEN, H. M.; KISS, A. D. On the motion of bubbles in capillary tubes. *J. Fluid Mech.* v. 172, p. 259 - 275, 1986.
- [63] TAYLOR, G. I. Deposition of a viscous fluid on the wall of a tube. *J. Fluid Mech.* v.10, p. 161- 165, 1961.
- [64] MARCHESSAULT, R. N. & MASON, S. G. Flow of entrapped bubbles through a capillary. *Ind. Eng. Chem.* v. 52, n.1, p. 79 - 84, 1960.

- [65] HANSEN, R. J. & TOONG, T. Y. Interface behavior as one fluid completely displaces another from a small diameter tube. *J. of Colloid and Interface Science.* v. 36, n. 3, p. 410 - 413, 1971.
- [66] COX, B. G. On driving a viscous fluid out of a tube. *J. Fluid Mech.* v. 14, p. 81 - 96, 1962.
- [67] _____ An experimental investigation of the streamlines in viscous fluid expelled from a tube. *J. Fluid Mech.* v. 20, p. 193 - 200, 1964.
- [68] GARABEDIAN, P. R. Free boundary flows of a viscous liquid. *Communications on Pure and Applied Mathematics.* v. 19, n. 4, 1966.
- [69] RICHARDSON, I. S. Two-dimensional bubbles in slow viscous flows. *J. Fluid Mech.* v. 33, p. 475 - 493, 1968.
- [70] ARIBERT, J. M. *Problemes de déplacement d'un fluid visqueux par un autre.* Thèse de Doctorat, Toulouse, Faculté des Sciences de L'Université de Toulouse, 1970.
- [71] VAN QUY, N. Sur l'écoulement entre deux plaques paralleles voisines, de deux fluids séparés par un interface. *Int. J. Eng. Sci.* v. 9, p. 101 - 132, 1971.
- [72] HUH, C. & SCRIVEN, L. E. Hydrodynamic model of steady movement of a solid/liquid/fluid contact line. *J. of Colloid and Interface Science.* v. 35, n. 1, p. 85 - 101, 1971.
- [73] HOFFMAN, R. L. A study of the advancing interface. I - Interface shape in liquid-gas systems. *J. of Colloid and Interface Science.* v. 50, n. 2, p. 228 - 241, 1975.
- [74] CHANDLER, R.; KOPLIK, J.; LERMAN, K.; WILLEMSEM, J. F. Capillary displacement and percolation in porous media. *J. Fluid Mech.* v. 119, p. 249 - 267, 1982.

- [75] LARSON, R. G.; SCRIVEN, L. E.; DAVIS, H.T. Percolation theory of two phase flow in porous media. *Chemical Engineering Science*. v. 36, p. 57 - 73, 1981.
- [76] PARK, C.W. & HOMSY, G. M. Two-phase displacement in Hele Shaw cells: Theory. *J. Fluid Mech.* v. 139, p. 291 - 308, 1984.
- [77] HUH, C. & MASON, S. G. The steady movement of a liquid meniscus in a capillary tube. *J. Fluid Mech.* v. 81, p. 401 - 419, 1977.
- [78] DUSSAN, V. E. B. The moving contact line: The slip boundary condition. *J. Fluid Mech.* v. 77, p. 665 - 689, 1976.
- [79] HOCKING, L. M. A moving fluid interface on a rough surface. *J. Fluid Mech.* v. 76, p. 801 - 817, 1976.
- [80] _____ A moving fluid interface. Part 2. The removal of the force singularity by a slip flow. *J. Fluid Mech.* v. 79, p. 209 - 229, 1977.
- [81] BROADBENT, S. R. & HAMMERSLEY, J. M. Percolation processes. I. Crystals and mazes. *Proc. Cambridge Philos. Soc.* v. 53, n. 3, p. 629 - 641, 1957.
- [82] DOMB, C. & SYKES, M. F. Use of series expansions for the Ising model susceptibility and excluded volume problem. *Journal of Mathematical Physics*. v. 2, n. 1, p. 63 - 67, 1961.
- [83] _____ Cluster size in random mixtures and percolation processes. *Physical Review*. v. 122, n. 1, p. 77 - 78, 1961.
- [84] FISHER, M. E. & ESSAM, J. W. Some cluster size and percolation problems. *Journal of Mathematical Physics*. v. 2, n. 4, p. 609 - 619, 1961.

