



Universidade do Porto

Faculdade de Engenharia

FEUP

Fenómenos de Transporte em Meios Porosos

Escoamento Monofásico e Transporte de Massa

Dissertação de Doutoramento
em
Engenharia Química
por

António Augusto Areosa Martins

Orientadores
José Carlos Brito Lopes
Madalena Maria Gomes de Queiroz Dias



Laboratório de Processos de Separação e Reacção
Departamento de Engenharia Química
Faculdade de Engenharia
Universidade do Porto

Julho 2006

Agradecimentos

Ao concluir este trabalho desejo agradecer a todas as pessoas que, de diferentes formas, me ajudaram a alcançar durante o trabalho de investigação que culminou nesta dissertação.

Em primeiro lugar, os meus orientadores, Professor José Carlos Brito Lopes e Professora Madalena Maria Queiroz Dias, pela oportunidade e condições que me deram para a realização deste trabalho. As suas sugestões, apoio incondicional, disponibilidade permanente para responder às minhas solicitações, e a força que me deram para passar os maus momentos foi fundamental para concluir este trabalho com sucesso.

Aos restantes membros do LSRE, em particular o Professor Alírio Egídio Rodrigues, pelo excelente ambiente de trabalho existente para a realização de trabalhos de investigação e pela disponibilização dos recursos necessários, em particular computacionais.

Aos meus colegas de doutoramento agradeço a camaradagem e a amizade ao longo deste trabalho, em especial aqueles que me acompanharam de mais perto: Vera Mata, André Teixeira, Peter Spicka, Maria Isabel Nunes, Miroslav Panacek, Francisco Avelino Freitas, Rui Soares, Paulo Laranjeira e a Susana.

Agradeço também à Fundação da Ciência e da Tecnologia a concessão de uma bolsa, CICA a possibilidade de utilização dos recursos computacionais disponíveis, e à biblioteca da FEUP a disponibilidade para tratar todos os meus pedidos com eficiência.

Finalmente, os meus agradecimentos à minha família pelo seu suporte e apoio dados ao longo deste trabalho, especialmente para a minha esposa Teresa Mata pelo sua compreensão, conselhos, paciência, sugestões, críticas construtivas e humor durante a escrita desta dissertação.

Dedicatória

Esta dissertação é dedicada à minha Esposa Teresa Mata, pelo amor e dedicação demonstrada durante a realização deste trabalho.

***“This is not the beginning of the end,
it is just the end of the beginning”***

Winston Churchill, 1941

Resumo

Neste trabalho o escoamento e o transporte de massa através de um meio poroso são descritos, caracterizados e simulados, com o objectivo de melhor compreender os mecanismos e a influência da estrutura de um meio poroso. Este estudo é limitado ao caso de escoamento de fluidos newtonianos incompressíveis em estado estacionário.

A estrutura de um meio poroso foi descrita com um modelo de redes formado por dois tipos de elementos: as câmaras (esferas), representando os vazios de maiores dimensões e os canais (cilindros), que interligam as câmaras entre si. Na geração da rede as relações entre os dois tipos de elementos ao nível local são tidas em consideração. É proposto um modelo geométrico, baseado na caracterização geométrica de leitos de enchimento regulares de esferas de diâmetro constante, para prever as dimensões características dos elementos da rede em função das características do leito de enchimento. Este modelo é adequado no caso em que a distribuição dos diâmetros equivalentes das partículas é apertada.

O escoamento através dos elementos da rede é descrito utilizando a analogia com um circuito eléctrico puramente resistivo. A existência dos dois tipos de elementos de rede é tida em consideração de forma explícita. Os resultados mostram que apenas quando são considerados os efeitos das ligações entre câmaras e canais é possível descrever o escoamento num meio poroso em qualquer regime de escoamento. O modelo proposto é utilizado para caracterizar a influência das características geométricas da rede e dos seus elementos. É observada uma boa concordância entre os valores previstos de permeabilidade, as constantes da Equação de MacDonald e dados experimentais disponíveis na literatura.

O transporte de massa é descrito simulando a resposta transiente da rede a uma perturbação de traçador aplicada na entrada do fluido. Os mecanismos de transporte de massa por convecção são associados aos canais e os dispersivos às câmaras. O atraso devido ao escoamento nos canais é considerado de forma explícita nas equações de balanço material e sua resolução numérica. O modelo proposto permite caracterizar a influência da estrutura da rede e dos seus elementos, em particular quando a convecção é o mecanismo de transporte de massa dominante. Dois parâmetros são propostos para avaliar a influência relativa dos mecanismos convectivos e dispersivos de transporte de massa. A comparação com dados experimentais é adequada desde que as previsões do modelo sejam corrigidas usando um parâmetro função apenas da porosidade.

Abstract

In this work the flow and mass transport through a porous medium are described, characterised and simulated, with the objective of better understand the underlying mechanisms and the influence of the medium structure. This study is limited to newtonian fluids in steady state flow.

The structure of the porous medium is described using a network model with two types of elements: chambers and cylinders. Chambers are modelled as spheres, representing the larger voids and channels are modelled as cylinders, representing the smaller voids that interconnect chambers. The interrelation between the two types of the network model elements is taken into account at the local level. A geometrical model is proposed to predict values of the particles size distribution of the network elements as a function of the characteristics of the packed bed. It is based on the geometric characterization of a regular packed bed formed by spheres of constant diameter. This model is adequate in the situation that the particles size distribution is narrow.

The flow through the network elements is described using the analogy with a purely resistive electrical circuit. The existence of two types of network elements is explicitly considered. The results show that only when the influence of the connections between channel and chambers is considered it is possible to describe any of the flow regimens. The proposed model is used to characterise the influence of the geometry of the network and their elements. It is observed a good agreement between the predicted values of permeability, the constants of MacDonald's Equations and experimental data available in the literature.

The mass transport is described by simulating the transient response of the network to tracer perturbation applied at the entrance of the fluid. The mass transport by convection and dispersion is associated with the channels and chambers respectively. The delay due to the flow in the channel is taken into account when writing and numerically solving the mass transport equations. The proposed model allows one to determine the influence of the network structure and their elements, especially when mass transport by convection is dominant. Two parameters are proposed to assess the relative importance of the convection and dispersion mechanisms. The comparison with experimental data shows is good only when a correcting factor function only of the porosity.

Résumé

Dans ce travail l'écoulement et le transport de masse à travers d'un milieu poreux sont décrits, caractérisés et simulés, avec l'objectif de mieux comprendre les mécanismes au-dessous et l'influence de la structure du milieu. Cette étude est limitée aux fluides newtoniens incompressibles dans écoulement de l'état stationnaire.

La structure du milieu poreux est décrite en utilisant un modèle de réseau constitué par deux types d'éléments: chambres et canaux. Les chambres sont modélisés comme sphères, représentant les plus grands vides et les canaux sont modélisés comme cylindres, représentant les plus petits vides qui interconnectent les chambres. Les connexions entre ces deux types d'éléments sont prises en considération au niveau local pour la génération du modèle du réseau. Un modèle géométrique est proposé pour prédire les valeurs des dimensions des éléments du réseau comme une fonction des caractéristiques du lit. Il est basé dans la caractérisation géométrique d'un lit fixe formée par sphères de diamètre constant. Ce modèle est adéquat dans la situation que la distribution des diamètres des particules est étroite.

L'écoulement à travers des éléments du réseau est décrit en utilisant l'analogie avec un circuit électrique purement résistive. L'existence de deux types d'éléments du réseau est considéré de façon explicite. Les résultats montre que seulement quand l'influence des connexions entre canaux et les chambres sont considérées c'est possible de décrire l'écoulement en milieu poreux dans chacun des régimes d'écoulement. Le modèle proposé est utilisé pour caractériser l'influence de la géométrie du réseau et de leurs éléments. Il est observé un bon accord entre les valeurs prévus par le modèle et les valeurs expérimentaux.

Le transport de masse est décrit en simulant la réponse transiente du réseau à une perturbation du traceur appliqué à l'entrée du fluide. Les mécanismes de transport de masse par convection sont associés aux canaux et par dispersion sont associés aux chambres. Le retard dû à l'écoulement dans les canaux est considéré explicitement pendant l'écriture des équations du transport de masse et sa résolution numérique. Le modèle proposé permet caractériser l'influence de la structure du réseau et de leurs éléments, surtout quand la convection est le mécanisme de transport de masse dominant. Deux paramètres sont proposés pour évaluer l'importance relative des mécanismes de convection et dispersion du transport de masse. La comparaison avec information expérimentelle est bonne seulement quand on utilise un facteur de correction fonction de la porosité.

Índice Geral

	Pág.
1. INTRODUÇÃO	1
1.1 Importância e motivações	1
1.2 Objectivos	2
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	7
2.1 Introdução	7
2.2 Caracterização e Modelização de Meios porosos	10
2.2.1 Definição e Características Gerais	10
2.2.2 Parâmetros Macroscópicos.....	11
2.2.2.1 Porosidade.....	12
2.2.2.2 Área Superficial Específica.....	12
2.2.2.3 Caracterização das Partículas em Leitos de Enchimento.....	13
2.2.3 Modelização de Meios Porosos.....	14
2.2.4 Modelos de Redes	15
2.2.4.1 Modelos Unidimensionais.....	16
2.2.4.2 Modelos Bidimensionais e Tridimensionais	18
2.2.4.3 Outros Modelos.....	23
2.2.5 Forma Geométrica e Distribuição de Tamanhos de Poros.....	24
2.3 Escoamento Monofásico em Meios Porosos	34
2.3.1 Caracterização dos Regimes de Escoamento	34
2.3.2 Parâmetros Macroscópicos.....	37
2.3.2.1 Permeabilidade.....	37
2.3.2.2 Tortuosidade.....	39
2.3.3 Modelos Fenomenológicos de Descrição do Escoamento	41
2.3.4 Modelos Baseados na Definição de Diâmetro Hidráulico	44
2.3.4.1 Regime Laminar.....	44
2.3.4.2 Regime Turbulento	47
2.3.4.3 Escoamento Não-Linear - Equação de Ergun.....	48
2.3.4.4 Extensões à Equação de Ergun	55
2.3.5 Modelos Baseados em Redes de Elementos Simples	61
2.3.5.1 Modelos Unidimensionais.....	62
2.3.5.2 Modelos de Redes Bidimensionais e Tridimensionais	72
2.3.5.3 Aplicações dos Modelos de Redes Bidimensionais e Tridimensionais.....	79
2.4 Transporte de Massa em Meios Porosos.....	88
2.4.1 Descrição Geral.....	88
2.4.2 Mecanismos de Transporte de Massa em Meios Porosos.....	90
2.4.2.1 Descrição geral.....	90
2.4.2.2 Regimes de Dispersão Hidrodinâmica em Meios Porosos	94
2.4.3 Modelos de Descrição da Dispersão num Tubo.....	97
2.4.3.1 Modelo de Taylor-Aris.....	97
2.4.3.2 Limitações e Extensões do Modelo de Taylor-Aris.....	102
2.4.3.3 Método dos Momentos de Aris.....	108
2.4.4 Modelo de Dispersão.....	111
2.4.5 Modelos de Redes	116
2.4.5.1 Descrição Geral.....	116
2.4.5.2 Particle Tracking.....	117

2.4.5.3	Análise do Comportamento do Perfil de Concentrações.....	122
	Modelos de Redes Unidimensionais	122
	Modelos de Tanques Agitados.....	124
	Modelos Baseados no Uso de Transformadas de Laplace.....	128
	Modelos Baseados em Balanços Materiais aos Elementos da Rede.....	133
2.5	Conclusões.....	139
3.	MODELO DE REDES	141
3.1	Introdução.....	141
3.2	Escolha do Modelo	145
3.3	Descrição do Modelo de Redes	148
3.4	Descrição do Algoritmo de Geração da Rede	155
3.4.1	Cálculo do Número de Câmaras e Canais	156
3.4.2	Atribuição dos Diâmetros das Câmaras.....	157
3.4.3	Atribuição dos Diâmetros dos Canais	158
3.4.4	Caso Especial - Alteração do Número de Coordenação	161
3.4.5	Atribuição dos Comprimentos dos Canais	163
3.4.6	Determinação da Espessura da Rede	165
3.4.7	Redes Especiais	167
3.4.7.1	Rede com distribuições pontuais de tamanhos dos elementos	167
3.4.7.2	Redes sem câmaras.....	168
3.4.8	Análise dos Parâmetros de Entrada do Gerador da Rede	168
3.4.8.1	Dependência entre o comprimento médio dos canais e θ	169
3.4.8.2	Valores limites do Diâmetro Médio das Câmaras e Canais	172
3.4.8.3	Influência da inclusão ou não das calotes.....	173
3.4.9	Diagrama de Fluxo do Gerador da Rede	174
3.5	Determinação dos Parâmetros das Distribuições de Tamanhos	176
3.5.1	Enchimentos de Esferas Ideais	177
3.5.2	Descrição e Caracterização dos Enchimentos	181
3.5.3	Determinação do Diâmetro Médio das Câmaras.....	186
3.5.4	Determinação do Diâmetro Médio e Comprimento dos Canais.....	187
3.5.4.1	Modelo T1	191
3.5.4.2	Modelo T2	201
3.5.4.3	Modelos T3 e T4	205
3.5.5	Determinação de θ	208
3.5.6	Funções de Distribuição das Dimensões dos Elementos da Rede.....	214
3.6	Análise do Modelo Geométrico.....	214
3.6.1	Limitações dos Modelos.....	215
3.6.2	Influência da Inclusão do Enchimento Ortorrômico	218
3.6.3	Influência da Inclusão das Calotes	224
3.6.4	Comparação entre os Modelos T2 e T2S.....	229
3.6.5	Verificação dos Critérios e Restrições Impostos no Gerador da Rede.....	231
3.6.6	Seleção do Modelo.....	236
3.6.7	Comparação com Valores Publicados	237
3.7	Análise dos resultados do gerador da Rede.....	241
3.7.1	Influência das Características Geométricas da rede	244
3.7.1.1	Dimensões da rede.....	244
3.7.1.2	Estrutura da Rede	246
3.7.1.3	Inclusão das Calotes	254
3.7.2	Influência dos Parâmetros Estatísticos da Rede	256
3.7.2.1	Desvio Padrão.....	256

3.7.2.2	Razão Entre os Diâmetros Médios das Câmaras e Canais.....	258
3.8	Análise das Distribuições das Dimensões dos Elementos da Rede	260
3.8.1	Distribuições de Diâmetros	261
3.8.1.1	Influência das Condições Impostas na Estrutura Local da Rede	261
3.8.1.2	Influência dos Parâmetros Estatísticos das Distribuições Iniciais.....	267
3.8.2	Distribuições de Comprimentos dos Canais	270
3.8.2.1	Influência da Estrutura da Rede	271
3.8.2.2	Influência dos Parâmetros Estatísticos das Distribuições Iniciais.....	273
3.9	Conclusões	275
4.	MODELIZAÇÃO E SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO	279
4.1	Introdução	279
4.2	Modelização do escoamento	282
4.2.1	Descrição do Modelo	283
4.2.2	Implementação do Modelo.....	285
4.3	Modelização da Hidrodinâmica dos Elementos da Rede.....	289
4.3.1	Modelização da Hidrodinâmica dos Canais.....	289
4.3.2	Modelização da Hidrodinâmica das Câmaras	293
4.3.2.1	Resistência das interligações em Regime Linear.....	294
4.3.2.2	Resistência das interligações em Regime Não Linear	295
4.3.2.3	Discussão dos Vários Modelos de Determinação de R_j^{ET}	298
4.3.3	Determinação da Resistência Associada a um Ramo	299
4.3.3.1	Modelo FRIC	300
4.3.3.2	Modelo ICAM.....	300
4.3.3.3	Comparação dos Modelos ICAM e FRIC.....	302
4.3.3.4	Influência dos Parâmetros da Rede.....	306
4.3.4	Cálculo do Vector de Fontes de Corrente	307
4.3.4.1	Rede com Distribuição Pontual de Tamanhos	308
4.4	Implementação do Algoritmo de Simulação.....	308
4.4.1	Caso geral.....	309
4.4.1.1	Questões na Implementação do Algoritmo de Simulação	312
4.4.2	Tratamento dos Resultados das Simulações	313
4.4.3	Rede Uniforme	316
4.4.3.1	Cálculo dos Parâmetros Conhecido o Valor de Caudal Volumétrico Total	323
4.4.3.2	Cálculo dos Parâmetros Conhecido o Valor da Queda de Pressão Total	325
4.4.3.3	Expressões teóricas dos parâmetros macroscópicos para redes uniformes	327
4.5	Análise de Sensibilidade	330
4.5.1	Análise dos Modelos para o Cálculo de R_j	331
4.5.2	Determinação das Constantes da Equação de MacDonald	336
4.5.2.1	Estratégia Baseada num Ajuste em Coordenadas Logarítmicas	337
4.5.2.2	Estratégia Baseada num Ajuste em Coordenadas lineares.....	339
4.5.2.3	Comparação das Estratégias de Determinação de A e B	340
4.5.3	Determinação das Dimensões da Rede Estatisticamente Válidas.....	343
4.5.3.1	Regime linear de escoamento	344
4.5.3.2	Regime não linear de escoamento.....	348
4.5.4	Influência das Características Estruturais da Rede	351
4.5.4.1	Influência do Tipo de Fronteiras da Rede.....	351
4.5.4.2	Influência da inclusão ou não canais horizontais.....	353
4.5.4.3	Influência do número de coordenação médio da rede.....	357

4.5.4.4	Influência do Valor do ângulo com a vertical	360
4.5.4.5	Influência do Valor do comprimento médio dos canais	361
4.5.5	Influência da Inclusão ou não das Calotes	362
4.5.6	Influência dos Parâmetros Estatísticos	364
4.5.6.1	Influência do Valor do Desvio Padrão	364
4.5.6.2	Influência de D e d	368
4.6	Análise de Sensibilidade do Modelo Geométrico	376
4.6.1	Análise de Sensibilidade dos Modelos T1 e T2	378
4.6.2	Análise de Sensibilidade dos Modelos T1S e T2S	382
4.6.3	Comparação entre Modelos Completos e Simplificados	387
4.7	Comparação com Correlações e Dados Experimentais	389
4.7.1	Validação do Modelo Proposto	391
4.7.2	Comparação com correlações publicadas	392
4.7.3	Comparação com Resultados Experimentais	398
4.8	Conclusões	407
5.	MODELIZAÇÃO DO TRANSPORTE DE MASSA	411
5.1	Introdução	411
5.2	Modelo para o transporte de massa	412
5.2.1	Descrição geral	412
5.2.2	Modelização do comportamento dos elementos da rede	413
5.2.2.1	Descrição do comportamento dos canais	413
5.2.2.2	Descrição do comportamento das câmaras	414
5.2.2.3	Modelo completo	416
5.3	Implementação do modelo de descrição do transporte de massa	420
5.3.1	Descrição geral	421
5.3.2	Resolução das equações de balanço material das câmaras	424
5.3.3	Estratégia implementada para tomar em conta os atrasos dos canais	426
5.3.3.1	Descrição geral	426
5.3.3.2	Análise do comportamento de uma rede simples	427
5.3.3.3	Extensão a uma rede geral	429
5.3.4	Crítérios de paragem do simulador de transporte de massa	430
5.3.5	Simplificação da resolução do sistema de equações diferenciais	432
5.3.5.1	Câmaras na linha de topo da rede	433
5.3.5.2	Redução do número de equações a resolver em alguns tipos de perturbações	433
5.3.6	Estrutura geral do simulador de transporte de massa	434
5.3.6.1	Dados necessários e preliminares	434
5.3.6.2	Discretização espacial dos canais	436
5.3.6.3	Implementação computacional do modelo	439
5.3.7	Tratamento e verificação dos resultados obtidos pelo simulador	440
5.3.7.1	Determinação das distribuições de tempos de residência	441
5.3.7.2	Validação dos resultados obtidos	444
5.3.7.3	Parâmetros qualitativos de caracterização do transporte de massa	446
5.3.8	Caso particular de rede uniforme	447
5.3.8.1	Determinação da distribuição de tempos de residência para uma rede uniforme	449
5.3.8.2	Determinação dos parâmetros que caracterizam a resposta de uma rede uniforme	450
5.3.8.3	Análise do comportamento de uma rede uniforme	457
5.4	Análise de sensibilidade	460

5.4.1	Análise do modelo proposto para a descrição do transporte de massa	463
5.4.1.1	Influência do tipo de perturbação na determinação da distribuição de tempos de residência	463
5.4.1.2	Exemplos de perturbações	467
5.4.1.3	Influência das condições fronteira à entrada da rede	470
5.4.1.4	Influência do passo de integração seleccionado	477
5.4.1.5	Influência da aplicação das condições de saturação nos elementos da rede	482
5.4.2	Influência das características do escoamento	490
5.4.2.1	Influência do regime de escoamento macroscópico na rede	490
5.4.2.2	Influência das constantes associadas a entradas e saídas de fluido nas câmaras	499
5.4.3	Influência das características da rede	501
5.4.3.1	Influência das dimensões da rede	502
5.4.3.2	Influência do tipo de fronteiras da rede	508
5.4.3.3	Rede uniforme versus rede não uniforme	512
5.4.3.4	Influência da distribuição de números de coordenação na rede	514
5.4.3.5	Outros parâmetros	520
5.4.4	Influência dos parâmetros das distribuições das dimensões características dos elementos da rede	521
5.4.4.1	Influência dos valores médios das distribuições das dimensões características dos elementos da rede	522
5.4.4.2	Influência dos valores do desvio padrão das distribuições das dimensões características dos elementos da rede	531
5.4.4.3	Influência do comprimento médio dos canais oblíquos	535
5.5	Comportamento previsto usando os modelos geométricos	539
5.5.1	Parâmetros adimensionais em função da porosidade	540
5.5.2	Comportamento previsto para o coeficiente de dispersão longitudinal	544
5.6	Comparação com dados experimentais	548
5.7	Conclusões	556
6.	CONCLUSÕES E SUGESTÕES DE TRABALHO FUTURO	561
6.1	Conclusões	561
6.1.1	Modelo de redes	561
6.1.2	Modelo hidrodinâmico	562
6.1.3	Transporte de massa	564
6.2	Sugestões de trabalho futuro	566
6.2.1	Modelo de redes	566
6.2.2	Simulador hidrodinâmico	568
6.2.3	Transporte de massa	569
7.	BIBLIOGRAFIA	573