- [85] FRISH, H. L.; HAMMERSLEY, J. M.; WELSH, D. J. A. Monte Carlo estimates of percolation probabilities for various lattices. *Physical Review*. v. 126, n. 3, p. 949 - 951, 1962.
- [86] HAMMERSLEY, J. M. & FRISH, H. L. Percolation processes and related topics. *J. Soc. Indust. Appl. Math.* v. 11, n. 4, p. 894 - 918, 1963.
- [87] SYKES, M. F. & ESSAM, J. W. Some exact critical percolation probabilities for bond and site problems in two dimensions. *Physical Review Letters*. v. 10, n. 1, p. 3 -4, 1963.
- [88] _____ Critical percolation probabilities by series methods. *Physical Review*. v.133, n. 1A, p. A310 - A315, 1964.
- [89] _____ Exact critical percolation probabilities for size and bond problems in two dimensions. *Journal of Mathematical Physics*. v. 5, n. 8, p. 1117 - 1127, 1964.
- [90] SHANTE, V. K. S. & KIRKPATRICK, S. An introduction to percolation theory. *Adv. Phys.* v. 20, p. 325 - 354, 1971.
- [91] DE GENNES, P. G. La percolation: un concept unificateur. *La Recherche*. v. 7, n. 72, p. 919 - 927, 1976.
- [92] SYKES, M. F. & GLEN, M. Percolation processes in two dimensions. I. Low-density series expansions. *J. Phys. A: Math. Gen.* v. 9, n. 1, p. 87 - 95, 1976.
- [93] _____ Percolation processes in two dimensions. II. High-density series expansions. *J. Phys. A: Math Gen.* v. 9, n. 5, p. 715 - 729, 1976.
- [94] MARIS, H. J. & KADANOFF, L. P. Teaching the renormalization group. *Am. J. Phys.* v. 46, n. 6, p. 652 - 657, 1978.

- [95] REYNOLDS, P. J.; STANLEY, H. E.; KLEIN, W. Ghost fields, pair connectedness, and scaling: exact results in one-dimensional percolation. *J. Phys. A.* v. 10, p. L203 - L209, 1977.
- [96] _____ Large-cell Monte Carlo renormalization group for percolation. *Physical Review B.* v. 21, n. 3, p. 1223 - 1245, 1980.
- [97] ESSAM, J. W. Percolation theory. *Rep. Prog. Phys.* v. 43, p. 833 - 912, 1980.
- [98] DOMB, C. The percolation phase transition. *Annals of the Israel Physical Society.* v. 5, p. 17 - 46, 1983.
- [99] HAMMERSLEY, J. M. Origins of percolation theory. *Annals of the Israel Physical Society.* v. 5, p. 47 - 57, 1983.
- [100] EFROS, A. *Física y geometria del desorden.* Trad. Stanislav N. Beloúsav, Moscou, Editora Mir, 1982. 184p. Original em russo.
- [101] STAUFFER, D. *Introduction to percolation theory.* Londres, Editora Taylor & Francis, 1985. 121p.
- [102] HOSHEN, J. & KOPELMAN, R. Percolation and cluster distribution . I - Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. *Physical Review B.* v. 14, n. 8, p. 3438 - 3445, 1976.
- [103] SOUZA, Henor Artur; MAGNANI, Fábio Santana; PHILIPPI, Paulo César. Estudo da influência da topologia de uma rede de percolação em processos sobre escoamento em meios porosos. *Anais do XIX Encontro sobre Escoamento em Meios Porosos.* v.1, p.79 - 90, 1991.