Índice de Figuras

	Pág.
Figura 1.1 Organização da dissertação.....	3
Figura 2.1 Estado inicial e final de um enchimento de partículas após sinterização por compressão e/ou aquecimento (Sahimi, 1995).....	11
Figura 2.2 Exemplos de modelos de redes de capilares unidimensionais.....	17
Figura 2.3 Exemplos de redes bidimensionais – modelos de estrutura regular.	19
Figura 2.4 Exemplos de redes bidimensionais – modelos com estrutura irregular.....	21
Figura 2.5 Exemplos de modelos de redes tridimensionais regulares.....	22
Figura 2.6 Exemplos de modelos de redes tridimensionais irregulares.	22
Figura 2.7 Exemplos de modelos de tanques agitados.....	23
Figura 2.8 Exemplo de leito de enchimento formado a partir de esferas com uma distribuição de diâmetros.	28
Figura 2.9 Célula utilizada por Dodds e Lloyd (1971) no modelo de enchimento de esferas.....	32
Figura 2.10 Regimes de escoamento num meio poroso (Fand <i>et al.</i> , 1987).....	35
Figura 2.11 Evolução da zona de transição ao longo do meio poroso com o tempo (Fried e Combarnous, 1971).	89
Figura 2.12 Diferentes mecanismos de dispersão de partículas de tracer (Fried e Combarnous, 1971).	93
Figura 2.13 Regimes de dispersão em função do número de Peclet (Sahimi, 1995).	95
Figura 2.14 Evolução do perfil de concentrações num capilar em regime laminar; a) perturbação inicial b) sem difusão molecular; c) com difusão molecular (Kaviany, 1995).....	98
Figura 2.15 Zonas de validade das várias soluções aproximadas da equação geral de balanço material num tubo cilíndrico (Nigam e Saxena, 1986).....	106
Figura 3.1 Trajecto de uma partícula de fluido através dos dois tipos de leitos de placas estudados por Seguin <i>et al.</i> (1998a e 1998b): a) orientação das placas perpendicular ao sentido de escoamento; b) orientação das placas paralela ao sentido de escoamento.....	143
Figura 3.2 Leito bidimensional: a) esquema; b) esquema mostrando a rede de câmaras e canais; c) modelo de rede de poros.	147
Figura 3.3 Célula fundamental do modelo de redes.....	149
Figura 3.4 Tipos de redes fundamentais que podem ser gerados: a) com canais horizontais e com fronteiras periódicas; b) com canais horizontais e sem fronteiras periódicas; c) sem canais horizontais e com fronteiras periódicas; d) sem canais horizontais e sem fronteiras periódicas.....	150
Figura 3.5 Esquema da calote formada na junção entre uma câmara e um canal.....	152

Figura 3.6	Diferentes pares de canais que devem ser verificados para a não intersecção de canais para redes: a) sem canais horizontais; b) com canais horizontais.....	159
Figura 3.7	Estrutura local da rede de câmaras e canais: a) caso geral; b) limite superior, θ_{max} ; c) limite inferior, θ_{min} .	169
Figura 3.8	Valor mínimo e máximo de θ em função da razão L_o/D .	170
Figura 3.9	Representação esquemática dos casos limites de redes em função de θ para $L_o/D = 1$.	170
Figura 3.10	Razão l_h/l em função da razão $(D-2h)/l$.	171
Figura 3.11	Valor limite mínimo de θ para que $l_h/l_o > 0$ em função da razão $(D-2h)/l$.	172
Figura 3.12	Valores limites da razão d/D em função de θ .	173
Figura 3.13	Valores normalizados do comprimento e do volume das calotes esféricas.	174
Figura 3.14	Diagrama de fluxo implementado no gerador da rede.	175
Figura 3.15	Enchimentos regulares de esferas: a) CUB; b) ORT; c)HEX; d) TET; e) RBP; f) RBH.	178
Figura 3.16	Estrutura dos seis enchimentos regulares de esferas: a) CUB; b) ORT; c) HEX; d)TET; e) RBP; f) RBH.....	179
Figura 3.17	Tipos de faces existentes nos enchimentos regulares: a) face quadrada; b) face triangular.....	181
Figura 3.18	Células fundamentais para cada um dos enchimentos regulares.....	182
Figura 3.19	Obtenção da estrutura do enchimento ortorrômbo a partir da estrutura do enchimento cúbico.	183
Figura 3.20	Equivalência entre os enchimentos ortorrômbo e hexagonal.....	183
Figura 3.21	Obtenção do enchimento tetragonal por modificação da estrutura do enchimento hexagonal.	184
Figura 3.22	Obtenção de: a) enchimento romboédrico-hexagonal a partir do ortorrômbo; b) enchimento romboédrico-piramidal a partir do hexagonal.	184
Figura 3.23	Situações possíveis para o cálculo de D .	186
Figura 3.24	Valores (pontos) e correlação (linha) de K_D em função de ε .	187
Figura 3.25	Relação entre as distâncias entre filas de esferas e câmaras de uma rede para um enchimento cúbico.....	191
Figura 3.26	Diferentes estruturas geométricas existentes nos enchimentos regulares entre duas linhas de esferas contíguas.	192
Figura 3.27	Valores e curva de correlação de K_F em função da porosidade.	196
Figura 3.28	Curvas de correlação K_l em função de ε para quatro valores de θ - Modelo T1.....	197
Figura 3.29	Valores e curvas de correlação de K_d em função de ε para quatro valores típicos de θ - Modelo T1.....	200
Figura 3.30	Razão K_d/K_D para o Modelo T1 para diferentes valores de θ	201

Figura 3.31	Valores e curvas de correlação de K_d em função de ε para quatro valores de θ - Modelo T2.	202
Figura 3.32	Valores e curvas de correlação de K_l em função de ε para quatro valores de θ - Modelo T2.	203
Figura 3.33	Valores e curva de correlação de K_d em função de ε - Modelo T4.	206
Figura 3.34	Valores e curva de correlação de K_d em função de ε - Modelo T3.	207
Figura 3.35	Representação dos valores previstos de θ em função de ε para as duas expressões de tortuosidade propostas.	210
Figura 3.36	Valores calculados e curvas de correlação de K_l em função de ε para o modelo T1S.	211
Figura 3.37	Curvas de correlação de K_d em função de ε para o modelo T1S.	212
Figura 3.38	Valores calculados e curvas de correlação de K_d em função de ε para o modelo T2S.	213
Figura 3.39	Curvas de correlação K_l em função de ε para o modelo T2S.	213
Figura 3.40	Corte de um leito de enchimento de esferas com uma distribuição larga de diâmetros.	216
Figura 3.41	Comparação das curvas de correlação de K_d em função de ε para o modelo T3 com ou sem o valor do enchimento ortorrômbico.	219
Figura 3.42	Comparação das curvas de interpolação de K_d em função de ε para o modelo T1, para os valores limite de θ , com a inclusão ou não do enchimento ortorrômbico.	219
Figura 3.43	Comparação das curvas de interpolação de K_d em função de ε para o modelo T2, para os valores limite de θ com ou sem o valor do enchimento ortorrômbico.	220
Figura 3.44	Comparação das curvas de correlação de K_l em função de ε para o modelo T2 para os valores limites de θ , com e sem o valor do enchimento ortorrômbico.	221
Figura 3.45	Comparação das curvas de correlação de K_l em função de ε para o modelo T1 para os valores limites de θ , com e sem o valor do enchimento ortorrômbico.	222
Figura 3.46	Comparação das curvas de K_l em função de ε para o modelo T1S, usando as equações LM e CR.	223
Figura 3.47	Comparação das curvas de K_l em função de ε para o modelo T2S, usando as equações LM e CR.	224
Figura 3.48	Comparação das curvas de correlação de K_d em função de ε dos modelos T1 e T2 para os valores limites de θ	225
Figura 3.49	Comparação das curvas de correlação de K_l em função de ε dos modelos T1 e T2 para os valores limites de θ	226

Figura 3.50	Comparação das curvas de correlação de K_d em função de ε obtidos pelos modelos T1S e T2S, usando a equação LM.	226
Figura 3.51	Comparação das curvas de correlação de K_d em função de ε obtidos pelos modelos T1S e T2S, usando a equação CR.	227
Figura 3.52	Comparação das curvas de correlação de K_l em função de ε obtidos pelos modelos T1S e T2S, usando a equação LM.	228
Figura 3.53	Comparação das curvas de correlação de K_l em função de ε obtidos pelos modelos T1S e T2S, usando a equação CR.	228
Figura 3.54	Comparação das curvas de correlação de K_d em função de ε para o modelo T2 completo e simplificado, usando quatro valores de típicos de θ . Curvas a cheio correspondem aos valores determinados pelo modelo T2S.	229
Figura 3.55	Comparação das curvas de correlação de K_l em função de ε para o modelo T2 completo e simplificado, para quatro valores típicos de θ	231
Figura 3.56	Valores da razão entre K_d e K_D para o modelo T2, para $\theta = \pi/4$	232
Figura 3.57	Valores da razão entre K_d e K_D para o modelo T2, para $\theta = \pi/3$	233
Figura 3.58	Comparação da razão K_d/K_D limite e as previsões dos modelos T1S e T2S usando a equação LM.	234
Figura 3.59	Comparação da razão K_d/K_D limite as previsões dos modelos T1S e T2S usando a equação CR.	235
Figura 3.60	Distribuições dos diâmetros das câmaras e dos canais para $d/D = 0.25$	243
Figura 3.61	Distribuições dos diâmetros das câmaras e dos canais para $d/D = 0.75$	243
Figura 3.62	Valores de E_R em função de N_y para diferentes valores de N_x	245
Figura 3.63	Valores de E_R em função de N_y para diferentes valores de N_x	245
Figura 3.64	Comparação das razões dos valores de E_R e do número de canais de rede tipo 10 e 00 em função de N_y , para $N_x = 200$	247
Figura 3.65	Comparação das razões dos valores de E_R e do número de canais de rede tipo 11 e 10 em função de: a) N_y , para $N_x = 200$; b) N_x , para $N_y = 200$	248
Figura 3.66	Comparação dos valores previstos de E_R em função de N_y , para $N_x = 200$, e redes tipo 00 e 10.	248
Figura 3.67	Comparação dos valores previstos de E_R em função de N_y , para $N_x = 200$ e redes tipo 10 e 11.	249
Figura 3.68	Comparação dos valores de E_R previstos em função de N_y , E_R para redes tipo 10, $N_x = 200$ e quatro valores de θ	250
Figura 3.69	Comparação dos valores previstos de E_R em função de N_y para redes tipo 10, $N_x = 200$, e quatro valores de θ , considerando a restrição de não-intersecção.	251

Figura 3.70	Comparação dos valores previstos de E_R em função de N_x com $N_y = 100$, para redes com $C = 4$, com e sem remoção de canais e/ou câmaras.	252
Figura 3.71	Comparação dos valores previstos de E_R em função de N_x com $N_y = 100$, para três valores de C , sem e com remoção de canais.	253
Figura 3.72	Comparação dos valores previstos de E_R para redes com e sem a inclusão das calotes usando distribuições pontuais para redes tipo 11, em função de: a) N_y para $N_x = 200$; b) N_x para $N_y = 200$	254
Figura 3.73	Comparação dos valores previstos de E_R para redes com e sem a inclusão das calotes usando distribuições pontuais para redes tipo 10, em função de: a) N_y para $N_x = 200$; b) N_x para $N_y = 200$	255
Figura 3.74	Comparação dos valores previstos de E_R para redes com e sem a inclusão das calotes usando distribuições não pontuais em função de N_y para $N_x = 200$	255
Figura 3.75	Comparação das curvas de E_R em função de N_y para diferentes conjuntos de valores dos desvios padrão, para as mesmas condições dos resultados apresentados na Figura 3.62.	257
Figura 3.76	Comparação das curvas de E_R em função de N_y para diferentes conjuntos de valores dos desvios padrão, usando a restrição de não intersecção, para rede tipo 11.	258
Figura 3.77	Comparação das curvas de E_R em função de N_y para três valores de d/D , usando a restrição $d_j < D_i$, para redes tipo 11 para: a) desprezando as calotes; b) incluindo as calotes.	259
Figura 3.78	Comparação das curvas de E_R em função de N_y para três valores de d/D , usando a restrição de não intersecção, para redes tipo 11.	259
Figura 3.79	Comparação das distribuições de diâmetros dos canais para redes tipo 10 e 11 quando se assume apenas a restrição $d_j < D_i$ ao nível local.	262
Figura 3.80	Comparação das distribuições de diâmetros dos canais redes tipo 10 e 11, para a restrição $d_j < D_i$	262
Figura 3.81	Comparação entre as distribuições iniciais e finais do diâmetros das câmaras para as duas restrições entre os valores de D_i e d_j para redes tipo 10 e $d/D = 0.75$	263
Figura 3.82	Comparação das distribuições iniciais e finais do diâmetros dos canais para as duas restrições entre os valores de D_i e d_j	264
Figura 3.83	Comparação das distribuições iniciais e finais do diâmetros das câmaras e dos canais quando são usadas as restrições de não intersecção: a) $f_D(D_i)$; b) $f_d(d_j)$	265
Figura 3.84	Comparação das distribuições iniciais e finais do diâmetros das câmaras e dos canais para redes tipo 11, quando se utiliza a restrição de não intersecção dos	

	canais à entrada de uma câmara, para dois valores de θ a) $f_D(D_j)$, b) $f_d(d_j)$	265
Figura 3.85	Comparação das distribuições iniciais e finais do diâmetros das câmaras e dos canais para redes tipo 11, quando se utiliza a restrição de não intersecção dos canais à entrada de uma câmara, para dois valores de θ a) $f_D(D_j)$, b) $f_d(d_j)$	266
Figura 3.86	Comparação entre as distribuições iniciais e alteradas do diâmetros de canais, considerando apenas a restrição $d_j < D_i$, em função de: a) σ_D para $\sigma_d = 0.20$; b) σ_d para $\sigma_D = 0.20$	268
Figura 3.87	Comparação entre as distribuições iniciais e modificadas do diâmetro das câmaras em função de d/D , considerando as restrições de não intersecção, para: a) $\theta = \pi/4$; $\theta = \pi/3$	269
Figura 3.88	Comparação entre as distribuições iniciais e modificadas do diâmetro dos canais em função de d/D , considerando as restrições de não intersecção, para $\theta = \pi/4$	269
Figura 3.89	Comparação entre as distribuições iniciais e modificadas do diâmetro dos canais em função de d/D , considerando as restrições de não intersecção, para $\theta = \pi/3$	270
Figura 3.90	Distribuições de $f_l(l_j _o)$ e $f_l(l_j _h)$ para vários de θ para redes tipo 11 usando a restrição $d_j < D_i$: a) sem influência das calotes; b) com a influência das calotes.	272
Figura 3.91	Distribuições dos comprimentos dos canais horizontais e oblíquos para diferentes tipos de restrições impostas entre os diâmetros das câmaras e dos canais associados entre si.....	273
Figura 3.92	Influência dos valores dos desvio padrão das distribuições $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ quando se utiliza a restrição $d_j < D_i$ na distribuição $f_l(l_j _o)$	274
Figura 3.93	Influência dos valores dos desvio padrão das distribuições $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ quando se utiliza a restrição $d_j < D_i$ na distribuição $f_l(l_j _h)$	275
Figura 3.94	Influência dos valores dos desvio padrão das distribuições $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ quando se utilizam as restrições de não intersecção na distribuição $f_l(l_j _o)$	275
Figura 4.1	Análogo eléctrico usado na descrição do escoamento: a) circuito eléctrico equivalente a uma rede com canais horizontais e fronteiras periódicas; b) analogia para o escoamento num canal.	283
Figura 4.2	Esquema de um canal genérico da rede, com definição dos eixos coordenados e das variáveis mais importantes na descrição do escoamento através deste.	290
Figura 4.3	Comparação das curvas de f_j em função de Re_j na zona de transição para as duas formas de aproximação propostas.	293

Figura 4.4	Representação esquemática da resistência de um ramo e análogo eléctrico utilizado.....	294
Figura 4.5	Valores previstos de $\sum K_j$ em função de ε para os modelos simplificados T1S e T2S.....	297
Figura 4.6	Curvas de resistência associadas a um ramo, R_j , em função do número de Reynolds do canal, Re_j , para os modelos FRIC e ICAM, variando $\sum K_j$ neste último modelo.	304
Figura 4.7	Curvas do factor de fricção equivalente, f_{eq} , em função do número de Reynolds do canal, Re_j , para os modelos FRIC e ICAM, variando $\sum K_j$ neste último modelo.	305
Figura 4.8	Diagrama de fluxo do algoritmo geral implementado.....	311
Figura 4.9	Exemplo de uma câmara e do respectivo análogo eléctrico com dois canais na linha de entrada do fluido na rede.	317
Figura 4.10	Estrutura local da rede e análogo eléctrico utilizado para mostrar que os caudais nos canais de entrada são todos iguais.	318
Figura 4.11	Estrutura simplificada da rede de câmaras e canais utilizada para determinar a influência dos canais horizontais no escoamento através de uma rede uniforme.	319
Figura 4.12	Rede com uma linha de câmaras.....	321
Figura 4.13	Comparação das curvas de ΔP_T em função de q_T entre os modelos FRIC e ICAM.	332
Figura 4.14	Comparação das curvas de $\Delta P_T/L_x q_T$ em função de q_T para os para os modelos ICAM e FRIC.	333
Figura 4.15	Comparação das curvas de F_v em função de Re^* para os modelos ICAM e FRIC.....	334
Figura 4.16	Comparação das curvas de F^* em função de Re^* para os para os modelos ICAM e FRIC.....	335
Figura 4.17	Comparação das duas estratégias de determinação das constantes A e B da equação de MacDonald para o modelo ICAM, para as curvas de F^* em função de Re^* , na zona não linear de escoamento.	337
Figura 4.18	Comparação das duas estratégias de determinação das constantes A e B da equação de MacDonald para o modelo ICAM para valores elevados de Re^* , para as curvas de F^* versus Re^*	338
Figura 4.19	Comparação das duas estratégias de determinação das constantes A e B da equação de MacDonald para o modelo ICAM, com base na representação de F_v versus Re^*	339
Figura 4.20	Comparação entre os dados experimentais e os valores previstos para duas formas de representação consideradas neste trabalho.	341
Figura 4.21	Ajuste linear para a determinação de B e dos valores de F_v correspondentes a valores de Re^* elevados.....	342

Figura 4.22	Curvas de permeabilidade, k , em função de N_y para quatro valores de N_x ...	345
Figura 4.23	Comparação das curvas dos valores médios de k em função de N_y para quatro valores de N_x	346
Figura 4.24	Curvas da permeabilidade k , em função de N_x para quatro valores típicos de N_y	347
Figura 4.25	Comparação das curvas dos valores médios da permeabilidade em função de N_y para quatro valores de N_x	348
Figura 4.26	Distribuição das velocidades nos canais da rede para escoamento linear e não linear para redes com as mesmas características geométricas: a) $d/D = 0.5$; b) $d/D = 0.75$	350
Figura 4.27	Comparação das curvas dos valores médios de k para redes de tipo 00 e 10 em função de N_y para $N_x = 50$ e $N_x = 100$, para redes com e sem fronteiras periódicas.....	352
Figura 4.28	Distribuições de velocidades nos canais oblíquos e horizontais para redes tipo 11 (com canais horizontais) e redes tipo 10 (sem canais horizontais).....	354
Figura 4.29	Comparação das curvas dos valores médios de k para redes do tipo 10 e 11 em função de N_x para dois valores constantes de N_y , para redes com e sem canais horizontais, usando apenas o critério $d_j < D_i$	355
Figura 4.30	Comparação das curvas dos valores médios de k para redes do tipo 10 e 11 em função de N_x para dois valores constantes de N_y , para redes com e sem canais horizontais, usando os critérios de não intersecção.....	356
Figura 4.31	Razão k_C/k_6 para remoção só de câmaras, remoção só de canais e remoção só de canais horizontais.....	358
Figura 4.32	Comparação das curvas dos valores médios de k para redes tipo 10 considerando a restrição de não intersecção em função de N_y para quatro valores de θ	361
Figura 4.33	Comparação das curvas dos valores médios de k para redes tipo 11 e três valores de d/D usando a restrição de $d_j < D_i$ em função de N_y , considerando ou não o volume das calotes.....	363
Figura 4.34	Comparação das curvas dos valores previstos de k em função de N_y , para redes tipo 11 e diferentes conjuntos de valores de desvio padrão, usando a restrição $d_j < D_i$	365
Figura 4.35	Comparação das curvas dos valores previstos de k em função de N_y para redes tipo 11, para diferentes conjuntos de valores dos desvio padrão, usando as restrições de não intersecção.....	366
Figura 4.36	Comparação das curvas de k em função de N_y , para três valores de N_x em redes tipo 11, usando dois conjuntos de valores de σ_D e σ_d : a) $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$; b) $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$	367

Figura 4.37	Comparação das curvas de k em função de N_y , para três valores de N_x , em redes tipo 00 com $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$	368
Figura 4.38	Comparação das curvas dos valores médios de k em função de N_y , em redes tipo 11 e três valores de d/D para a restrição $d_j < D_i$ (pontos cheios) e para as restrições de não intersecção (pontos vazios).	370
Figura 4.39	Comparação das curvas dos valores médios de k em função de N_y para redes tipo 11 e usando três valores de d/D usando as restrições de não intersecção.	371
Figura 4.40	Comparação dos valores teóricos e previstos pelo simulador de escoamento da permeabilidade para D constante ou d constante, para dois pares de valores de σ_D e σ_d	372
Figura 4.41	Comparação dos valores teóricos e previstos pelo simulador de escoamento da permeabilidade para D constante ou d/D constante, para dois pares de valores de σ_D e σ_d	374
Figura 4.42	Curvas de F^* em função de Re^* para dois valores de d/D , sendo considerados dois pares de valores de D e d para cada d/D	375
Figura 4.43	Influência de θ nas curvas de F_v em função de Re^* previstas pelo modelo T1 para dois valores de θ	379
Figura 4.44	Comparação dos valores previstos pelo modelo T1 das constantes A e B em função de θ para vários valores de porosidade.	380
Figura 4.45	Comparação dos valores previstos pelo modelo T2 das constantes A e B em função de θ para vários valores de porosidade.	381
Figura 4.46	Comparação dos valores previstos pelos dois modelos completos, das constantes A e B em função de θ , para vários valores de porosidade. Valores previstos pelo modelo T1 a cheio e valores previstos pelo modelo T2 a interrompido.	381
Figura 4.47	Comparação das curvas de F_v em função de Re^* para o modelo T1S, em função de ε e para as duas expressões $\theta = f(\varepsilon)$ consideradas.....	383
Figura 4.48	Comparação das curvas de F_v em função de Re^* para o modelo T2S, em função de ε e para as duas expressões $\theta = f(\varepsilon)$ consideradas.....	383
Figura 4.49	Comparação dos valores das constantes da equação de MacDonald previstas pelo modelo T1S usando as duas equações de $\theta = f(\varepsilon)$ propostas.....	384
Figura 4.50	Comparação dos valores das constantes da equação de MacDonald previstas pelo modelo T2S, usando as duas equações de $\theta = f(\varepsilon)$ propostas.....	385
Figura 4.51	Comparação dos valores previstos de A e B em função da porosidade para os modelos T1S e T2S usando a equação LM.	386
Figura 4.52	Comparação dos valores previstos de A e B em função da porosidade para os modelos T1S e T2S usando a equação CR.	387
Figura 4.53	Comparação dos valores previstos das constantes A e B pelos modelos T1 e T1S tendo-se usado a equação LM no modelo simplificado.	388

Figura 4.54	Comparação dos valores previstos das constantes A e B pelos modelos T2 e T2S tendo-se usado a equação LM no modelo simplificado.....	388
Figura 4.55	Comparação dos valores previstos de k pela Equação 4.69 com os obtidos pelo simulador hidrodinâmico em função de ε , para dois valores de θ . Pontos correspondem aos valores previstos pelo modelo.....	392
Figura 4.56	Valores das constantes A e B em função da porosidade previstas pelas quatro correlações consideradas neste trabalho.....	394
Figura 4.57	Valores de A e B previstos pelo modelo T2S usando a Equação CR de A e B em função de ε , e vários valores de $\sum K_j$ considerados no cálculo de B	395
Figura 4.58	Valores previstos de $\sum K_j$ em função da porosidade para o modelo T1S usando a equação LM, para redes: a) tipo 10; b) tipo 11.....	396
Figura 4.59	Comparação dos valores previstos de $\sum K_j$ em função da porosidade para o modelo T1S usando a equação CR e redes tipo 11.....	397
Figura 4.60	Comparação entre os valores previstos de $\sum K_j$ em função da porosidade para o modelo T2S usando a equação CR e redes tipo 11.....	398
Figura 4.61	Comparação entre os valores previstos pelo simulador hidrodinâmico e o conjunto de dados experimentais KIM2 para o modelo T2S em função de C e $\sum K_j$	407
Figura 5.1	Exemplo de câmara da rede, sem canais horizontais, com dois canais de entrada e dois canais de saída de fluido. Os sentidos de escoamento nos canais em relação à câmara são apresentados.....	414
Figura 5.2	Algoritmo implementado para a resolução do sistema de equações de balanço material nas câmaras da rede.....	425
Figura 5.3	Evolução da concentração de traçador numa rede formada por duas câmaras e dois canais.....	428
Figura 5.4	Algoritmo de actualização dos valores de concentração de traçador nos canais da rede.....	438
Figura 5.5	Blocos principais do diagrama de fluxo do modelo de transporte de massa, tomando-se em conta o tempo de simulação.....	440
Figura 5.6	Resposta típica do modelo de redes a uma perturbação em degrau espacialmente uniforme, com indicação da área cujo valor é igual a $C_0\tau_G$	445
Figura 5.7	Rede uniforme 4x4 e rede equivalente a usar na descrição do transporte de massa.....	448
Figura 5.8	Valores de Θ_B previstos em função da razão τ_j/τ_i^* , para vários valores de N_x	453
Figura 5.9	Erro percentual cometido ao estimar o valor de Pe em função de N_x usando as Equações 5.63 e 5.64.....	456
Figura 5.10	Valores de Pe previstos para a rede uniforme em função de γ para diferentes valores de N_x	457

Figura 5.11	Curvas da distribuição de tempos de residência adimensional em função de γ , para: a) $N_x = 10$; b) $N_x = 30$	459
Figura 5.12	Comparação das $E(\Theta)$ previstas e diferença percentual da resposta da rede a uma perturbação em degrau e em impulso para as mesmas características geométricas da rede e de escoamento.	464
Figura 5.13	Comparação das curvas da distribuição de tempos de residência adimensional obtidas para perturbações em degrau com diferentes valores de C_p	466
Figura 5.14	Comparação das respostas não normalizadas a perturbações em degrau com diferentes valores de C_p	467
Figura 5.15	Evolução espacial e temporal do perfil de concentrações na rede após a imposição de uma perturbação pontual de soluto na rede.....	468
Figura 5.16	Evolução espacial e temporal do perfil de concentrações na rede após a imposição de um pulso na concentração de entrada de soluto na rede	469
Figura 5.17	Comparação entre as respostas obtidas pelo simulador de transporte de massa para perturbações de traçador em pulso, para diferentes durações, e uma perturbação em degrau	470
Figura 5.18	Distribuições de tempos de residência normalizadas considerando os dois tipos de condições fronteira em função de d/D para redes 5×20 com $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$	472
Figura 5.19	Diferença percentual entre as curvas F adimensionais previstas pelo simulador de transporte de massa para três valores da razão entre os valores médios das câmaras e dos canais.	474
Figura 5.20	Diferença percentual em função dos valores de σ_D e σ_d usando as duas formas de condições fronteiras à entrada da rede para redes 10×20 e $d/D = 0.5$	475
Figura 5.21	Diferença percentual entre os números de Peclet previstos considerando os dois tipos de condições fronteira, em função de N_x para 3 valores de d/D e redes com $N_y = 30$, para $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$..	476
Figura 5.22	Distribuições de tempos de residência obtidas para diferentes valores de Δt para uma rede 20×30 , $d/D = 0.5$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$	479
Figura 5.23	Distribuições de tempos de residência obtidas para diferentes valores de Δt para uma rede 20×30 , com fronteiras periódicas sem canais horizontais para $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$	480
Figura 5.24	Valores de Θ_B em função de Δt para três valores de d/D em redes 20×30 com $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$	481
Figura 5.25	Erro observado no balanço material observado para perturbações em degrau uniforme para três valores de d/D em redes 20×30 com $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$	482
Figura 5.26	Desvio percentual do erro cometido no balanço material em relação ao caso em que não é considerada a saturação dos elementos da rede, para vários valores de $F_{\min}$ e de combinações de valores de σ_D e σ_d	483

Figura 5.27	Comparação entre as curvas de $F(t)$ obtidas para diferentes valores de $F_{\min}$ nas condições das simulações apresentadas na Figura 5.26.	484
Figura 5.28	Desvio percentual do erro cometido no balanço material em relação ao caso em que não é considerada a possível saturação dos elementos da rede, para vários valores de d/D , usando $F_{\min} = 10^{-8}$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$	485
Figura 5.29	Número de linhas activas normalizado por N_x em função do tempo adimensional de simulação para diferentes valores de N_x , para redes com $N_y = 10$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$	487
Figura 5.30	Número de linhas activas em função do tempo adimensional de simulação para diferentes valores de N_x , em redes com $N_y = 10$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$	488
Figura 5.31	Número de linhas activas normalizada por N_x em função do tempo adimensional de simulação para redes 100x30, para diferentes d/D , σ_D e σ_d	489
Figura 5.32	Distribuições de tempos de residência normalizadas para diferentes regimes de escoamento em redes 20x20, $d/D = 0.5$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$	492
Figura 5.33	Comparação das curvas de F_V , Pe^* e Θ_B^* em função de Re^*	493
Figura 5.34	Comparação das curvas de Pe e Θ_B em função de Re^* para três valores de d/D . Símbolos a cheio representam valores de Pe e restantes símbolos representam valores de Θ_B	494
Figura 5.35	Comparação das curvas de Pe e Θ_B em função de Re^* para diferentes valores de σ_D e σ_d : a) Pe ; b) Θ_B	495
Figura 5.36	Curvas da razão entre o coeficiente de dispersão longitudinal e a difusividade molecular em função do número de Peclet molecular	497
Figura 5.37	Comparação das curvas da $E(\Theta)$ previstas pelo simulador de transporte de massa para vários valores de $\sum K_j$, para redes 20x20, $d/D = 0.5$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$	500
Figura 5.38	Comparação das curvas da $F(t)$ previstas pelo simulador de transporte de massa para vários valores de $\sum K_j$, para redes 20x20, $(d/D) = 0.5$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$	501
Figura 5.39	Comparação das curvas de $E(\Theta)$ em função de N_x para redes com $N_y = 30$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$	504
Figura 5.40	Comparação dos valores previstos de Pe em função de N_x para redes uniformes e não uniformes com diferentes valores de desvio padrão das distribuições das dimensões características dos elementos da rede.....	505
Figura 5.41	Comparação das respostas não normalizadas da rede em função do tempo para redes com $N_y = 30$ para vários valores de N_x	505

Figura 5.42	Comparação dos valores de Pe^* e Θ_B^* previstos em função de N_x para N_y constante: a) Pe ; b) Θ_B .	506
Figura 5.43	Valores de D_L e α em função de N_x para N_y constante.	507
Figura 5.44	Comparação das respostas normalizadas para uma perturbação em degrau em função de Θ para os dois tipos de fronteiras.	509
Figura 5.45	Comparação da evolução do perfil de concentrações em redes com e sem fronteiras periódicas, para a mesma perturbação considerada na Figura 5.44: a) sem fronteiras periódicas; b) com fronteiras periódicas.	510
Figura 5.46	Diferença percentual entre os números de Peclet previstos para os dois tipos de fronteiras da rede, em função de N_x para 3 valores de d/D e redes com $N_y = 30$, para $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$.	511
Figura 5.47	Comparação das curvas de Peclet e do tempo de breakthrough adimensional normalizados em função do número de Re^* para vários valores de d/D : a) Pe vs. Re^* ; b) Θ_B^* vs. Re^* .	513
Figura 5.48	Comparação das curvas de Peclet e do tempo de breakthrough adimensional normalizados em função do número de Re^* para dois conjuntos de valores de desvio padrão: a) Pe vs. Re^* ; b) Θ_B^* vs. Re^* .	514
Figura 5.49	Comparação das distribuições de valores α_j^E e α_j^O para redes 100×100 , $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$ e $d/D = 0.5$.	516
Figura 5.50	Distribuições de valores de α_j^E para redes tipo 11 (com canais horizontais) e tipo 10 (sem canais horizontais): a) completa; b) sem os valores associados aos canais horizontais.	516
Figura 5.51	Distribuições dos tempos de passagem para redes tipo 11 (com canais horizontais) e tipo 10 (sem canais horizontais): a) τ_i ; b) τ_j .	518
Figura 5.52	Distribuições de valores de α_j^E para redes tipo 11 (com canais horizontais) e tipo 10 (sem canais horizontais): a) completa; b) sem os valores associados aos canais horizontais.	519
Figura 5.53	Influência de d/D nas distribuições de tempo de residência do traçador na rede após a aplicação de uma perturbação em degrau.	523
Figura 5.54	Comparação dos valores de Pe e Θ_B em função de d/D para os resultados apresentados na Figura 5.53.	525
Figura 5.55	Comparação dos valores de Pe e Θ_B ; em função de d/D para dois conjuntos de valores de σ_D e σ_d .	526
Figura 5.56	Valores de Pe em função de α variando d/D para os dois casos possíveis.	527
Figura 5.57	Valores de D_L em função de α variando d/D para D variável mantendo d constante, e d variável mantendo D constante.	529
Figura 5.58	Valores de Pe e θ_B em função de γ . Curvas a cheio representam as previsões do modelo para redes uniformes.	530

Figura 5.59	Comparação das distribuições das velocidades nos canais oblíquos para dois conjuntos de valores dos desvios padrão das distribuições das dimensões características dos elementos da rede: a) escoamento linear; b) escoamento não linear.	532
Figura 5.60	Comparação da evolução do perfil de concentrações em redes com diferentes valores de desvio padrão: a) valores baixos; b) valores elevados.....	534
Figura 5.61	Comparação das distribuições de valores de α_j^E para diferentes valores de σ_D e σ_d , para redes 100×100 tipo 10 com $d/D = 0.5$	535
Figura 5.62	Distribuições de tempos de residência normalizadas para redes 20×30, com $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$, para vários valores de l	536
Figura 5.63	Curvas $F(t)$ correspondentes às distribuições de tempos de residência apresentadas na Figura 5.62.....	537
Figura 5.64	Valores de: a) o número de Peclet normalizado; b) tempo de breakthrough adimensional normalizado; em função de N_x para três valores de l_0	538
Figura 5.65	Valores de: a) o número de Peclet; b) tempo de breakthrough normalizado; em função de N_x para três valores de l_0	539
Figura 5.66	Número de Peclet dividido pelo número de linhas de câmaras da rede em função da porosidade para: a) modelo T1S; b) modelo T2S; para as duas equações de $T(\varepsilon)$ consideradas neste trabalho.....	542
Figura 5.67	Comparação dos valores previstos do número de Peclet dividido pelo número de linhas de câmaras da rede em função da porosidade pelos modelos T1S e T2S para: a) equação LM; b) equação CR.....	543
Figura 5.68	Valores do tempos adimensional de Breakthrough em função da porosidade para: a) modelo T1S; b) modelo T2S; para as duas equações de $T(\varepsilon)$ consideradas neste trabalho.	544
Figura 5.69	Valores de coeficiente de dispersão longitudinal em função da dimensão segundo o sentido principal do escoamento para o modelo T2S usando a equação LM.	545
Figura 5.70	Valores de A_p em função da porosidade para: a) modelo T1S; b) modelo T1S; usando as duas equações de $T(\varepsilon)$ consideradas neste trabalho.....	547
Figura 5.71	Valores de χ em função de ε usando o modelo T2S e a Equação CR para a tortuosidade para: pontos dados experimentais de Xu e Eckstein (1997); linha correlação de dados experimentais descrita em Sahimi (1995).....	554

Índice de Tabelas

	Pág.
Tabela 2.1 Valores típicos de permeabilidade para vários materiais porosos (Kaviany, 1995).....	39
Tabela 3.1 Nomenclatura usada para descrever as redes fundamentais geradas.....	151
Tabela 3.2 Expressões para o cálculo do número de canais, $N_{Can} = N_{Can}^O + N_{Can}^H$, do número de calotes, N_{Cal} , e do número de coordenação médio, C	156
Tabela 3.3 Critérios de não intersecção de canais à entrada de uma câmara.	160
Tabela 3.4 Relações limite da razão d/D para redes uniformes.	172
Tabela 3.5 Valores de ε para cada um dos enchimentos regulares.	179
Tabela 3.6 Número de faces para cada um dos enchimentos regulares de esferas.....	185
Tabela 3.7 Classificação dos modelos propostos para a determinação dos valores médios dos parâmetros da rede.....	190
Tabela 3.8 Valores de K_F para os vários tipos de estrutura geométrica entre linhas.	193
Tabela 3.9 Número de casos diferentes e valor da média pesada de K_F para cada um dos enchimentos regulares.	194
Tabela 3.10 Valores de K_F para os quatro enchimentos regulares.....	195
Tabela 3.11 Valores de N_{can}^{eq} , N_{cam}^{eq} , N_{cal}^{eq} e K_{Cel} para cada uma das células fundamentais dos enchimentos regulares.	198
Tabela 3.12 Constantes dos funções de correlação de K_d em função de θ - Modelo T1....	200
Tabela 3.13 Constantes das funções de correlação de K_d em função de θ - Modelo T2....	203
Tabela 3.14 Constantes dos polinómios de interpolação de K_l em função de θ - Modelo T2.	204
Tabela 4.1 Valores médios dos parâmetros utilizados no caso de estudo.	303
Tabela 4.2 Cálculo de ΔP_T para o modelo FRIC em função do regime de escoamento nos canais.....	324
Tabela 4.3 Cálculo de ΔP_T para o modelo ICAM em função do regime de escoamento nos canais.	325
Tabela 4.4 Expressões das constantes a_1 , a_2 , a_3 e a_4 para o modelo FRIC.....	326
Tabela 4.5 Expressões das constantes a_1 , a_2 , a_3 e a_4 para o modelo ICAM.	327
Tabela 4.6 Valores de A e B determinados pelo método dos mínimos quadrados.....	342
Tabela 4.7 Valores experimentais e previstos pelo modelo para K_s dos leitos de enchimento regulares RBP e CUB.....	401

Tabela 4.8	Características dos leitos de enchimento considerados e valores médios previstos pelo modelo T2S para as dimensões características dos elementos da rede equivalente.	403
Tabela 4.9	Valores experimentais e calculados da permeabilidade e das constantes da Equação de MacDonald para o modelo T2S usando a Equação CR.	404
Tabela 5.1	Comparação dos números de Peclet previstos considerando os dois tipos de condições fronteira, em função de d/D para redes 5×20 com $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$	473
Tabela 5.2	Valores das constantes da relação $D_L/D_M = A_L Pe_M^n$ para os três valores de d/D considerados na Figura 5.36.	497
Tabela 5.3	Condições e resultados experimentais de Montillet et al. (1993), e valores previstos de α_L	550

Índice Geral – Apêndices Capítulo 3 (em CD)

	Pág.
A. APÊNDICES DO CAPÍTULO 3.....	613
A.1 Introdução	613
A.2 Determinação dos Valores Médios das Distribuições de Tamanhos.....	614
A.2.1 Introdução	614
A.2.2 Determinação do valor médio do diâmetro das câmaras	614
A.2.3 Determinação do valor do diâmetro médio dos canais	618
A.3 Determinação do Número de Câmaras, Canais e Calotes	621
A.3.1 Introdução	621
A.3.2 Determinação do Número de Câmaras	622
A.3.3 Determinação do Número Total de Canais	622
A.3.4 Determinação do Número Total de Calotes.....	623
A.3.4.1 Rede Tipo 11	624
A.3.4.2 Rede Tipo 01	625
A.3.4.3 Rede Tipo 10	626
A.3.4.4 Rede Tipo 00	626
A.3.5 Influência do número total de elementos da rede no valor da espessura equivalente da rede.....	627
A.3.6 Determinação do Número de Coordenação Médio.....	630
A.4 Funções Densidade de Probabilidade	631
A.4.1 Distribuição ULLN	632
A.4.2 Análise da Função ULLN	634
A.4.2.1 Análise de sensibilidade	634
A.4.2.2 Estudo da Função ULLN	636
A.4.3 Implementação das Funções Densidade de Probabilidade	638
A.5 Notas sobre a Inclusão das Calotes na Geração da Rede.....	639
A.5.1 Determinação do Comprimento da Calote	640
A.5.2 Determinação do Volume da Calote	641
A.6 Determinação dos Critérios de Não Intersecção.....	642
A.6.1 Critério A1	643
A.6.2 Critérios A2 e A3	644

Índice Figuras – Apêndices Capítulo 3 (em CD)

Pág.

Figura A.1	Célula fundamental do leito regular cúbico.	615
Figura A.2	Diagramas usados para a determinação de D : a) triângulo rectângulo que define a distância entre vértices opostos de faces paralelas da célula fundamental; b) vista de cima que permite definir o valor de b	616
Figura A.3	Estrutura da célula fundamental do leito ORT que serve de base à determinação de D	617
Figura A.4	Face quadrada definida por quatro esferas tangentes entre si.	617
Figura A.5	Tipos de faces presentes nas células fundamentais dos leitos de enchimento regulares de esferas: a) face quadrada; b) face triangular.....	619
Figura A.6	Diagramas usados para determinar d associado a uma face triangular: a) posição do centro do canal; b) triângulo rectângulo definido para a determinação do valor de d	620
Figura A.7	Estudo de sensibilidade do parâmetro A na distribuição ULLN, para: $\mu = 1$, $\delta = 1$ e $F_{Max} = 10$	635
Figura A.8	Estudo de sensibilidade do parâmetro δ na distribuição ULLN, para $\mu = 1$, $A = 2$ e $F_{Max} = 10$	635
Figura A.9	Estudo de sensibilidade do parâmetro F_{Max} na distribuição ULLN, para $\mu = 1$, $A = 2$ e $\delta = 1$	636
Figura A.10	Influência de δ na validade da Equação A.45, para $\mu = 1$ e dois valores de F_{Max} : 2.5 e 10.	638
Figura A.11	Ramo da rede, mostrando as zonas de ligação entre um canal e as câmaras nos extremos deste.	639
Figura A.12	Diagramas usados para o cálculo de h_{ij}	640
Figura A.13	Área definida pela entrada de um canal numa câmara, que serve de base à determinação do volume da calote.	641
Figura A.14	Caso limite para a intersecção de dois canais à entrada de uma câmara, para um par de canais em que se deve verificar o critério A1.....	643
Figura A.15	Exemplo de pares de canais em que se aplica o critério A1.	643
Figura A.16	Ângulo formado pela entrada de um canal de diâmetro d_j na câmara de diâmetro D_i	644
Figura A.17	Exemplos de pares de canais em que se aplica: a) critério A2; b) Critério A3.	645

Índice Geral – Apêndices Capítulo 4 (em CD)

	Pág.
B. APÊNDICES DO CAPÍTULO 4.....	647
B.1 Introdução	647
B.2 Factor de fricção nos canais na zona de transição	648
B.2.1 Interpolação Linear	648
B.2.2 Polinómios de Tchebyshev	649
B.2.3 Comparação do comportamento das duas aproximações.....	650
B.3 Modelo Completo IQM.....	651
B.3.1 Canais oblíquos de entrada de fluido associados à parte de cima de uma câmara 657	
B.3.1.1 Caso geral.....	657
B.3.1.2 Caso simplificado de apenas um canal de entrada de fluido na câmara	661
B.3.1.3 Rede uniforme.....	662
B.3.2 Canais oblíquos de saída de fluido pela parte de baixo de uma câmara	663
B.3.2.1 Caso geral.....	663
B.3.2.2 Caso em que existe apenas um canal de saída de fluido da câmara.....	665
B.3.2.3 Rede uniforme.....	666
B.3.3 Análise das Expressões Obtidas.....	667
B.3.3.1 Análise das expressões obtidas para a entrada de fluido de uma câmara	668
B.3.3.2 Análise das expressões obtidas para a saída do fluido de uma câmara	671
B.3.3.3 Análise do comportamento de um ramo contendo um canal oblíquo.....	674
B.3.4 Implicações na modelização do escoamento.....	676
B.4 Estrutura do Sistema de Equações	679
B.5 Expressões teóricas para os parâmetros macroscópicos do escoamento	685
B.5.1 Permeabilidade.....	685
B.5.2 Expressões para as constantes A e B da Equação de MacDonald.....	688
B.5.2.1 Expressão para A	688
B.5.2.2 Expressão para B	689
B.5.3 Razão de permeabilidades em função de C quando se removem apenas canais horizontais	691
B.5.4 Razão entre os valores F^* para redes uniformes.....	696
B.5.4.1 Valor de Re^* constante.....	697
B.5.4.2 Valor de q_T constante.....	702

Índice Figuras – Apêndices Capítulo 4 (em CD)

Pág.