- [104] EVERETT, D. H. & HAYNES, J. M. Model studies of capillary condensation. I - Cylindrical pore model with zero contact angle. *Journal of Colloid and Interface Science*. v. 38, n. 1, p. 125 - 137, 1972.
- [105] GAUGLITZ, P. A. & RADKE, C. J. An extended evolution equation for liquid film breakup in cylindrical capillares. *Chemical Engineering Science*. v. 43, n. 7, p. 1457 - 1465, 1988.
- [106] TSAKIROGLOU, C. D. & PAYATAKES, A. C. A new simulator of mercury porosimetry for the characterization of porous materials. *Journal of Colloid and Interface Science*. v. 137, n. 2, p. 315 - 339, 1990.
- [107] MICHIELS, P.; HARTMANN, R.; DE STROOPER, E. Comparisons of the unsaturated hydraulic conductivity of a coarse-textured soil as determined in field, in laboratory, and with mathematical models. *Soil Science*. v. 147, n. 4, p. 299 - 304, 1989.
- [108] BLUNT, M. & KING, P. Relative permeabilities from two and three dimensional pore-scale network modelling. *Transport in Porous Media*. v. 6, p. 407 - 433, 1991.
- [109] DAIAN, J. F. *Processus de condensation et de transfert d'eau dans un matériau meso et macroporeux. Étude expérimentale du mortier de ciment*. Thèse de Doctorat d'Etat, Grenoble, Institut National Polytechnique, 1986. 319 p.
- [110] PHILIP, J. R. & DE VRIES, D. A. Moisture movement in porous materials under temperature gradients. *Transactions American Geophysical Union*. v. 38, p. 222 - 232, 1957.
- [111] DE VRIES, D. A. Simultaneous transfer of heat and moisture in porous media. *Transactions American Geophysical Union*. v. 39, p. 909 - 916, 1958.
- [112] LUIKOV, A. V. *Heat and mass transfer in capillary-porous bodies*. Trad. P.W.B. Harrison, Oxford, Pergamon Press, 1966. 536p. Original em russo.

- [113] FOX, Robert W. & MACDONALD, Alan T. *Introdução à mecânica dos fluidos*. Trad. P. Silvestre. 3.ed., Rio de Janeiro, Editora Guanabara S.A., 1985. 632p. Original em inglês.
- [114] IDELCIK, I. E. *Memento des pertes de charge*. Trad. Madame M. Meury. Editeur Paris, 1969. 494p. Original em russo.
- [115] PATANKAR, Suhas V. *Numerical heat transfer and fluid flow*. New York, McGraw-Hill Book Company, 1980. 197p.
- [116] GUMMERSON, R. J. et alii. Unsaturated water flow within porous materials observed by NMR imaging. *Macmillan Journals Ltd.* v.281, n. 5726, p. 56 - 57, 1979.
- [117] JURY, W. A. & MILLER, E. E. Measurement of the transport coefficients for coupled flow of heat and moisture in a medium sand. *Soil Science Society of American Proceedings*. v. 38, n. 4, p. 551- 557, 1974.
- [118] MEROUANI, L. *Phénomènes de sorption et de transfert d'humidité dans des matériaux du bâtiment. Étude expérimentale comparative d'un mortier de ciment et d'un enduit de façade*. Thèse de Doctorat-3ème cycle , Grenoble, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1987. 180 p.
- [119] FERNANDES, C. P.; PHILIPPI, P. C.; DA CUNHA, J. A. B. Determinação da difusividade isotérmica de umidade através dos métodos da sonda térmica e atenuação de raios-gama. *Anais do XIX Encontro sobre Escoamento em Meios Porosos*. v.1, p.163 - 174, 1991.
- [120] BRUCE, R. R. & KLUTE, A. The measurement of soil water diffusivity. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.* v. 20, p. 458 - 462, 1956.

- [121] JACOBS, D. A. H. Generalization of the conjugate gradient method for solving non-symmetric and complex systems of algebraic equations. *Central Electricity Research Laboratories*. Note n. RD/L/N 70/80, Job n. VC032, VC034, VC 453, 1980.
- [122] GOLUB, Gene H. *Matrix-computations*. Londres, The Johns Hopkins University Press, 2. ed., 1989.
- [123] PRATA, Álvaro Toubes. Notas de aula. Disciplina Convecção Avançada. *Departamento de Engenharia Mecânica - UFSC*. Florianópolis, 1989.
- [124] PAIHUA, L. M. *Quelques méthodes numériques pour le calcul de fonctions spline à une et plusieurs variables*. Thèse de 3ème cycle. Université Scientifique, Technique et Médicale de Grenoble, Grenoble, 1978.