Figura B.1	Estrutura de escoamento para: (a) expansão simples; (b) contracção simples. As setas representam o sentido de escoamento na expansão ou contracção.	652
Figura B.2	Sentidos de escoamento esperados para os canais oblíquos da rede, se o gradiente de pressões tiver sido imposto segundo o eixo dos xx (ver Figura 3.5).	653
Figura B.3	Volume de Controlo para os canais oblíquos de entrada de fluido na câmara: a) sem canais horizontais, b) com canais horizontais.	658
Figura B.4	Caso limite de apenas uma entrada de fluido na câmara.	661
Figura B.5	Volume de Controlo para os canais oblíquos de saída de fluido na câmara: a) sem canais horizontais, b) com canais horizontais.	663
Figura B.6	Valores previstos de K_j^E em função de d/D para uma entrada de fluido numa câmara da rede para uma rede uniforme, para dois valores de θ : $\pi/4$ (curvas a tracejado), e $\pi/3$ (curvas a cheio).	670
Figura B.7	Valores previstos de K_j^{CT} em função de d/D para uma entrada de fluido numa câmara da rede para uma rede uniforme, para dois valores de θ : $\pi/4$ (curvas a tracejado), e $\pi/3$ (curvas a cheio).	673
Figura B.8	Valores de $\sum K_j$ previstos pelo modelo completo em função de d/D para uma rede uniforme e considerando dois valores de θ : $\pi/4$ (curvas a tracejado), e $\pi/3$ (curvas a cheio).	675
Figura B.9	Esquema de numeração das equações do sistema de equações que permite determinar as características do escoamento através da rede.	680
Figura B.10	Estrutura dos sistemas de equações para os quatro tipos fundamentais de redes: a) tipo 11; b) tipo 10; c) tipo 01; d) tipo 00.	681
Figura B.11	Estrutura dos sistemas de equações com remoção de canais, para quatro valores de N_{Cord} : a) $C = 5$; b) $C = 4.5$; c) $C = 3.5$; d) $C = 3.0$	683
Figura B.12	Estrutura dos sistemas de equações com remoção de câmaras, para quatro valores de N_{Cord} : a) $C = 5$; b) $C = 4.5$; c) $C = 3.5$; d) $C = 3.0$	684

Índice Tabelas – Apêndices Capítulo 4 (em CD)

	Pág.
Tabela B.1 Expressões de F_1^*/F_2^* para redes uniformes grandes quando o volume das calotes não é tomado em conta.....	702
Tabela B.2 Expressões de F_1^*/F_2^* para redes uniformes grandes quando o volume das calotes não é tomado em conta.....	704

Índice Geral – Apêndices Capítulo 5 (em CD)

	Pág.
C. APÊNDICES DO CAPÍTULO 5.....	705
C.1 Introdução	705
C.2 Visualização das características do transporte de massa ao nível dos elementos da rede.....	706
C.2.1 Formato dos ficheiros de resultados.....	706
C.2.1.1 Estrutura geométrica da rede.....	707
C.2.1.2 Criação de filmes da evolução espacial e temporal do perfil de concentração.....	708
C.3 Determinação das expressões dos momentos para uma rede uniforme	709
C.4 Determinação do factor de correcção das calotes para uma rede uniforme.....	711
C.5 Dedução das relações entre as diferentes formas dos números de Peclet.....	713
C.6 Perturbações definidas explicitamente no simulador de transporte de massa	715
C.7 Definição da concentração de adimensionalização.....	717
C.8 Expressões analíticas para caracterizar o comportamento das câmaras no topo da rede.....	718
C.9 Análise do comportamento de uma câmara com diferenças apreciáveis dos caudais nos canais associados	722

Índice Figuras – Apêndices Capítulo 5 (em CD)

Pág.

Figura C.1	Exemplo de uma rede com 4 linhas e 4 colunas tipo 11 (a) e respectiva rede regular (b), sendo indicada nesta última a posição das câmaras.....	707
Figura C.2	Comparação dos perfis de concentração de traçador instantâneo no mesmo instante para uma perturbação pontual para: a) sem correcção; b) com correcção.....	708
Figura C.3	Representação de câmara e dois canais associados usada para a determinação das expressões analíticas para descrever o comportamento transiente de uma câmara na linha de entrada de traçador na rede.	719
Figura C.4	Câmara considerada no exemplo com duas câmaras horizontais associadas.....	723
Figura C.5	Comparação das respostas da câmara exemplo a uma perturbação em degrau de traçador com e sem canais horizontais.....	724

Índice Tabelas – Apêndices Capítulo 5 (em CD)

Pág.

Tabela C.1	Perturbações definidas explicitamente no simulador de transporte de massa....	716
Tabela C.2	Expressões analíticas obtidas para as perturbações listadas na Tabela C.1.	721

Nomenclatura

A	Constante da equação de MacDonald (adimensional).
A	Matriz das incidências reduzidas (adimensional).
A_1	Área da superfície de control associada à ligação entre o canal de índice 1 e a câmara (m^2).
A_2	Área da superfície de control associada à ligação entre o canal de índice 2 e a câmara (m^2).
A_3	Área da superfície de control associada à ligação entre o canal de índice 3 e a câmara (m^2).
A_4	Área da superfície de control associada à ligação entre o canal de índice 4 e a câmara (m^2).
A_5	Área da superfície de control associada à ligação entre o canal de índice 5 e a câmara (m^2).
A_6	Área da superfície de control associada à ligação entre o canal de índice 6 e a câmara (m^2).
A_B	Constante do modelo de Blick, Equação 2.81 (adimensional).
A_{Cj}	Área de secção recta da Vena Contracta (m^2).
A_D	Constante da Equação 2.74, análoga à constante A da Equação de Ergun (adimensional).
A^{exp}	Valor experimental da constante A da Equação de MacDonald (adimensional).
A_H	Área da superfície de control que separa as duas partes da câmara, para os casos com canais horizontais (m^2).
A_j	Área de secção recta do canal j da rede (m^2).
A_L	Constante de proporcionalidade da Equação (adimensional).
A_{LM}	Constante do modelo de Liu e Masliyah análoga à constante A da Equação de MacDonald (adimensional).
A_M	Constante da Equação 2.71, análoga à constante A da Equação de Ergun (adimensional).
A_N	Área de secção recta equivalente da rede (m^2).
A_P	Constante de proporcionalidade da relação $D_L/D_M \propto Pe_P^n$ (adimensional).
A_R	Constante de uma perturbação em rampa (mol/m^3).
A_S	Área da superfície de control definida no interior das câmaras (m^2).
A_{Se}	Constante de uma perturbação em seno (mol/m^3).
A_{sp}	Área superficial específica (m^2).
A_T	Área da superfície de control que separa as duas partes da câmara, para os casos com canais oblíquos (m^2).
a'	Constante equação de Forcheimer, Equação 2.45 (adimensional).

a_0	Constante da Equação 3.47 (adimensional).
a_1	Constante da Equação 3.47 (adimensional).
a_4	Constante da Equação 3.47 (adimensional).
a_2	Constante da Equação 3.47 (adimensional).
a_3	Constante da Equação 3.47 (adimensional).
$a_d(\theta)$	Constante das funções de interpolação de K_d em ε , função de θ .
$a_l(\theta)$	Constante das funções de interpolação de K_l função de θ (adimensional).
a_T	Constante usada na Equação 2.10 (adimensional)
a_V	Área superficial das partículas (m^{-1}).
a_{Vd}	Área superficial específica das partículas (m^{-1}).
B	Constante do termo não linear da Equação de McDonald (adimensional).
$\mathbf{B}$	Vector das forças de corpo que se exerce no Volume de Control (kg/ms^2).
B_D	Constante da Equação 2.74, análoga à constante B da Equação de Ergun (adimensional).
B^{exp}	Valor experimental da constante B da Equação de MacDonald (adimensional).
B_j	Constante de integração.
B_{LM}	Constante do modelo de Liu e Masliyah análoga à constante B da Equação de MacDonald (adimensional).
B_M	Constante da Equação 2.71, análoga à constante B da Equação de Ergun (adimensional).
B_R	Constante de uma perturbação em rampa (mol/m^3s).
B_{Se}	Constante de uma perturbação em seno (adimensional).
B_T	Constante da Equação 2.67 (adimensional).
$b_d(\theta)$	Constante das funções de interpolação de K_d em ε , função de θ .
b_e	Comprimento do semi-eixo horizontal de uma elipse (m).
b_e	Comprimento do semi-eixo vertical de uma elipse (m).
b'	Constante do termo não linear da equação de Forcheimer, Equação 2.45 (adimensional).
$b_l(\theta)$	Constante das funções de interpolação de K_l em ε , função de θ (adimensional).
C	Número de coordenação médio.
C_0	Concentração de normalização (mol/m^3).
$\bar{C}_0$	Concentração média de entrada de traçador na rede (mol/m^3).
C_1	Concentração de entrada de traçador na câmara pelo canal 1, ver Apêndice C.8 (mol/m^3).

C	Perfil de concentrações (mol/m ³).
C_2	Concentração de entrada de traçador na câmara pelo canal 2, ver Apêndice C.8 (mol/m ³).
C_C	Coeficiente de contracção associado a um canal numa rede uniforme (adimensional).
C_{C3}	Coeficiente de contracção associado ao canal 3 (adimensional).
C_{C4}	Coeficiente de contracção associado ao canal 4(adimensional).
C_{Cj}	Coeficiente de contracção do canal j (adimensional).
$C_C(t)$	Concentração de traçador numa câmara da rede, Apêndice C.8 (mol/m ³).
C_D	Coeficiente de arrasto (adimensional).
$c_d(\theta)$	Constante das funções de interpolação de K_d em ε , função de θ .
$C_E(t)$	Concentração de entrada no meio poroso (mol/m ³).
$\overline{C}_j^E$	Transformada de Laplace da concentração de entrada de traçador do meio poroso (mol/m ³).
C_i	Número de coordenação da câmara i (adimensional).
C_i^S	Concentração de traçador na câmara i antes da aplicação da perturbação de traçador (mol/m ³).
$C_i(t)$	Concentração de traçador na câmara i (mol/m ³).
$C_j^E(t)$	Concentração de entrada de traçador no canal j (mol/m ³).
C_j^S	Concentração de traçador nos canal j antes da aplicação da perturbação de traçador (mol/m ³).
$C_j(z,t)$	Concentração de traçador no canal j da rede (mol/m ³).
C_{LM}	Constante ajustável do modelo de Liu e Masliyah (adimensional).
C_m	Concentração média definida pela Equação 2.98 (mol/m ³).
C_M	Concentração média de saída de traçador da rede (mol/m ³).
C_P	Concentração limite da concentração de traçador para uma perturbação em degrau, pulso, impulso e degrau invertido (mol/m ³).
$C_S(t)$	Concentração de saída do meio poroso (mol/m ³ s).
C_{Se}	Constante de uma perturbação em seno (s ⁻¹).
$C_{sj}(t)$	Concentração de traçador no canal j de saída do fluido da rede (mol/m ³).
$\overline{C}_s(x,s)$	Transformada de Laplace da concentração de saída do meio poroso (mol/m ³).
$\overline{C}(x,s)$	Transformada de Laplace da concentração de traçador (mol/m ³).
$\overline{C}(x,s)$	Transformada de Laplace da concentração de traçador (mol/m ³).
$\overline{C}_j^E(x,s)$	Transformada de Laplace da concentração de entrada de traçador do canal j da rede (mol/m ³).
$\overline{C}_j(x,s)$	Transformada de Laplace da concentração no canal j da rede

	(mol/m ³).
$\overline{C}_j^o(x, s)$	Transformada de Laplace da concentração de saída de traçador do canal j da rede (mol/m ³).
c	Constante definida na Equação 2.48 (adimensional).
$c_i(\theta)$	Constante das funções de interpolação de K_i em ε , função de θ (adimensional).
c_p	Constante de proporcionalidade da teoria da lubrificação, definida na Equação 83 (kg/s).
D	Valor médio do diâmetro das câmaras (m).
D^*	Diâmetro de uma câmara da rede equivalente a uma rede uniforme (m).
D_{ax}	Coeficiente de dispersão axial (m ² /s).
D_{dir}^{Max}	Diâmetro máximo das câmaras na coluna da rede mais à direita (m).
D_{eff}	Coeficiente de difusividade efectiva (m ² /s).
D_{esq}^{Max}	Diâmetro máximo das câmaras na coluna da rede mais à esquerda (m).
D_i	Diâmetro da câmara i da rede (m).
D_L	Coeficiente de dispersão longitudinal (m ² /s).
D_{leito}	Diâmetro do leito de enchimento (m).
D_M	Difusividade molecular (m ² /s).
D_p	Diâmetro equivalente das partículas (m).
D_R	Coeficiente de dispersão radial (m ² /s).
D_T	Coeficiente de dispersão transversal (m ² /s).
D_V	Diâmetro médio das partículas definido pelo volume (m ³).
d	Valor médio do diâmetro dos canais (m).
d_c	Valor médio do diâmetro dos capilares (m).
d_h	Diâmetro hidráulico equivalente definido pela Equação 2.20 (m).
d_i^{max}	Diâmetro do maior canal horizontal associado à câmara i da rede (m).
d_j	Diâmetro do canal j da rede (m).
$d_i(\theta)$	Constante das funções de interpolação de K_i em ε , função de θ (adimensional).
E_R	Espessura equivalente da rede (m).
$E(t)$	Distribuição de tempos de residência não normalizada (s).
$E(\Theta)$	Distribuição de tempos de residência normalizada (adimensional).
e	Excentricidade de uma elipse (adimensional).
E_R^C	Espessura equivalente de uma rede com um número de coordenação médio E_R^C (m).
F	Factor de arrasto (adimensional).

$F(t)$	Função F de Danckwerts (adimensional).
F^*	Factor de fricção definido com base na equação de Ergun (adimensional).
F_D	Força de arrasto exercida pelo fluido nas partículas (N).
F_F	Factor de formação (adimensional) (adimensional).
F_i	Concentração adimensional de traçador na câmara i (adimensional).
F_i^S	Concentração adimensional de traçador na câmara i antes da aplicação da perturbação de traçador (adimensional).
F_j	Concentração adimensional de traçador no canal j (adimensional).
F_j^E	Concentração adimensional de entrada de traçador no canal j (adimensional).
F_j^S	Concentração adimensional de traçador no canal j antes da aplicação da perturbação de traçador (adimensional).
F_k	Factor de fricção definido pela Equação (adimensional).
F_{LAM}	Factor de arrasto definido pela Equação 2.66 (adimensional).
F_{Max}	Razão de proporcionalidade entre o valor médio e máximo da distribuição ULLN (adimensional).
F_{min}	Valor limite da diferença entre concentrações de traçador nas câmaras entre dois incrementos de tempo (mol/m^3).
F_V	Factor de fricção definido com base na equação de Ergun (adimensional).
f	Factor de fricção (adimensional).
f_b	Factor de fricção devido à curvatura dos canais (adimensional).
f_c	Factor de fricção devido à mistura do fluido (adimensional).
$f_d(d_j)$	Função densidade de probabilidade dos diâmetros dos canais (adimensional).
$f_D(D_i)$	Função densidade de probabilidade dos diâmetros das câmaras (adimensional).
$f_{D_P}(D_{P_j})$	Função de distribuição dos diâmetros das partículas do leito de enchimento (adimensional).
f_{eq}	Factor de fricção efectivo para o escoamento através de um ramo da rede (adimensional).
f_j	Factor de fricção para o escoamento através do canal j da rede (adimensional).
$f_l(l_j)$	Função densidade de probabilidade dos comprimentos dos canais (adimensional).
f_{Lam}	Factor de fricção definido pela Equação 2.66 (adimensional).
f_P	Factor de fricção definido pela Equação 2.15 (adimensional).
f_V	Factor de fricção definido pela Equação 2.65 (adimensional).
$f_{V\infty}$	Factor de fricção para regime de escoamento não linear no modelo de Liu e Masliyah (adimensional).

$\mathbf{G}$	Matriz das condutâncias dos ramos do circuito eléctrico equivalente (s/m^2).
G_j	Condutância do ramo associado ao canal j da rede (s/m^2).
G_j^E	Função de transferência para os canais que entram no nó (adimensional).
G_j^O	Função de transferência para os canais que sai do nó (adimensional).
$G(s)$	Função de transferência (adimensional).
g	Aceleração da gravidade (m^2/s).
h	Espessura das calotes esféricas provocadas pela entrada dos canais nas câmaras da rede (m).
h_{ij}	Comprimento da calote polar definida pelo canal j e pela câmara i (m).
h_{ij}^C	Queda de pressão associada a uma contracção do escoamento (kg/ms).
h_{ij}^{CE}	Queda de pressão associada à zona de expansão do escoamento a seguir à Vena Contracta (kg/ms).
h_{ij}^{CT}	Queda de pressão total associada a uma contracção do escoamento (kg/ms).
h_{ij}^E	Queda de pressão associada a uma expansão do escoamento (kg/ms).
h_p	Metade do espaçamento entre duas placas paralelas (m).
$\overline{J_j}$	Fluxo mássico num nó da rede no domínio de Laplace.
j	Fluxo de massa no sentido transversal do escoamento (mol/s).
K_1^E	Constante associada à queda de pressão provocada pela expansão do fluido ao sair do canal 2 para a câmara (adimensional).
K_1^E	Constante associada à queda de pressão provocada pela expansão do fluido ao sair do canal 1 para a câmara (adimensional).
K_{cel}	Constante de proporcionalidade entre o volume de vazios de uma célula fundamental e D_p (m^3).
K_d	Constante de proporcionalidade entre d e D_p (adimensional).
K_D	Constante de proporcionalidade entre D e D_p (adimensional).
K_F	Constante de proporcionalidade entre l_F e D_p (adimensional).
K_h	Constante de proporcionalidade entre h e D_p (adimensional).
K_j	Constante para o cálculo da queda de pressão entre as ligações entre as câmaras e os canais da rede (adimensional).
K_j^C	Constante para o cálculo da queda de pressão na Vena Contracta de uma contracção súbita da área de escoamento do fluido (adimensional).
K_j^{CE}	Constante para o cálculo da queda de pressão na expansão do escoamento a seguir à Vena Contracta (adimensional).
K_j^{CT}	Constante para o cálculo da queda de pressão numa contracção súbita da área de escoamento do fluido (adimensional).

K_j^E	Constante para o cálculo da queda de pressão numa expansão súbita da área de escoamento do fluido (adimensional).
K_j^{in}	Constante para o cálculo da queda de pressão na entrada de fluido de um canal numa câmara (adimensional).
K_j^{out}	Constante para o cálculo da queda de pressão na saída de fluido de uma câmara num canal (adimensional).
K_l	Constante de proporcionalidade entre l e D_p (adimensional).
K_{N_x}	Factor definido para tomar em conta o diferente número de calaotes associados às câmaras da rede equivalente a uma rede uniforme (adimensional).
K_p	Constante da equação 2.17 (adimensional).
k	Permeabilidade do meio poroso (m^2).
k_0	Constante do modelo de Carman-Kozeny (adimensional).
k_1	Constante do modelo de Liu e Masliyah análoga à constante de Carman-Kozeny (adimensional).
k^*	Permeabilidade intrínseca (m^2). – Verificar unidades onde é usada.
k_C	Permeabilidade de uma rede com um número de coordenação médio C (m^2).
k^{exp}	Valor experimental da permeabilidade de um meio poroso (m^2).
k_k	Constante de Carman-Kozeny (adimensional).
k_s	Permeabilidade Stokes (m^2).
L_h	Distância média entre os centros de duas câmaras ligadas por um canal horizontal (m).
L_O	Distância média entre os centros de duas câmaras ligadas por um canal oblíquo (m).
L_T	Distância média percorrida pelas partículas de fluido através de um meio poroso (m).
L_X	Valor da dimensão característica do meio poroso segundo o sentido principal de escoamento (m).
L_Y	Comprimento da rede no sentido normal ao sentido principal de escoamento do fluido (m).
l	Valor médio do comprimento dos canais (m).
l_F	Distância entre duas camadas de partículas contíguas nos leitos de enchimento regulares (m).
l_h	Comprimento médios dos canais horizontais da rede (m).
l_j	Comprimento do canal j da rede (m).
$l_j _h$	Comprimento dos canais horizontais da rede (m).
$l_j _O$	Comprimento dos canais oblíquos da rede (m).
l_s	Constante da Equação 2.104 (adimensional).
L_X^C	Comprimento de uma rede no sentido principal do escoamento com um número de coordenação médio V_V^C (m^3).

L_Y^C	Comprimento de uma rede no sentido normal do escoamento com um número de coordenação médio E_R^C (m).
M	Massa molecular (kg/mol).
M_1	Primeiro momento da $E(\Theta)$.
M_2	Segundo momento centrado no valor médio da $E(\Theta)$.
m	Factor de cementação (adimensional).
N_α	Número de canais com o valor de α_j^E ou α_j^O (adimensional).
N_{Cal}	Número de calotes polares da rede (adimensional).
N_{Ck}	Número de câmaras com um número de coordenação igual a k (adimensional).
N_{Cal}^{Centro}	Número de calotes associada às câmaras no centro da rede (adimensional).
N_{Cal}^{Fundo}	Número de calotes associada aos canais na linha extra no fundo da rede (adimensional).
N_{Can}^H	Número de canais horizontais da rede (adimensional).
N_{Can}^O	Número de canais oblíquos da rede (adimensional).
N_{Cal}^{Topo}	Número de calotes associada às câmaras no topo da rede (adimensional).
N_{Cam}	Número de câmaras existente na rede (adimensional).
N_{cam}^{eq}	Número equivalente de câmaras que é possível definir em cada uma das células fundamentais dos leitos de enchimento regulares (adimensional).
N_{Can}	Número de canais existente na rede (adimensional).
N_{can}^{eq}	Número equivalente de canais que é possível definir em cada uma das células fundamentais dos leitos de enchimento regulares (adimensional).
N_{cal}^{eq}	Número equivalente de calotes que é possível definir em cada uma das células fundamentais dos leitos de enchimento regulares (adimensional).
N_j^{Inc}	Número de incrementos espaciais do canal j (adimensional).
N_τ	Número de canais com o valor de τ_i ou τ_j (adimensional).
N_T^{00}	Número total de elementos de uma rede tipo 00 (adimensional).
N_T^{01}	Número total de elementos de uma rede tipo 01 (adimensional).
N_T	Número total de tanques em série (adimensional).
N_T^{10}	Número total de elementos de uma rede tipo 10 (adimensional).
N_T^{11}	Número total de elementos de uma rede tipo 1 (adimensional).
N_v	Número de canais com o valor de velocidade v_j (adimensional).
N_x	Número de linhas da rede (adimensional)
N_y	Número de colunas da rede (adimensional).

n_L	Constante do modelo de Liu e Masliyah usada na Equação 2.63 (adimensional).
n_P	Número de capilares (adimensional).
P^*	Pressão piezométrica (kg/ms ²).
$\mathbf{P}$	Vector contendo os valores das pressões absolutas nos nós da rede (kg/ms ²).
P_1	Pressão na superfície de control em que o canal índice 1 se liga à câmara (kg/ms ²).
P_2	Pressão na superfície de control em que o canal índice 2 se liga à câmara (kg/ms ²).
P_3	Pressão na superfície de control em que o canal índice 3 se liga à câmara (kg/ms ²).
P_4	Pressão na superfície de control em que o canal índice 4 se liga à câmara (kg/ms ²).
P_5	Pressão na superfície de control em que o canal índice 5 se liga à câmara (kg/ms ²).
P_6	Pressão na superfície de control em que o canal índice 6 se liga à câmara (kg/ms ²).
P_A	Pressão no nó A da Figura 4.10 (kg/ms ²).
P_B	Pressão no nó B da Figura 4.10 (kg/ms ²).
P_C	Pressão no nó C da Figura 4.10 (kg/ms ²).
P_{C3}	Pressão na Vena Contracta associada ao canal 3 (kg/ms ²).
P_{C4}	Pressão na Vena Contracta associada ao canal 3 (kg/ms ²).
P_{CR}	Constante da Equação de Comiti e Renaud para a Tortuosidade de um meio poroso (adimensional).
Pe	Número de Peclet definido em termos do comprimento do meio poroso ou do raio do tubo cilíndrico (adimensional).
Pe^*	Número de Peclet normalizado pelo valor previsto para uma rede uniforme (adimensional).
Pe_M	Número de Peclet baseado na difusividade molecular do traçador (adimensional).
Pe_p	Número de Peclet baseado no diâmetro médio das partículas (adimensional).
P_i	Pressão absoluta no interior do nó i da rede (kg/ms ²).
P_j	Pressão absoluta na ligação entre o canal j e câmara i (kg/ms ²).
P_{N1}	Pressão absoluta no extremo 1 do canal apresentado na Figura 4.2 (kg/ms ²).
P_{N1}	Pressão absoluta no extremo 2 do canal apresentado na Figura 4.2 (kg/ms ²).
$P(s)$	Distribuição de tempos de passagem das partículas de tracer através da rede (s)
$\bar{P}(s)$	Transformada de Laplace da distribuição de tempos de passagem das partículas de tracer através da rede (s)

$\bar{P}_j(s)$	Transformada de Laplace da distribuição de tempos de passagem das partículas de tracer no canal j da rede (s).
Q	Distribuição dos primeiros tempo de chegada das partículas de tracer(s).
Q^*	Função definida pela Equação 2.73 (adimensional)
Q_i	Caudal total de entrada e/ou saída na câmara i da rede (m^3/s).
$\mathbf{q}$	Vector contendo os caudais volumétricos nos canais da rede (m^3/s).
q_1	Caudal volumétrico no canal 1 da Figura 4.10 (m^3/s).
q_2	Caudal volumétrico no canal 2 da Figura 4.10 (m^3/s).
q_3	Caudal volumétrico no canal 3 da Figura 4.10 (m^3/s).
q_4	Caudal volumétrico no canal 4 da Figura 4.10 (m^3/s).
q_5	Caudal volumétrico no canal 5 da Figura 4.10 (m^3/s).
q_6	Caudal volumétrico no canal 6 da Figura 4.10 (m^3/s).
q_7	Caudal volumétrico no canal 7 da Figura 4.1 (m^3/s).
q_j	Caudal no canal j da rede (m^3/s).
q_j^E	Caudal de entrada num nó da rede pelo canal j (m^3/s).
q_j^O	Caudal de saída de um nó da rede pelo canal j (m^3/s).
$\mathbf{q}^s$	Vector das fontes de tensão e de corrente (m^3/s).
q_T	Caudal total através da rede (m^3/s).
R	Raio do tubo cilíndrico (m).
R_1	Resistência do canal 1 da Figura 4.10 (m^3/s).
R_2	Resistência do canal 2 da Figura 4.10 (m^3/s).
R_3	Resistência do canal 3 da Figura 4.10 (m^3/s).
R_4	Resistência do canal 4 da Figura 4.10 (m^3/s).
R_5	Resistência do canal 5 da Figura 4.10 (m^3/s).
R_6	Caudal volumétrico no canal 6 da Figura 4.10 (m^3/s).
R_7	Caudal volumétrico no canal 7 da Figura 4.10 (m^3/s).
Re	Número de Reynolds (adimensional).
Re^*	Número de Reynolds modificado (adimensional).
Re_j	Número de Reynolds definido para as condições geométricas e de escoamento observadas no canal j da rede.
Re_k	Número de Reynolds modificado definido pela Equação 2.43 (adimensional).
Re_m	Número de Reynolds definido pela Equação 2.2.64 (adimensional).
Re_{pLAM}	Número de Reynolds definido pela Equação 2.60 (adimensional).
R_{eq}	Resistência equivalente da ao escoamento (m^2/s).

Re_T	Número de Reynolds modificado definido pela Equação 2.68 (adimensional).
R_j	Resistência total do ramo associado aos canal j (m^2/s).
R_j^F	Resistência ao escoamento nos canais devido à fricção do fluido nas paredes (m^2/s).
Re_O	Número de Reynolds modificado definido pela Equação 2.70 (adimensional).
r	Coordenada radial (m).
Sc	Número de Schmidt (adimensional).
$\bar{S}_j$	Soma parcial definida pela Equação 2.131 (s).
S_p	Superfície da partícula (m^2).
s	Variável de Laplace.
s_ϕ	Razão entre o diâmetro e o comprimento dos canais (adimensional).
T	Tortuosidade (adimensional).
$\mathbf{T}$	Vector das forças exercidas na superfície de control (kgm/s^2).
T_a	Temperatura absoluta (K).
t	Tempo (s).
t^*	Tempo actual da simulação de transporte de massa (s).
t_{ad}	Constante de tempo para o transporte de massa por difusão de massa no sentido axial do escoamento (s).
t_c	Constante de tempo para o transporte de massa por convecção (s).
t_d	Tempo de simulação em que o degrau na concentração de traçador é aplicado (s).
t_i^{act}	Tempo mínimo de chegada do traçador à câmara i (s).
t_l^{act}	Tempo mínimo de chegada do traçador à câmara l (s).
t_{max}	Tempo máximo para a simulação de transporte de massa (s).
t_{p1}	Tempo de aplicação inicial de uma perturbação de traçador em pulso (s).
t_{p2}	Tempo de aplicação final de uma perturbação de traçador em pulso (s).
t_{rd}	Constante de tempo para o transporte de massa por difusão de massa no sentido normal ao escoamento (s).
t_s	Tempo mínimo de chegada do traçador à saída da rede (s).
V_C	Volume do volume de Control (m^3).
V_{Cal}	Volume das calotes associadas às câmaras da rede (m^3).
$(V_{Cal})_R$	Volume corrigido de uma calote associadas a câmara da rede equivalente a uma rede uniforme (m^3).
V_{Cam}	Volume das câmaras da rede (m^3).
V_{Can}	Volume dos canais da rede (m^3).

V_i	Volume da câmara i (m^3).
V_p	Volume da partícula (m^3).
V_T	Volume total (m^3).
V_V	Volume de vazios da rede (m^3).
V_V^*	Volume de vazios corrigido da rede (m^3).
v	Velocidade médio do escoamento no interior de um tubo (m).
$\mathbf{v}$	Vector velocidade (m/s).
v_1	Velocidade no canal índice 1 na ligação entre este e a câmara (m/s).
v_{N1}	Velocidade no extremo 1 do canal apresentado na Figura 4.2 (m/s).
v_2	Velocidade no canal índice 2 na ligação entre este e a câmara (m/s).
v_3	Velocidade no canal índice 3 na ligação entre este e a câmara (m/s).
v_4	Velocidade no canal índice 4 na ligação entre este e a câmara (m/s).
v_5	Velocidade no canal índice 5 na ligação entre este e a câmara (m/s).
v_6	Velocidade no canal índice 6 na ligação entre este e a câmara (m/s).
v_a	Constante do modelo de Westerter <i>et al.</i> , Equação 2.108 (m/s).
v_{ej}	Velocidade na Vena Contracta associada ao canal j (m/s).
v_j	Velocidade média do fluido através do canal j da rede (m/s).
v_{max}	Velocidade máxima do fluido nos canais da rede (m/s).
v_{N2}	Velocidade no extremo 2 do canal apresentado na Figura 4.2 (m/s).
v_p	Velocidade intersticial do fluido através do meio poroso (m/s).
v_s	Velocidade do fluido na superfície de control (m/s).
v_T	Velocidade superficial do fluido através do meio poroso (m/s).
V_V^C	Volume de vazios de uma rede com um número de coordenação médio V_V^C (m^3).
X_1	Primeiro momento não centrado da distribuição das dimensões características das partículas (m)
X_2	Segundo momento não centrado da distribuição das dimensões características das partículas (m^2)
x	Coordenada axial (m).
x_1	Coordenada do extremo 1 do ramo apresentado na Figura 4.2 (m).
x_2	Coordenada do extremo 2 do ramo apresentado na Figura 4.2 (m).
x_m	Variável definida no modelo de Taylor, Secção 2.4.3.1 (m).
$\mathbf{Y}$	Matriz das admitância dos nós do circuito eléctrico equivalente (adimensional).
y_{ij}	Elemento na linha i e coluna j da matriz de admitâncias $\mathbf{Y}$ (adimensional).
y_{ji}	Elemento na linha j e coluna i da matriz de admitâncias $\mathbf{Y}$

	(adimensional).
Z	Factor de compressibilidade de um gás (adimensional).
z	Distância medida na vertical (m).
<i>letras gregas</i>	
α_1	Constante definida ao escrever as equações de conservação de quantidade de movimento nos VC definidos nas câmaras (kg m/s^2).
α_2	Constante definida ao escrever as equações de conservação de quantidade de movimento nos VC definidos nas câmaras (kg m/s^2).
α_3	Constante definida ao escrever as equações de conservação de quantidade de movimento nos VC definidos nas câmaras (kg m/s^2).
α_4	Constante definida ao escrever as equações de conservação de quantidade de movimento nos VC definidos nas câmaras (kg m/s^2).
α_5	Constante definida ao escrever as equações de conservação de quantidade de movimento nos VC definidos nas câmaras (kg m/s^2).
α_6	Constante definida ao escrever as equações de conservação de quantidade de movimento nos VC definidos nas câmaras (kg m/s^2).
α_j^E	Razão entre o caudal de saída pelo canal j e o caudal total de saída na câmara (adimensional).
α_j^O	Razão entre o caudal de entrada pelo canal j e o caudal total de entrada na câmara (adimensional).
α_L	Dispersividade (m)
α^{lim}	Valor limite de α_j^E a partir do qual se toma em conta o comportamento do canal no transporte de massa (adimensional).
α_L	Constante da Equação 2.93 (adimensional).
α_T	Constante da Equação 2.94 (adimensional).
β	Razão entre os tempo de passagem global e o tempo de passagem nas câmaras da rede equivalente a uma rede uniforme (adimensional).
β_L	Constante da Equação 2.93 (adimensional).
β_{LAM}	Constante ajustável definida no modelo de Liu e Masliyah (adimensional).
β_T	Constante da Equação 2.94 (adimensional).
γ	Grupo adimensional correspondente à razão entre o volume dos canais e das câmaras da rede equivalente a uma rede uniforme (adimensional).
Γ	Trajecto de um partícula de tracer através do meio poroso (adimensional).
$\delta(t)$	Função delta de Dirac (s).
ΔP	Queda de pressão para o escoamento através do meio poroso (Pa).
$\Delta \mathbf{P}$	Vector das diferenças de potencial entre os nós do circuito eléctrico equivalente (Pa).
ΔP_F	Perda de carga devido à fricção do fluido nas paredes dos canais da rede (pa).
ΔP_j	Queda de pressão no ramo associado ao canal j da rede (Pa).

ΔP_j	Queda de pressão num ramo da rede (Pa).
ΔP_j^a	Queda de pressão adicional nas ligações entre as câmaras e os canais da rede (Pa).
ΔP_j^s	Termo de fonte de tensão associados aos ramos da rede (Pa).
$\Delta \mathbf{P}^s$	Vector contendo as fontes de corrente nos canais da rede (Pa).
ΔP_T	Queda de pressão total através do escoamento (Pa).
ΔP_T^c	Diferença de potencial corrigida entre os extremos da rede (Pa).
δ_s	Factor de forma dependente da forma dos tubos (adimensional).
Δt_p	Duração total de um perturbação em pulso (s).
Δt	Passo de integração (s).
Δx_j	Espaçamentos entre dois incrementos sucessivos no canal j (m).
ε_{tol}	Tolerância máxima do método iterativo usado na descrição do campo de escoamento na rede de câmaras e canais (adimensional).
θ	Ângulo que os canais oblíquos fazem com a vertical (rad).
Θ	Tempo adimensional (adimensional).
Θ_B	Tempo adimensional em que o traçador começa a sair da rede (adimensional).
Θ_B^*	Tempo adimensional em que o traçador começa a sair da rede normalizado pelo valor previsto para uma rede uniforme (adimensional).
θ_j	Ângulo que o ramo associado ao canal j faz com a vertical (rad).
θ_{max}	Limite superior do valor de θ (rad).
θ_{max}	Valor limite do ângulo θ que é possível definir ao gerador da rede (rad).
θ_{min}	Limite superior do valor de θ .
μ	Viscosidade do fluido (kg/ms).
μ_n	Momento de ordem n centrado na origem (adimensional).
ρ	Densidade do fluido (kg/m ³).
σ	Dsvio padrão (adimensional).
$\sum K_j$	Somatório das constantes associadas ao cálculo da queda de pressão nas ligações entre as câmaras e o canal associados a um ramo da rede (adimensional).
τ_c	Constante de tempo para o transporte de massa por convecção (s).
τ_d	Constante de tempo para o transporte de massa por difusão (s).
τ_G	Tempo de passagem global do fluido na rede (s).
τ_i	Tempo de passagem nas câmaras (s).
τ_i^*	Tempo de passagem de uma câmara na rede equivalente a uma rede uniforme (s).
τ_j	Tempo de passagem nos canais (s).
τ_j^{min}	Valor mínimo da distribuição dos tempos de passagem nos canais (s).

τ^{min}	Valor mínimo das distribuições dos tempos de passagem nas câmaras e nos canais tomadas em conta simultaneamente (s).
τ_w	Constante do modelo de Westerterp <i>et al</i> (1996) (s).
ϕ	Factor de esfericidade (adimensional).
ϕ_i	Parâmetros associados à distribuição de tamanhos das partículas (adimensional).
ψ_i	Parâmetros associados à forma das partículas (adimensional).

Índices

i	Índice de câmara (adimensional).
j, k	Índices de canal (adimensional).

Lista de Siglas

00	Rede sem fronteiras periódicas e sem canais horizontais
01	Rede sem fronteiras periódicas e com canais horizontais
10	Rede com fronteiras periódicas e sem canais horizontais
11	Rede com fronteiras periódicas e com canais horizontais
CFD	Computational Fluid Dynamics.
CR	Equação de $T = f(\varepsilon)$ de Comiti e Renaud (1989).
CUB	Enchimento regular com geometria cúbica.
DDE	Delay Differential Equations.
DTP	Distribuição de tamanho de poros.
FRIC	Modelo de cálculo de R_j baseado apenas na fricção do escoamento nos canais da rede.
HDF	Hierarchical Data Format.
HEX	Enchimento regular com geometria hexagonal simples.
ICAM	Modelo de cálculo de R_j baseado na utilização de $\sum K_j$.
IQM	Modelo de cálculo de R_j baseado na descrição do comportamento das câmaras.
KIM	Conjunto de dados experimentais de Kim (1985).
LM	Equação de $T = f(\varepsilon)$ de Liu e Maslyiah (1996).
ORT	Enchimento regular com geometria ortorrômbico.
PTC	Distribuição dos primeiros tempos de chegada das partículas de tracer.
PTT	Conjunto de dados de Paytaakes <i>et al.</i> (1973b).
RBH	Enchimento regular com geometria romboédrico hexagonal.
RBP	Enchimento regular com geometria romboédrico piramidal (cúbico de faces centradas).
RG	Dados experimentais de Rumpf e Gupte (1971).
RMN	Ressonância Magnética Nuclear.

SC	Superfície de control.
T1	Modelo geométrico com θ variável sem tomar em conta as calotes.
T2	Modelo geométrico com θ variável tomando em conta as calotes.
T3	Modelo geométrico com l_0 fixado sem tomar em conta as calotes.
T4	Modelo geométrico com l_0 fixado tomando em conta as calotes
T1S	Modelo geométrico equivalente a T1 mas com $\theta = f(\varepsilon)$.
T2S	Modelo geométrico equivalente a T2 mas com $\theta = f(\varepsilon)$.
TET	Enchimento regular com geometria tetragonal esfenoidal.
ULLN	Upper Limit Logarithm Distribution.
VC	Volume de control

1. Introdução

1.1 Importância e motivações

Em muitas áreas científicas e tecnológicas, em que se incluem bastantes processos industriais de separação e reacção, ocorrem fenómenos de transporte de quantidade de movimento, massa e calor em meios porosos. Como exemplos podem ser citados, entre muitos outros, recuperação de petróleo, processos cromatográficos, adsorção, reactores de leito de fixo, remoção de contaminantes, secagem, filtração. Nestes e noutros processos os fenómenos de transporte mais relevantes são a transferência de quantidade de movimento, de calor e de massa, além da possibilidade de ocorrência de reacção química. A capacidade de modelizar adequadamente o comportamento de um meio poroso para diferentes condições permite acelerar o desenvolvimento e melhorar a eficiência de processos envolvendo meios porosos, com evidentes ganhos económicos e ambientais.

O comportamento em todos os processos citados é influenciado decisivamente pela estrutura do meio. Qualquer modelo que pretenda descrever adequadamente um meio poroso deverá tomar em conta estes aspectos e incluí-los na modelização dos fenómenos de transporte. No entanto, quanto mais informação da estrutura do meio é considerada mais complexos se tornam os modelos e a análise dos resultados obtidos nestes. Deste modo, existe a necessidade de se utilizar uma forma simplificada de representação da estrutura do meio poroso sem perder as suas características essenciais.

Não existe nenhuma estratégia universal de representar a estrutura de um meio poroso. No entanto, é possível afirmar com toda a certeza que a modelização do transporte de quantidade de movimento e de massa vai depender do tipo de estrutura assumida para o meio. Deste modo, surge a necessidade de se desenvolver uma estratégia coerente que permita, com base num modelo simples mas rigoroso da estrutura de um meio poroso, a descrição dos fenómenos de transporte que podem ocorrer neste.

1.2 Objectivos

O objectivo principal deste trabalho é o desenvolvimento de uma estratégia que permita caracterizar o escoamento, desde regime laminar a turbulento, e o transporte de massa através de um meio poroso com base num modelo de redes que inclui as características mais importantes da estrutura do meio poroso.

A estrutura do meio foi modelizada com base num modelo de redes. Este tipo de modelos é aplicável a diferentes tipos de meios porosos (Sahimi, 1995), sendo possível determinar os parâmetros dos elementos que o constituem a partir de dados experimentais (Mata *et al.*, 2001a e 2001b) ou da simulação da sua geração (Chan e Ng, 1986; Chan e Ng, 1988; Bryant *et al.*, 1996; Thompson e Fogler, 1997). Neste trabalho os valores dos parâmetros são obtidos usando um modelo baseado na análise geométrica da estrutura de leitos de enchimento formados por esferas com estrutura regular. Deste modo, é possível determinar as características da rede equivalente com base em dados experimentais de fácil obtenção como são a porosidade e a distribuição das dimensões características das partículas, importante quando se pretende aplicar a estratégia de simulação desenvolvida a meios com diferentes características.

A existência de dois tipos de elementos na rede é tomada em conta explicitamente na modelização do escoamento através da rede. Deste modo, é possível tomar em conta a influência das contracções e expansões existentes num meio poroso real, responsáveis pela existência de uma zona de transição entre regime laminar e turbulento de escoamento suave (Fand *et al.*, 1987; Jiang e Kececioglu, 1994; Thauvin e Mohanty, 1998), e o factor dominante para regime de escoamento não linear. Este aspecto é relevante em muitos processos em que a velocidade do fluido é tal que o escoamento é não linear para a previsão dos coeficientes de transporte nessas condições. A inclusão das características do meio através do modelo geométrico permite também analisar a sua influência nas características do escoamento.

O transporte de massa através do meio poroso depende em grande medida do campo de escoamento através do meio poroso. Em certos processos, como por exemplo em reactores químicos de leito fixo, ser capaz de descrever com rigor a forma como as espécies reactivas se distribuem no interior do meio poroso é fundamental para aumentar a sua eficiência. Como o campo de escoamento determinado pelo modelo de redes toma em conta a estrutura do meio poroso, é possível determinar os valores dos coeficientes de dispersão sem o recurso a dados experimentais obtidos em experiências de *tracer*, sendo deste modo o modelo preditivo.

Na Figura 1.1 é apresentada a estrutura da dissertação, em que é possível observar as interdependências entre os vários capítulos.

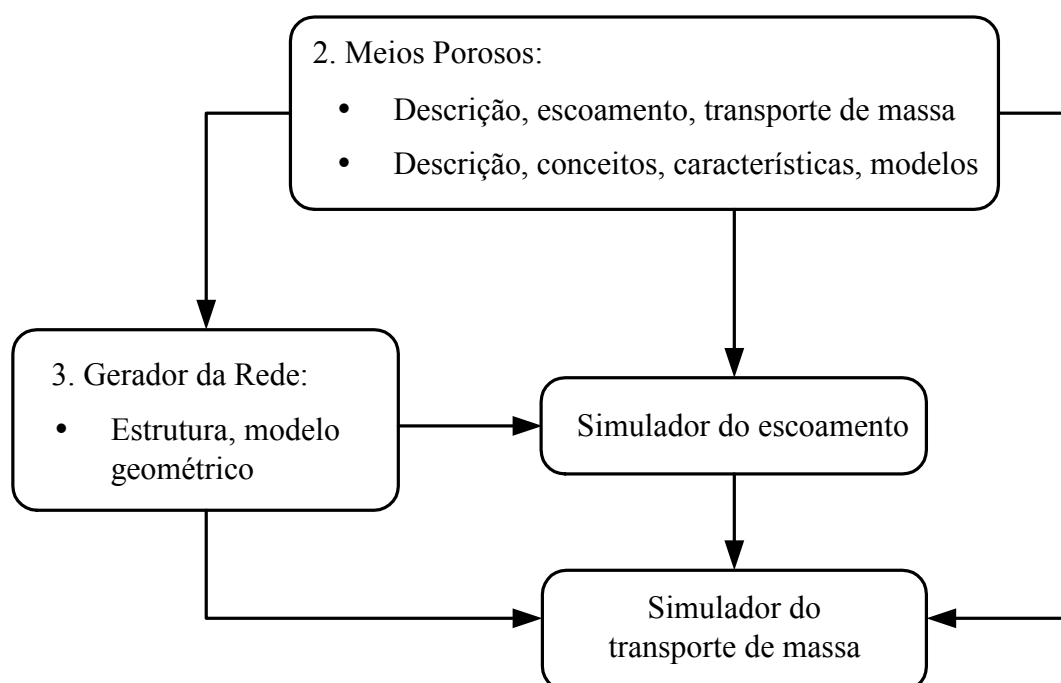


Figura 1.1 Organização da dissertação.

Um pequeno resumo do trabalho e resultados obtidos em cada um dos capítulos da tese é apresentado de seguida.

- No Capítulo 2 são apresentadas as características mais importantes relacionadas com a estrutura local e o transporte de quantidade de movimento e de massa através de meios porosos. De igual modo, são apresentados e descritos os parâmetros que permitem caracterizar estes processos. Uma revisão da bibliografia é efectuada relativa à modelização de meios porosos recorrendo a modelos de redes, tanto ao nível da estrutura como na descrição do escoamento e do transporte de massa, dando-se especial atenção às diferentes estratégias propostas para descrição dos fenómenos de transporte.

- No Capítulo 3 é descrito o modelo de rede bidimensional usado neste trabalho. Considerou-se uma rede com dois tipos de elementos, os canais com forma cilíndrica e as câmaras com forma esférica, de modo a melhor poder representar a estrutura de meios porosos reais, em particular leitos de enchimento de partículas. As relações entre os elementos são tomadas em conta explicitamente no gerador da rede. Um modelo geométrico baseado na descrição da estrutura geométrica de leitos de enchimento de esferas iguais com estruturas regulares foi desenvolvido para determinar os parâmetros das distribuições das dimensões características dos elementos da rede. Os valores dos parâmetros da rede previstos pelo modelo geométrico compararam-se favoravelmente com valores apresentados na literatura. Foi analisada a influência das condições impostas ao gerador da rede nas características da rede e nas distribuições das dimensões características dos elementos da rede, em particular as alterações que ocorrem nestas por imposição das restrições entre os diâmetros das câmaras e dos canais ao nível local.
- No Capítulo 4 é descrita a forma de modelizar o escoamento com base no modelo de redes. Este tem como base a analogia entre o escoamento na rede e um circuito eléctrico só com resistências. Os termos de resistência associados aos elementos da rede tomam em conta a influência das forças inerciais e a influência das interligações entre os diferentes elementos que formam a rede. Apenas quando estes efeitos são tomados em conta explicitamente é que o comportamento qualitativo dos valores previstos pelo modelo está de acordo com o comportamento observado experimentalmente. A influência das características geométricas da rede e dos parâmetros das distribuições das dimensões características dos seus elementos foi analisada em detalhe. Em conjunto com o modelo geométrico desenvolvido no Capítulo 3, as previsões do modelo foram comparadas com dados experimentais disponíveis na literatura, tendo-se observado boa concordância entre estes. Uma estratégia para a determinação dos valores do número de coordenação médio e dos parâmetros que caracterizam o escoamento não linear foi desenvolvida baseada na utilização simultânea do modelo geométrico com o simulador de escoamento.
- No Capítulo 5 o transporte de massa através da rede de câmaras e canais é descrito a partir da resposta transiente a uma perturbação na concentração de entrada de soluto. As equações de balanço material foram escritas para os elementos da rede assumindo escoamento pistão nos canais e agitação perfeita nas câmaras. Deste modo, o

comportamento convectivo e dispersivo encontram-se associados aos canais e às câmaras respectivamente. O perfil de concentrações é determinado resolvendo-se o sistema de equações diferenciais obtido a partir das equações de balanço material nas câmaras, tomando em conta os atrasos originados pelo escoamento nos canais. As características das equações de balanço material são tomadas em conta para reduzir o tempo de simulação e as exigências computacionais. O valor do coeficiente de dispersão axial é determinado directamente da resposta da rede a uma perturbação em degrau de *tracer*, comparando o valor e a expressão analítica obtida pelo modelo de dispersão axial do segundo momento estatístico da resposta. A influência das características geométricas e das distribuições das dimensões características da rede é analisada em detalhe. As previsões do simulador estão de acordo com o comportamento observado experimentalmente. A comparação com dados experimentais mostra que o modelo é válido para valores elevados e baixos de porosidade. Um parâmetro de correcção função apenas da porosidade foi definido e determinado usando dados experimentais.

- Por fim, no Capítulo 6, resumem-se as principais conclusões deste trabalho e algumas sugestões de trabalho futuro são feitas tomando em conta os resultados obtidos neste trabalho.

Os apêndices correspondentes aos Capítulo 3, 4 e 5, e referenciados ao longo da dissertação, encontram-se no CD anexado a esta dissertação.

2. Revisão Bibliográfica

2.1 Introdução

Na natureza e em grande número de aplicações práticas é comum encontrar meios porosos. À escala microscópica e num sentido lato, virtualmente todos os materiais sólidos podem ser considerados como porosos, com excepção de estruturas metálicas, rochas densas e alguns plásticos (Dullien, 1992). Dispor de modelos adequados que permitam prever o comportamento dos meios porosos e dos fenómenos de transporte que neles ocorrem pode ser fundamental em muitas áreas científicas e tecnológicas. Algumas das áreas em que este conhecimento é vantajoso são listadas de seguida, sem pretender, no entanto, ser exaustivo (Kaviany, 1995; Sahimi, 1995).

- Engenharia de processos químicos: reactores de leito fixo, filtração, secagem, *trickle bed reactors*, cromatografia, adsorção/desorção, permuta iónica, *fuel cells*, conversores catalíticos para redução das emissões de poluentes em automóveis, colunas de absorção com e sem reacção química, colunas de destilação com ou sem reacção química.
- Engenharia ambiental: migração de contaminantes no solo e através de lençóis freáticos, irrigação, limpeza de solos por injeção de vapor, incineração.
- Reservatórios naturais: produção de gás e petróleo, produção de gás natural, escoamento em minas de água.

- Engenharia mecânica: isolantes térmicos, combustão envolvendo pirólise de materiais reactivos ou não, tribologia e lubrificação, reactores nucleares com arrefecimento por gases, solidificação ou fusão de misturas binárias, desumidificação, sinterização e agregação de partículas por compressão e aquecimento.
- Construção civil: penetração de humidade em materiais porosos e desenvolvimento de estratégias de protecção para evitar a degradação destes pela difusão de água através dos mesmos, análise da retenção de água de barragens e fluxo através do leito destas.

Actualmente, existem fortes pressões para a adopção de processos mais eficientes do ponto de vista energético e de consumo de matérias-primas. Além dos evidentes ganhos económicos, estes tornam-se mais “amigos” do ambiente, com a emissão de menor quantidade de poluentes. Apenas com uma compreensão mais rigorosa dos fenómenos de transporte que ocorrem no interior de um meio poroso, podem ser implementadas as alterações mais adequadas ou podem ser desenvolvidos processos mais eficientes.

O trabalho de Darcy (1856) sobre o escoamento de água através de um leito de enchimento formado por partículas de areia é considerado como o ponto de arranque nos estudos dos fenómenos de transporte através de um meio poroso. Este autor observou que a queda de pressão através de um leito de partículas é proporcional ao caudal volumétrico. Esta relação de proporcionalidade é designada actualmente por lei de Darcy. A constante de proporcionalidade depende da viscosidade do fluido e de um parâmetro que depende apenas das características do meio poroso, a permeabilidade, k . Apesar desta relação ter sido proposta a partir de dados experimentais, é possível mostrar que ela é válida desde que a velocidade do escoamento seja baixa, ou seja, quando o regime de escoamento seja laminar (Whitaker, 1986).

Inicialmente, as estratégias de descrição dos fenómenos de transporte num meio poroso eram empíricas e baseadas em dados experimentais, os quais eram usados para determinar os valores das constantes do modelo empírico. Os resultados obtidos são válidos apenas para descrever o comportamento do tipo de meios porosos nos quais os dados experimentais foram obtidos. Apesar destes problemas, o nível de conhecimentos e a capacidade de cálculo não permitiam a utilização de estratégias mais rigorosas. Em Scheidegger (1960) são apresentadas algumas das expressões desenvolvidas, com a inclusão das limitações inerentes a cada uma delas.

Modelos com o objectivo de fornecer uma descrição mais rigorosa e aplicável a um conjunto alargado de meios porosos devem tomar em atenção as características da estrutura porosa em que se dão os fenómenos de transporte. O nível de detalhe que é necessário introduzir no modelo depende dos seus objectivos e da possibilidade ou não de se obterem resultados. Quase sempre, as disponibilidades computacionais e de tempo para a obtenção de uma resposta são os factores limitantes.

Modelos deste tipo foram desenvolvidos de modo a substituir os modelos empíricos iniciais. Para permitir o tratamento matemático e/ou computacional das equações que descrevem os fenómenos que ocorrem no meio poroso, modelos simplificados da estrutura do meio poroso são em geral utilizados. O sistema de equações de conservação reflecte a influência das várias fases presentes no meio poroso e a resolução deste permite descrever o comportamento do meio, sem a necessidade do recurso a parâmetros empíricos. O aumento do rigor leva a um aumento do grau de complexidade das equações a resolver, passando a ser necessário recorrer a métodos numéricos na maior parte dos casos. O aumento das capacidades computacionais possibilita a utilização de modelos cada vez mais rigorosos e utilizando cada vez mais informação das características do meio.

O modelo do meio poroso adoptado neste trabalho é baseado na utilização de redes de elementos simples. Da grande quantidade de processos que podem ocorrer no interior de um meio poroso, neste trabalho são apenas analisados o transporte de quantidade de movimento e de massa, tendo sido impostas algumas restrições.

- No transporte de quantidade de movimento, apenas é considerado o escoamento de fluidos incompressíveis e newtonianos através de leitos de enchimento.
- Para a transferência de massa através de um meio poroso, estuda-se apenas a situação em que o transporte de massa é dominado pela convecção do fluido.

Na Secção 2.2 são descritos os parâmetros mais importantes que caracterizam um meio poroso e os modelos simplificados para descrever a sua estrutura interna. Nas Secções 2.3 e 2.4 serão revistos modelos utilizados no estudo do escoamento e do transporte de massa por convecção através de meios porosos.

2.2 Caracterização e Modelização de Meios porosos

2.2.1 Definição e Características Gerais

De acordo com Dullien (1992), para um material ser considerado como um meio poroso deve verificar pelo menos uma das condições seguintes.

- Conter espaços vazios relativamente pequenos, geralmente designados por *poros*, no interior de uma matriz sólida ou semi-sólida. Os poros contêm normalmente um fluido, como ar, água, petróleo, ou uma mistura de vários fluidos.
- Deve ser permeável a alguns tipos de fluidos, isto é, estes fluidos deverão poder penetrar no meio poroso através de uma face e emergir na outra face. O tipo de fluido que pode atravessar um determinado meio poroso depende tanto das características do fluido como das do próprio meio, para além das condições termodinâmicas em que decorre o escoamento do fluido. Meios porosos com esta propriedade dizem-se *meios porosos permeáveis*.

A segunda condição exige que o escoamento através do meio poroso seja viscoso e é caracterizada por um parâmetro, designado por *permeabilidade*, independente das propriedades do fluido. Esta propriedade implica que as dimensões características dos espaços vazios atravessados pelo fluido são muito maiores que as dimensões das moléculas de fluido que o atravessa. A estrutura dos meios porosos depende fortemente da sua génese. Em função do tipo de interligações entre os elementos (partículas) que os constituem, é possível dividi-los em duas classes principais.

Se for possível distinguir visualmente os seus elementos constituintes e separá-los fisicamente, o meio poroso designa-se como *meio poroso não consolidado*. Meios porosos deste tipo podem ser criados por deposição de partículas no interior de um contentor, como se pode observar na Figura 2.1. Leito de enchimento é a designação normalmente usada para este tipo de meio poroso, reflexo da forma como estes são gerados na prática. Apenas a fase associada aos vazios do meio poroso é contínua, sendo a estrutura desta definida pelo posicionamento relativo das partículas, que formam a fase sólida descontínua.

Se a fase sólida for contínua, ou não for possível distinguir as partículas que formam a estrutura do meio, este designa-se por *meio poroso consolidado*. Meios porosos deste tipo podem ser formados de diferentes formas, como por exemplo pela dissolução de uma matriz

sólida, ou pela compressão e/ou aquecimento das partículas de um meio não consolidado, como se pode observar na Figura 2.1. Uma descrição detalhada dos mecanismos de formação dos meios consolidados, assim como das suas propriedades de transporte, encontra-se em Sahimi (1995).

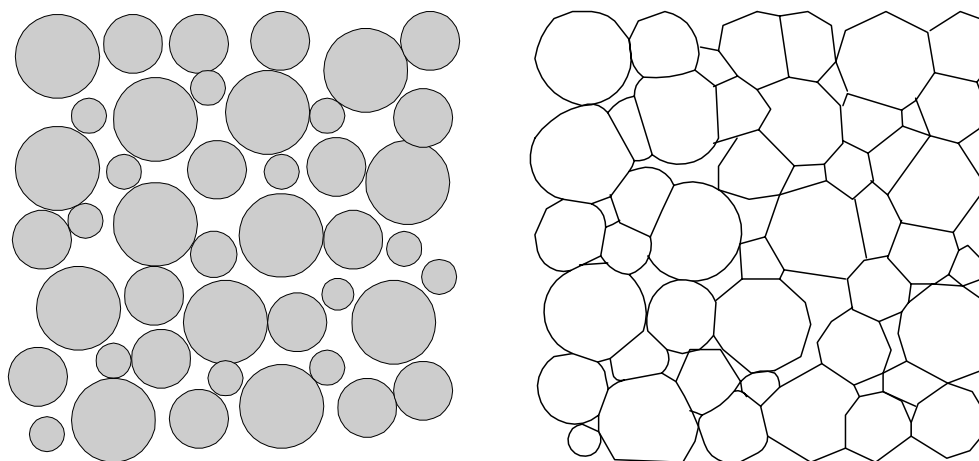


Figura 2.1 Estado inicial e final de um enchimento de partículas após sinterização por compressão e/ou aquecimento (Sahimi, 1995).

Neste trabalho apenas são estudados os fenómenos de transporte que ocorrem em meios porosos não consolidados, em particular leitos de enchimento como os que são utilizados em muitos processos químicos industriais. Apesar desta restrição, os modelos que são discutidos nesta secção e desenvolvidos nas seguintes podem ser aplicados na análise do comportamento de meios porosos consolidados, com as modificações adequadas.

2.2.2 Parâmetros Macroscópicos

Nesta secção são descritos os parâmetros macroscópicos utilizados normalmente para a descrição de um meio poroso. Estes parâmetros são usados como dados para os modelos de descrição dos fenómenos de transporte no interior de um meio poroso, dependendo o tipo e a qualidade destes dos objectivos e das equações do modelo. Em todos os casos, assume-se que o meio poroso é estatisticamente homogéneo, não se tomando em conta as possíveis heterogeneidades existentes no seu interior. Apesar de a grande maioria dos meios porosos reais serem heterogéneos ao nível local, em muitos casos é possível considerá-los como sendo macroscopicamente homogéneos desde que as respectivas propriedades sejam determinadas convenientemente.

2.2.2.1 Porosidade

Um dos parâmetros mais importante de caracterização de um meio poroso ao nível macroscópico é a porosidade, ou seja, a razão entre o volume de vazios, V_v , e o volume total da amostra, V_T ,

$$\varepsilon = \frac{V_v}{V_T} \quad (2.1)$$

A fracção volumétrica associada aos canais através dos quais ocorre escoamento de fluidos designa-se por *porosidade efectiva* e corresponde à porosidade associada aos canais interligados entre si. Para meios não consolidados, a porosidade total e efectiva são aproximadamente iguais, podendo no entanto ser muito diferentes para meios consolidados, dependendo da forma como o meio foi criado. Neste tipo de meios, é comum a existência de poros sem saída ou isolados, que não contribuem significativamente para o escoamento, podendo a porosidade efectiva ser bastante distinta da porosidade real.

Deste modo, o valor da porosidade definido pela Equação 2.1 pode não ser o mais adequado para a descrição de certos tipos de fenómenos de transporte no interior de um meio poroso. Por exemplo, no transporte de massa através de um meio poroso, a existência de poros sem saída ou nos quais a velocidade do fluido seja baixa influencia o seu comportamento, sendo um factores que origina a formação de caudas nas curvas de *breakthrough*. Diferentes técnicas experimentais existem para determinar a porosidade, sendo as mesmas descritas e comparadas em Dullien (1992).

2.2.2.2 Área Superficial Específica

A área superficial específica, A_{sp} , é definida como sendo a razão entre a área superficial do espaço vazio, isto é, a área interfacial entre o sólido e o fluido, e o volume total da amostra do meio poroso. Este parâmetro representa uma medida da área de contacto entre a fase sólida e a fase fluida, aspecto importante num grande número de processos. Por exemplo, este parâmetro é uma medida da capacidade de adsorção de adsorventes industriais e influencia fortemente o desempenho de certos processos, como é o caso de reactores de leito fixo contendo partículas de catalisador ou unidades de absorção química, caracterizadas normalmente através deste parâmetro associado a um coeficiente de transferência de massa entre fases (Dullien, 1992).

É possível também definir uma área superficial efectiva, correspondente à parte do meio poroso importante na caracterização dos fenómenos de transporte. Em leitos de enchimento, os dois valores devem ser praticamente iguais. Para o escoamento de fluidos, este parâmetro é importante na análise da influência da interface entre sólido e fluido, onde as forças de fricção se fazem sentir com mais intensidade.

2.2.2.3 Caracterização das Partículas em Leitos de Enchimento

O comportamento de meios porosos não consolidados depende muitas vezes das propriedades das partículas que os constituem, em particular, da sua forma geométrica e da distribuição das suas dimensões características.

O diâmetro equivalente, D_p , é definido como sendo o diâmetro da esfera com o mesmo volume da partícula (McCabe *et al.*, 1985). Este valor pode ser determinado recorrendo, por exemplo, à relação $D_p = 6/A_{sp}$, se a área superficial específica for conhecida. Se este valor não for conhecido, o diâmetro nominal obtido por peneiração pode também ser usado como diâmetro equivalente.

A expressão acima apresentada é adequada apenas quando as partículas possuem uma forma aproximadamente esférica. Para partículas de forma irregular, define-se um factor de esfericidade, ϕ , definido pela seguinte expressão

$$\phi = \frac{6}{D_p} \frac{V_p}{S_p} \quad (2.2)$$

Valores do factor de esfericidade para partículas de diferentes formas podem ser encontrados na literatura (McCabe *et al.*, 1985).

Em muitas aplicações, as partículas que constituem um leito de enchimento não possuem um diâmetro uniforme, mas antes uma distribuição de tamanhos. Neste caso é comum determinar um valor médio para o diâmetro das partículas do leito de enchimento, que vai funcionar como o respectivo diâmetro equivalente. Nesta simplificação encontra-se implícita a hipótese de que o comportamento de um leito de enchimento constituído por partículas de diâmetro constante e igual a este valor médio é idêntico ao do leito de enchimento formado pelas partículas com uma distribuição de tamanhos.

Finalmente a forma das partículas exige muitas vezes que se defina mais do que uma dimensão característica, de modo a ser possível a sua caracterização geométrica adequada.

2.2.3 Modelização de Meios Porosos

A situação óptima no estudo dos fenómenos de transporte no interior de um meio poroso seria utilizar a estrutura real deste. Com excepção de alguns casos especiais de meios porosos, em que a estrutura é definida e criada de modo rigoroso, esta situação ainda não pode ser alcançada, devido a várias razões. Experimentalmente, a resolução espacial dos métodos disponíveis para caracterizar a estrutura local de um meio poroso ainda não é suficiente para fazê-lo rigorosamente. O uso de técnicas de ressonância magnética nuclear, *RMN* (Gladden, 1993, 1994; Gladden *et al.*, 1995) e de análise de imagem (Mata, 1998; Mata *et al.*, 2001a e 2001b) permitem a descrição detalhada de apenas alguns meios porosos, não sendo aplicáveis a todos.

Do ponto de vista teórico e computacional, os métodos e as capacidades de cálculo disponíveis ainda limitam fortemente o nível de informação estrutural que é possível incorporar no modelo. O problema principal reside na forma como a interface entre as fases sólida e fluida é tomada em conta na resolução das equações de balanço, em particular a imposição das condições fronteira. Alguns trabalhos foram apresentados recentemente em que a estrutura real do meio poroso é utilizada (Manz *et al.*, 1999; Dwyer *et al.*, 1999). Apesar dos bons resultados obtidos por estes autores, as limitações referidas ainda condicionam fortemente as dimensões dos meios porosos estudados.

É imperativo então usar um modelo simplificado da estrutura do meio poroso. As estratégias apresentadas na literatura podem ser divididas em duas classes principais, em função da forma como as equações de conservação são escritas e resolvidas. A primeira assume que a partir das características do meio poroso é possível obter as características de um meio homogéneo, possuindo este o mesmo comportamento do meio original. Visto que se pretende nesta estratégia que o comportamento macroscópico seja idêntico, consideram-se estes modelos como sendo macroscópicos.

A outra classe de modelos pretende descrever o comportamento local do meio poroso e a partir daí determinar o comportamento macroscópico deste. Os modelos deste tipo podem ser divididos em dois tipos principais (Dullien, 1992).

- A estrutura local de vazios pode ser descrita a partir da geometria das partículas e da forma como se encontram empilhadas (Chan e Ng, 1989; Thompson e Fogler, 1997). Este tipo de modelos é válido para meios porosos não consolidados, embora tenham sido apresentadas extensões para meios consolidados em circunstâncias especiais (Larson e Hidgon, 1989). Muitas vezes, caso a estrutura do meio poroso seja regular, o comportamento do meio poroso pode ser representado com recurso a uma única célula representativa da estrutura do meio.
- No outro tipo de modelos é tomado em consideração que a resistência ao escoamento é controlada sobretudo pelas constrições existentes entre os elementos da rede (Van Brakel, 1975; Dullien, 1992). Estes poros que ligam entre si poros de maiores dimensões são semelhantes a capilares, podendo um enchimento qualquer ser visualizado como sendo uma rede de capilares interligados entre si.

O modelo mais adequado para a descrição do comportamento local de um meio poroso depende da sua estrutura, dos objectivos do estudo, da capacidade de obtenção dos parâmetros necessários para aplicar o modelo e das capacidades computacionais disponíveis para resolver o respectivo problema numérico. Neste trabalho foi usado um modelo do segundo tipo, em que a estrutura local do meio poroso é descrita por uma rede de elementos simples interligados entre si, pelo que a seguir serão descritos em detalhe apenas este tipo de modelos.

2.2.4 Modelos de Redes

Uma classe de modelos simplificados da estrutura porosa ao nível local consiste em substituí-la por uma rede de elementos simples interligados entre si, designados de uma forma geral por *poros*. A forma geométrica, as dimensões características e o modo como os poros se ligam entre si são dependentes da estrutura do meio. Com a excepção de algumas casos especiais, em que a estrutura do meio é controlada, é em geral necessário definir uma ou mais estruturas simples para estes poros.

A distribuição de dimensões características dos poros é designada por distribuição de tamanhos de poros, DTP. Várias estratégias de determinação da DTP são apresentadas na literatura. Quase sempre torna-se necessário admitir uma estrutura inicial para a rede de capilares de modo a ser possível determinar a DTP a partir de dados experimentais obtidos ao nível macroscópico, dependendo a selecção da estrutura do tipo de informação disponível, dos fenómenos que se pretendem descrever e como esta vai ser construída (Dullien, 1992;

Mayagoitia *et al.*, 1997; Adler e Thovert, 1998; Mata, 1998; Ramirez-Cuesta *et al.*, 2001; Mata *et al.*, 2001a e 2001b).

A DTP e a definição dos vários tipos de elementos e do modo como estes estão ligados entre si define o *modelo de rede*. Muitas vezes, como os poros da estrutura porosa possuem uma forma geométrica similar a tubos e as suas dimensões características são bastante pequenas, é comum designar este tipo de modelos por redes de capilares. No entanto, este nome dá a entender que os elementos da rede possuem sempre uma geometria cilíndrica, o que não é verdade, visto que não existem restrições ao tipo de elementos que é possível utilizar, excepto aquelas impostas pela estrutura do meio poroso que se pretende descrever.

Os modelos de redes podem ser classificados quando à sua dimensionalidade, tipo de elementos usados e estrutura topológica. A dimensionalidade representa o número de dimensões espaciais tomadas em consideração na modelização dos fenómenos de transporte no meio poroso. De acordo com Van Brakel (1975) é possível ter modelos unidimensionais, bidimensionais, tridimensionais ou mesmo sem dimensão aparente, tendo este autor proposto uma classificação geral da grande quantidade de modelos propostos na literatura. A estrutura topológica é a característica do meio poroso que mais depende do número de dimensões significativas impostas no modelo, como se vai ver de seguida. Em relação ao tipo de elementos do modelo de redes, estes devem seleccionados de modo a simplificar a análise dos fenómenos de transporte mas ao mesmo tempo ser adequados para o meio poroso em estudo. Deste modo, a selecção dos elementos mais adequados depende mais do meio poroso e não tanto da dimensionalidade do modelo de redes.

2.2.4.1 Modelos Unidimensionais

Redes de capilares unidimensionais podem ser vistas como redes de elementos que não se intersectam entre si. Este tipo de modelos foram os primeiros modelos teóricos propostos para a modelização do comportamento de meios porosos, sendo a base da maior parte das correlações e equações utilizadas na prática actualmente. Na Figura 2.2 são apresentados exemplos deste tipo de modelos. Na maior parte das situações a estrutura do meio poroso é irregular, o que justifica a definição de elementos de secção variável. A selecção da geometria dos elementos depende muitas vezes do tipo de meio poroso que se pretende simular (Petersen, 1958; Turner, 1958; Blick, 1966; Fedkiw e Newman, 1977; Azzam e Dullien 1977; Duda *et al.*, 1983; Saéz *et al.*, 1986; Sharma e Yortsos, 1987a; Skjtene *et al.*, 1999). Do ponto de vista formal, a descrição dos fenómenos de transporte ao nível local passa a ser

bidimensional, embora ao nível macroscópico o comportamento do modelo do meio poroso é unidimensional.

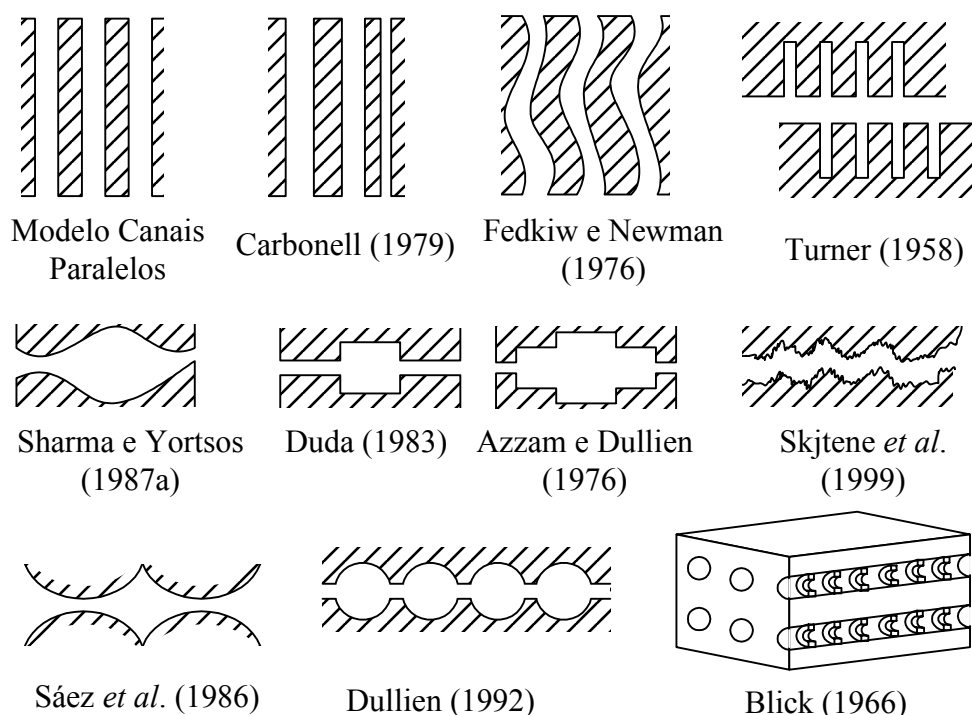


Figura 2.2 Exemplos de modelos de redes de capilares unidimensionais.

Como neste tipo de modelos não existem cruzamentos entre os elementos da rede, o comportamento de um elemento da rede não influencia os elementos contíguos. Tomando como exemplo o transporte de massa através de um modelo de redes unidimensional, não haveria transporte de massa por difusão radial, sendo as curvas de *breakthrough* apenas função da distribuição de valores de velocidade nos capilares (Carbonell, 1979).

Deste modo, é de esperar que a inclusão de interligações entre os elementos de um modelo de redes permita uma descrição mais adequada dos meios porosos. Apesar de alguns meios porosos possuírem estruturas geométricas em que praticamente não existem interligações entre poros (Irandoost e Anderson, 1988) e os modelos unidimensionais permitirem muitas vezes uma descrição qualitativa adequada do comportamento de um meio poroso (Ergun, 1952), a inclusão da interconectividade é em muitos casos decisiva. Uma descrição detalhada da evolução dos diferentes tipos de modelos de redes, das suas aplicações e das relações com outras áreas, em particular com a teoria da percolação, é apresentada em Berkowitz e Ewing (1998).

2.2.4.2 Modelos Bidimensionais e Tridimensionais

A descrição de muitos processos associados a meios porosos depende da inclusão da interconectividade natural do meio poroso, como por exemplo na análise dos resultados experimentais de porosimetria de mercúrio (Mata, 1998). De acordo com o modelo unidimensional de capilares, quase sempre utilizado na análise dos resultados da porosimetria de mercúrio, todos os poros possuem a mesma acessibilidade. No entanto, durante o processo de remoção do mercúrio que penetrou no interior do meio poroso, observa-se que uma fracção deste se mantém no interior do meio. Se o modelo de capilares paralelos fosse válido, deveria sair todo o mercúrio que penetrou no meio poroso. Apenas assumindo um modelo em que a interconectividade entre os elementos da rede é tomada em conta explicitamente, é possível a modelização de um comportamento deste tipo (Mata, 1998).

Numa forma geral, modelos deste tipo podem ser descritos como sendo redes formadas por nós interligados entre si através de ramos. Os ramos são geralmente designados por poros, capilares ou canais, podendo apresentar qualquer das formas geométricas consideradas para os elementos de rede unidimensionais, apresentados na Figura 2.2. Os nós podem ter ou não existência física, conforme lhes for ou não atribuído um volume.

Ao contrário dos modelos de redes unidimensionais, em que a estrutura macroscópica da rede é regular, mesmo na situação em que os canais sejam irregulares ao nível local, é possível no caso dos modelos bi e tridimensionais definir modelos de redes com uma estrutura regular ou irregular. Designam-se por redes regulares aquelas em que é possível definir um bloco fundamental que, por repetição, permite a geração de uma rede com as dimensões pretendidas ou em que é possível definir um algoritmo de geração da estrutura da rede que pode ser estendido até às dimensões pretendidas, como por exemplo em redes de Bethe (Sahimi, 1993a).

Vários exemplos de redes bidimensionais regulares são apresentados na Figura 2.3. Além das diferentes formas geométricas seleccionadas para cada um dos elementos das redes, estas podem ser classificadas pelo número de canais associados a cada um dos nós da rede. Este parâmetro é designado por número de coordenação da rede, C , observando-se que para qualquer das redes apresentadas na Figura 2.3, C toma apenas ou dois valores constantes. De modo a assegurar que toda a estrutura da rede é regular, são muitas vezes impostas fronteiras periódicas na rede, em que se considera que um canal associado a um nó num dos lados da rede se encontra também associado a um nó no outro lado da rede. De notar que não é

possível impor fronteiras periódicas em todas as redes regulares apresentadas na Figura 2.3, como é o caso da rede de Bethe (Sahimi, 1995) ou das redes usadas por Torrelli e Scheidegger (1972) ou Andrade *et al.* (1998).

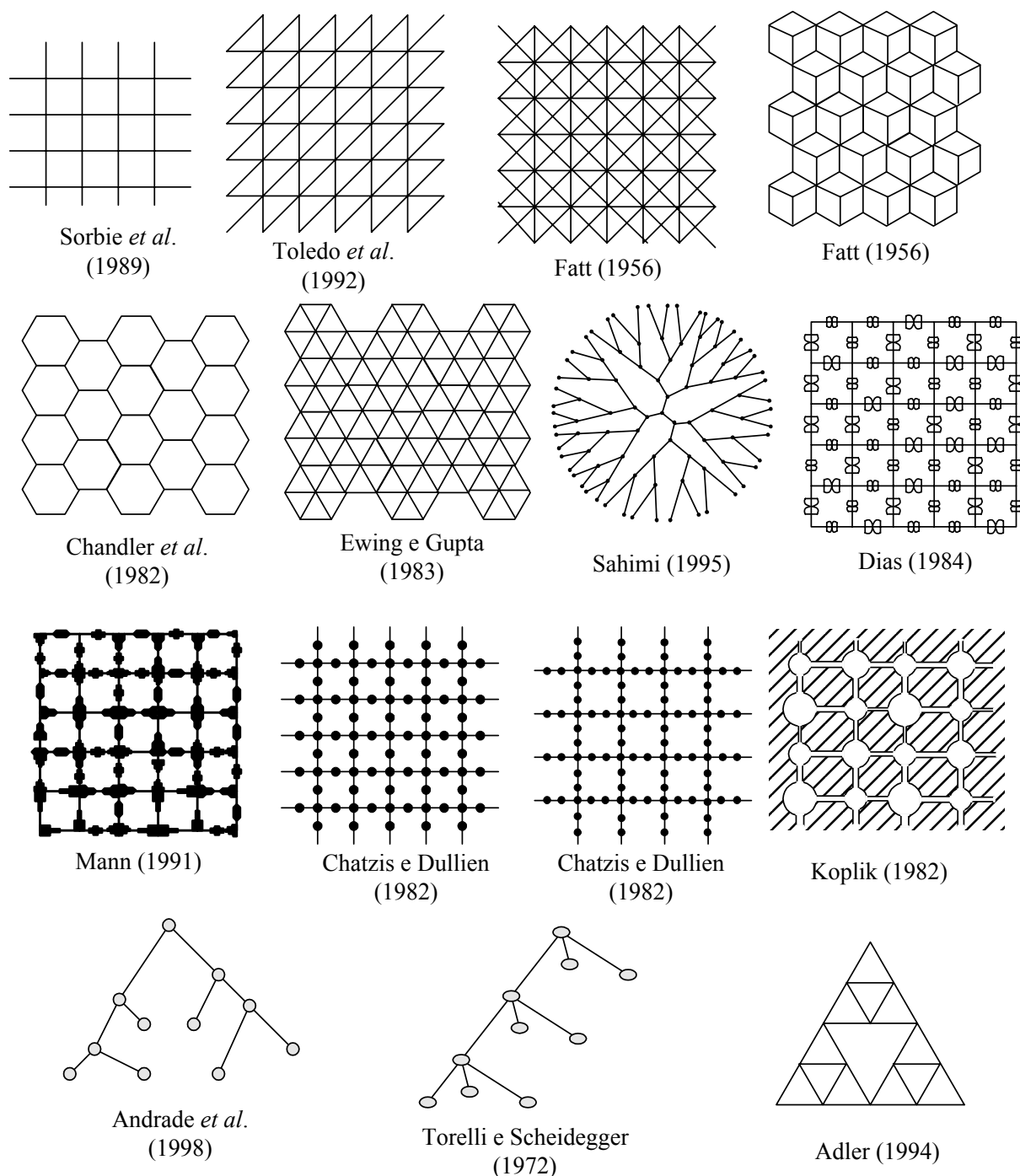


Figura 2.3 Exemplos de redes bidimensionais – modelos de estrutura regular.

O valor do número de coordenação mais adequado depende das características do meio poroso que se está a simular. Para as redes bidimensionais apresentadas, o número de coordenação pode ser constante e variar desde $C = 3$ (Chandler *et al.*, 1982), $C = 4$ (Koplik,

1982; Dias e Payatakes, 1986a e 1986b; Mann, 1991; Sorbie *et al.*, 1991; Toledo *et al.*, 1992), $C = 6$ e $C = 3$ (Fatt, 1956) e $C = 8$ (Fatt, 1956), ou tomar diversos valores na mesma rede, como é caso das redes utilizadas por Chatzis e Dullien (1977) em que este parâmetro possui valores de dois ou quatro conforme a posição do nó. Na maior parte dos modelos assume-se que o espaçamento entre os nós é constante, embora alguns autores tenham concluído que esta hipótese pode não ser a mais adequada para uma descrição apropriada dos fenômenos de transporte através de um meio poroso (Bryant e Blunt, 1993a).

Na maioria das redes apresentadas na Figura 2.3 é possível definir uma célula fundamental a partir da qual uma rede de quaisquer dimensões pode ser gerada. Para a rede de Bethe (Sahimi, 1995), a estrutura fractal de Adler (1994) ou a estrutura ramificada de Andrade *et al.* (1998), a rede não é gerada através da definição de um bloco fundamental, mas sim a partir de um elemento no qual é definida uma relação de recorrência. Por exemplo, em relação à rede de Bethe, partindo-se inicialmente de um ou mais pontos centrais (na Figura 2.3 é considerado um), cada nó ramifica-se sucessivamente, assegurando o mesmo valor do número de coordenação em todos os nós da rede. As redes utilizadas por Torelli e Scheidegger (1972) e Andrade *et al.* (1998) são similares mas seguem esquemas de ramificação diferentes. A rede apresentada por Adler (1994) tem o nome de *Sierpinsky Gasket* e representa um exemplo de uma estrutura fractal, obtida também pela aplicação de um algoritmo recursivo a partir de uma geometria regular, neste caso um triângulo. Outros exemplos de redes deste tipo são apresentados por Adler e Thovert (1993) e Adler (1994).

Modelos de redes bidimensionais não regulares são redes que não verificam pelo menos uma das duas características consideradas atrás sendo alguns exemplos apresentados na Figura 2.4. É possível observar que alguns destes podem ser considerados como extensões dos modelos regulares bidimensionais apresentados na Figura 2.3. Por exemplo, o modelo irregular de Mann (1991) pode ser considerado como uma extensão do modelo regular, em que a posição relativa entre nós e poros é variada de modo aleatório. Por outro lado, modelos irregulares podem ser obtidos modificando o comprimento dos poros entre os canais, variando localmente o número de coordenação em redes regulares ou modificando a orientação local dos elementos da rede (Mann *et al.*, 1986; Mann, 1991; Blunt e King, 1990; Ewing e Gupta, 1993; Sahimi, 1995). Outro caso típico de redes bidimensionais irregulares está relacionado com redes possuindo zonas com características muito diferentes, tanto no número de coordenação dos nós como na densidade de poros presentes em cada um delas (Acuna e

Yortsos, 1995). Este último tipo de modelos de redes é aplicado sobretudo a redes de fracturas.

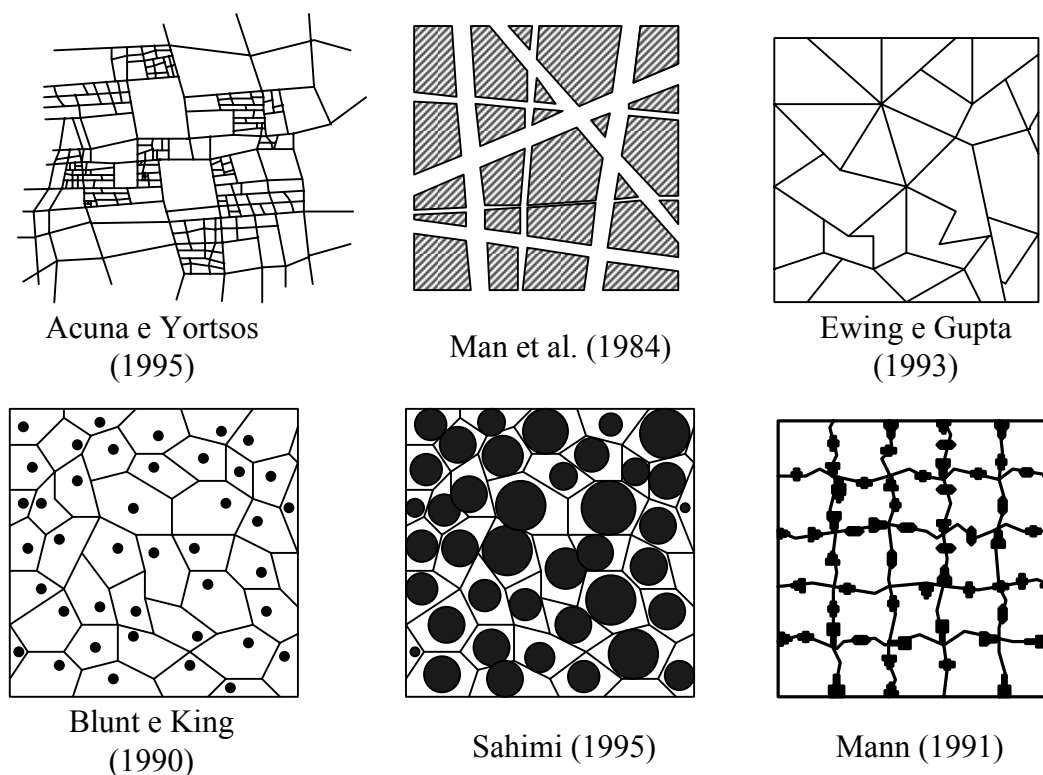


Figura 2.4 Exemplos de redes bidimensionais – modelos com estrutura irregular.

Modelos de redes tridimensionais podem ser considerados como extensões dos modelos bidimensionais, em que é permitido que os nós da rede se interliguem entre si segundo uma terceira direcção espacial. De um modo semelhante aos modelos de redes bidimensionais as redes tridimensionais podem ser também regulares e irregulares.

Na Figura 2.5 são apresentados alguns exemplos de modelos tridimensionais de redes regulares propostos na literatura. Os modelos de Friedman e Seaton (1996) e Rieckmann e Keil (1997) são exemplos típicos de modelos de rede tridimensionais em que o número de coordenação é constante, variando apenas na forma como os nós se encontram interligados entre si. Sherwood (1993) considerou também um modelo de redes tridimensional regular com estrutura cúbica simples, em que os elementos possuem uma forma de placas, forma geométrica mais conveniente por exemplo para meios porosos consolidados. Ionnandis e Chatzis (1993) consideraram também elementos rectangulares tomando em conta que os nós da rede possuem um volume não nulo. Como em modelos de redes bidimensionais, é possível definir também estruturas fractais, como por exemplo o *Sierpinski Gasket*, definido a partir de um cubo sólido e uma relação de recorrência especificada (Adler, 1994).

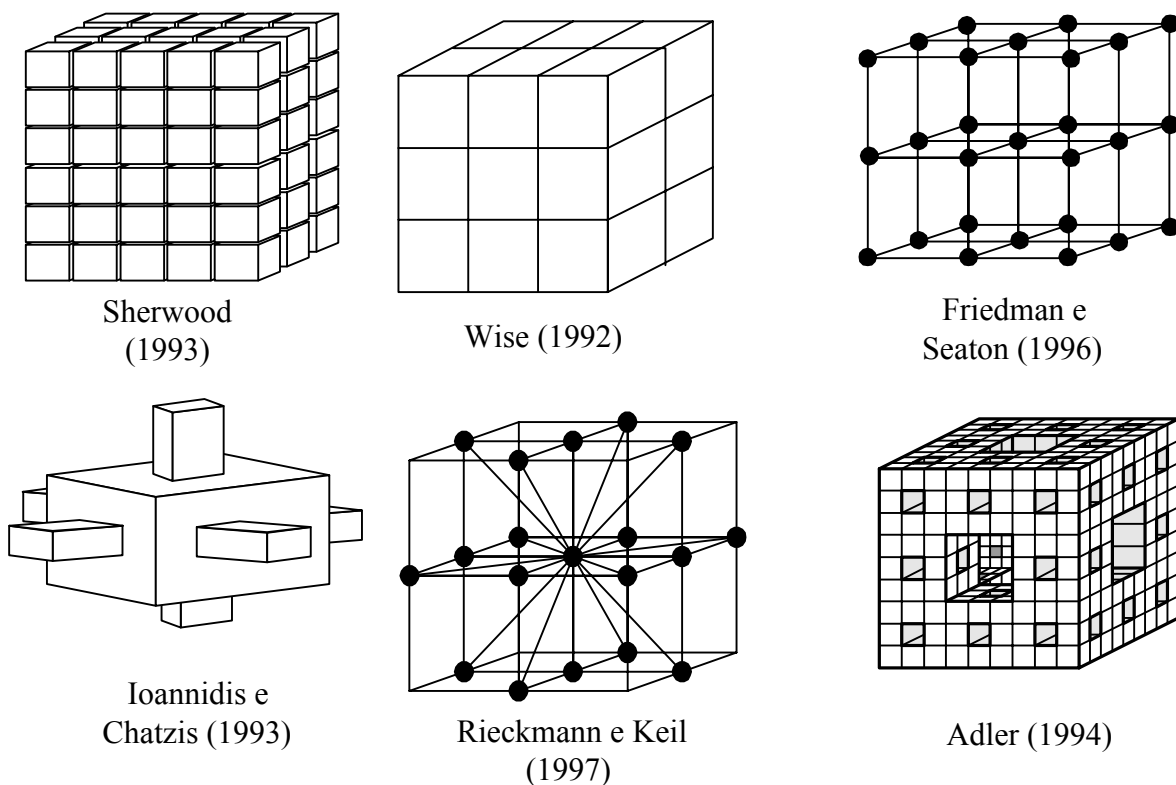


Figura 2.5 Exemplos de modelos de redes tridimensionais regulares.

Na Figura 2.6 são apresentados alguns exemplos de modelos de redes tridimensionais não regulares. Estes podem ser obtidos a partir de modelos de redes regulares mas em que se fez variar o número de coordenação dos nós da rede (Friedman e Seaton, 1996) ou então através de uma estrutura irregular, em que os elementos da rede podem tomar qualquer posição.

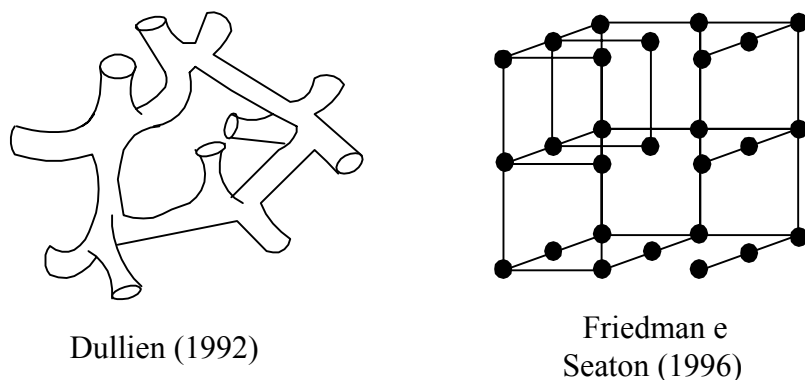


Figura 2.6 Exemplos de modelos de redes tridimensionais irregulares.

Hollewand e Gladden (1992) geraram redes tridimensionais irregulares através do posicionamento aleatório de nós em três dimensões, de modo a simular a estrutura não regular de um meio poroso, mantendo no entanto um número de coordenação constante para os nós da rede. Blunt e Bryant (1990) colocaram também nós de forma aleatória a duas e três dimensões, mas, em vez de definirem uma rede com um número de coordenação constante, definiram uma tesselação (*Tessellation*) para constituir o meio poroso.

2.2.4.3 Outros Modelos

Na descrição do transporte de massa através de um meio poroso, em particular através de leitos de enchimento, é comum o uso de modelos de tanques agitados na modelização. Na Figura 2.7 são apresentados alguns exemplos deste tipo de modelos. Na sua forma inicial, estes modelos procuraram apenas descrever a mistura do fluido através de um meio poroso e determinar uma medida do desvio do fluxo pistão do escoamento neste (Fogler, 1992). A estrutura é equivalente a um modelo de redes unidimensional, em que a influência das ligações entre os tanques perfeitamente agitados é desprezada. Neste tipo de modelos as ligações ou ramos não influenciam o comportamento do meio poroso.

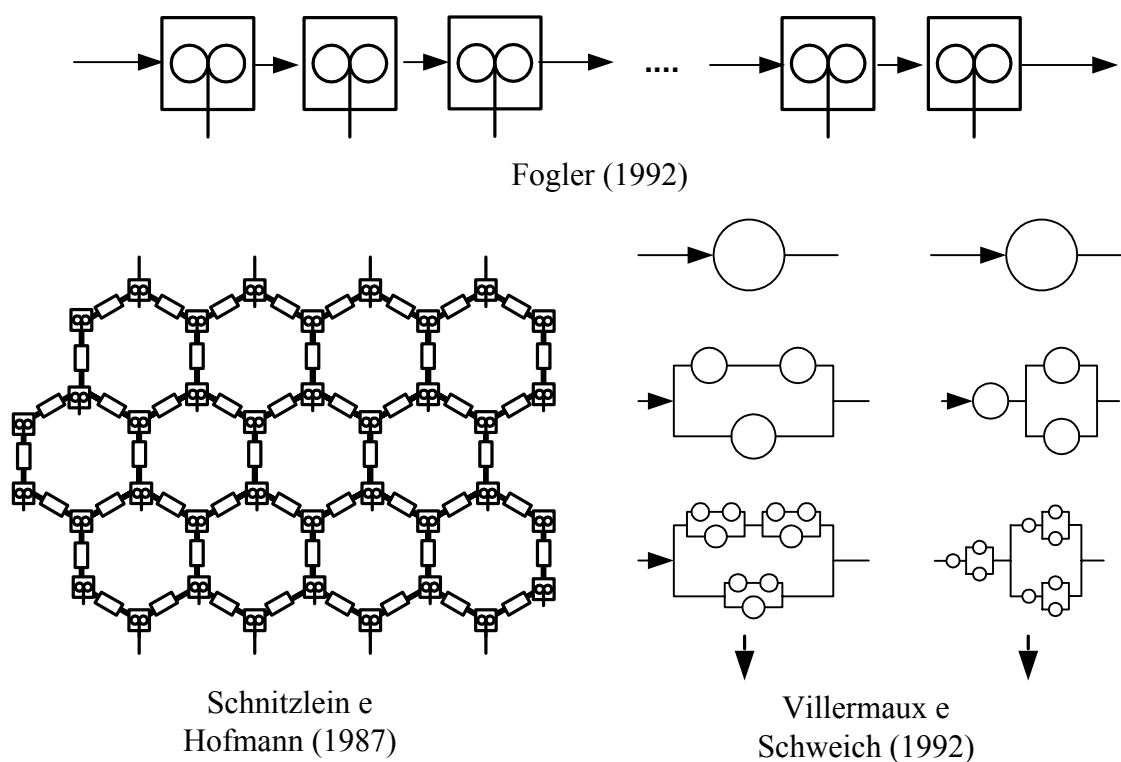


Figura 2.7 Exemplos de modelos de tanques agitados.

Extensões destes modelos a duas dimensões foram também propostas na literatura. Schnitzlein e Hofmann (1987) propuseram um modelo de tanques agitados em que a influência das ligações é tomada em conta explicitamente, sendo este modelo equivalente a um modelo de redes bidimensional com um número de coordenação igual a três. Schnitzlein e Hofmann (1987) analisaram a forma de aplicar este modelo a um reactor de leito fixo, tendo prestado atenção especial à modelização adequada da zona próxima da parede. Villermux e Schweich (1992) e Russel e LeVan (1997) propuseram a utilização de um modelo de tanques agitados com estrutura fractal, sendo apresentados dois exemplos na Figura 2.7.

Apesar de na maior parte dos estudos sobre o transporte de massa através de um meio poroso com base em modelos de rede os nós servirem apenas como nós de mistura com acumulação desprezável de massa, o simples facto de se misturarem correntes pode levar a considerar qualquer modelo de redes como sendo similar a um modelo de tanques agitados.

2.2.5 Forma Geométrica e Distribuição de Tamanhos de Poros

Além da estrutura geométrica e interligações entre os elementos da rede, outras características devem ser definidas, em particular a forma dos elementos e as suas dimensões características. De seguida é descrito como estas e outras características podem ser definidas e a forma de as obter com base em dados experimentais ou da criação de meios porosos em computador.

Na maioria dos trabalhos, assume-se que o volume dos nós é desprezável em relação ao volume associado aos ramos, embora em alguns trabalhos esta hipótese tenha sido relaxada (Ionnanidis e Chatzis, 1993; Thauvin e Mohanty, 1998; Wang *et al.*, 1999b) e actualmente se considere que a maior parte do volume de um meio poroso está associado aos vazios que não representam ramos da rede (Berkowitz e Ewing, 1998). Noutros trabalhos o volume dos nós é associado aos canais, através da definição de zonas adicionais nos extremos destes. Deste modo, os elementos da rede vão possuir zonas com diferentes características geométricas, em particular constrições e expansões (Dias e Payatakes, 1986a; Constantinides e Payatakes, 1989). Do ponto de vista formal, qualquer um dos elementos apresentados na Figura 2.2 pode servir de base a um modelo de redes em que se considera a existência de mais do que um tipo de elementos no meio poroso. Existem ainda trabalhos em que elementos diferentes são considerados tanto para os nós como para os ramos (Thauvin e Mohanty, 1998; Wang *et al.*, 1999b).

Excepto em situações em que as características geométricas do meio poroso são controladas, a estrutura de um meio poroso possui uma estrutura local irregular, observando-se em particular variações das dimensões características dos elementos que o constituem. De modo a descrever estas características, as dimensões características dos elementos da rede são descritas por distribuições estatísticas, que podem ser inferidas ou determinadas a partir de dados experimentais, obtidos por exemplo por porosimetria de mercúrio ou por análise de imagem. Estas distribuições designam-se em geral por *Distribuição de Tamanhos de Poros* (DTP). O tipo de função de distribuição a utilizar depende da estrutura local e da forma como o meio poroso foi gerado. Para leitos de enchimento, desde que a distribuição de tamanhos das partículas possua um valor de desvio padrão baixo e estas não possuam uma forma muito

diferente da esférica, observa-se experimentalmente e por simulação que a distribuição de tamanho de poros tem características gaussianas com baixa dispersão (Nolan e Kavanagh, 1994; Rouault e Assouline, 1998). Para meios porosos consolidados e leitos de enchimento de partículas irregulares ou com uma distribuição larga de dimensões características, a DTP pode ser muito larga, podendo ter mais do que um máximo (Dullien e Dhawan, 1975; Loh e Wang, 1995). Em geral, não é possível definir regras que permitam conhecer à partida a DTP adequada de um dado meio poroso a partir das suas características e elementos constitutivos. Na grande maioria dos trabalhos são funções de distribuição típicas e cuja descrição matemática seja simples bem conhecida, sendo alguns exemplos apresentados de seguida.

- Distribuições uniformes, isto é qualquer tamanho tem igual probabilidade de ocorrer (Petropoulos *et al.*, 1989; Nicholson *et al.*, 1988). Esta é a forma mais simples de se gerarem distribuições em computador. Este tipo de distribuição assume que a estrutura de um meio poroso é completamente aleatória.
- Distribuições pontuais (Sahimi, 1993b). Neste tipo de distribuições, assume-se que as dimensões características dos elementos apenas podem tomar certos valores. Um exemplo de utilização deste tipo de distribuições é o estudo do comportamento de um meio poroso próximo do seu limiar de percolação (Sahimi, 1995).
- Distribuições normais ou gaussianas têm sido utilizadas por muitos autores, visto ser fácil a determinação dos seus parâmetros a partir de dados experimentais (Nicholson e Petropoulos, 1968 e 1971). Este tipo de distribuição não permite a inclusão de caudas existentes na DTP e apresentam uma probabilidade não nula para a existência de canais com dimensões características menores que zero. Este último problema é resolvido truncando a distribuição normal (Constantinides e Payatakes, 1989) ou usando a distribuição log-normal, que apenas pode tomar valores positivos (Hampton *et al.*, 1993; Zhang e Seaton, 1994; Suchomel *et al.*, 1998a).
- Distribuições não simétricas permitem que a DTP seja não simétrica em relação ao valor médio, o que se verifica em muitas situações. Exemplos deste tipo de distribuições incluem a distribuição Chi-quadrado, χ^2 (Nicholson e Petropoulos, 1968), distribuições triangulares (Nicholson e Petropoulos, 1973; Nicholson *et al.*, 1988), distribuição de Rayleigh (Avilés e LeVan, 1991; Deepak e Bhatia, 1994), distribuição de Weibull (Ioannidis e Chatzis, 1993), distribuição exponencial truncada (Novakowski e Bogan,

1999), distribuição de Haring e Greenkorn (Haring e Greenkorn, 1970; Sorbie *et al.*, 1989).

Alguns autores utilizaram directamente a DTP experimental. Azzam e Dullien (1976), Imdakm e Sahimi (1987 e 1991), Rege e Fogler (1987) utilizaram as distribuições experimentais das dimensões características recorrendo a técnicas de porosimetria de mercúrio e/ou de análise de imagem.

Do ponto de vista formal, a utilização de distribuições obtidas recorrendo a dados experimentais parece ser superior a assumir uma função de distribuição analítica. Devido à disponibilidade de equipamento experimental desenhado especialmente para a determinação de distribuições de tamanhos de poros por porosimetria de mercúrio, tem sido este o método preferido para a determinação das funções de distribuições das dimensões dos elementos da rede (Loh e Wang, 1995, Matthews *et al.*, 1995). A definição de mais do que um tipo de elementos na rede de elementos requer a definição de mais do que uma distribuição, uma para cada tipo de elementos, sendo normal assumir o mesmo tipo de função densidade de probabilidade para as dimensões características de cada um dos elementos da rede (Loh e Wang, 1995; Wang *et al.*, 1999b). No entanto, a quantidade e qualidade dos dados experimentais não permite normalmente o cálculo de muitos parâmetros estatísticos, sem que estes deixem de ser significativos.

A interpretação de dados experimentais obtidos por porosimetria de mercúrio implica a definição de um modelo para a estrutura do meio poroso, devendo ser utilizada a mesma estrutura da rede a usar para a modelização do meio poroso. Como este método envolve a penetração de um fluido no meio poroso, os valores obtidos vão ser representativos das dimensões características das constrições existentes no interior do meio poroso. Por outro lado, a aplicabilidade deste método depende das características do meio poroso, em particular da sua rigidez, e das dimensões características dos poros presentes na sua estrutura (Mata, 1998). A influência das características geométricas da rede, em particular a conectividade da rede e a forma como os elementos se organizam foi analisada por Matthews *et al.* (1995) e Mata *et al.* (2001a e 2001b).

Payatakes *et al.* (1973a) utilizaram uma técnica experimental similar à porosimetria de mercúrio, mas, baseada na utilização de água. Os dados experimentais foram ajustados a um modelo de redes unidimensional, mas com capilares de raio variável. Relacionando os diâmetros característicos das constrições e dos espaços maiores dos capilares,

correspondentes às câmaras, estes autores foram capazes de determinar a partir dos dados experimentais os valores médios das dimensões características dos elementos da rede. Uma técnica similar foi utilizada por Marmur e Cohen (1997) para determinação das características geométricas locais de meios porosos. Estes autores mostraram que a penetração do fluido no meio poroso deverá ser efectuada na vertical, tendo ajustado os dados experimentais a um modelo de capilares paralelos. Vários meios porosos foram estudados experimentalmente, tendo Marmur e Cohen (1997) verificado que as características do modelo geométrico mais adequado eram função das características do meio poroso.

Dullien (1992) recomenda a combinação dos dados experimentais de porosimetria de mercúrio com dados experimentais de estereologia quantitativa para a determinação da distribuição de tamanhos de poros de um meio poroso. Esta última técnica permite determinar a estrutura da rede associada a um meio poroso através da análise de cortes bidimensionais efectuados no meio poroso. Os cortes são efectuados impregnando o meio em análise com uma resina (Wardlaw, 1976; Mata, 1998; Liang *et al.*, 2000; Vogel e Roth, 2000) ou com uma liga metálica de baixo ponto de fusão, metal de Wood (Dullien, 1991) para estabilizar a amostra e facilitar a análise da mesma. De seguida, vários cortes são feitos na amostra, sendo as secções obtidas polidas de modo a melhorar o tratamento das imagens (Mata, 1998; Mata *et al.*, 2001a e 2001b). Analisando várias secções, é possível criar uma representação da estrutura na forma de ramos e nós.

Como a sobreposição das imagens deve ser efectuada com bastante precisão e o procedimento pode ser facilmente automatizado, a análise das imagens é efectuada no computador, comparando as regiões relacionadas com os espaços vazios e com os sólidos entre planos de corte contíguos (Dullien, 1991; Mata, 1998; Mata *et al.*, 2001a e 2001b). Outras técnicas de tratamento de imagem foram propostas na literatura para caracterizar o meio poroso, dependendo do tipo de dados disponíveis e informação que se pretende obter (Quiblier, 1984; Adler e Thovert, 1998; Liang *et al.*, 2000; Vogel e Roth, 2000).

Um exemplo da aplicação conjunta das técnicas experimentais de porosimetria e de análise de cortes bidimensionais na caracterização da estrutura porosa de um meio consolidado pode ser encontrado nos trabalhos de Mata (1998) e Tsakiroglou e Payatakes (2000). Os dados experimentais serviram de base à determinação das características geométricas de um modelo de redes tridimensional, representativo da estrutura real do meio poroso. Os resultados previstos pelo modelo de redes para a permeabilidade do meio foram comparados com dados experimentais, tendo-se obtido concordância entre estes.

A determinação da estrutura e das distribuições de dimensões características da rede correspondente a um leito de enchimento pode ser efectuada através da recriação computacional deste, seguida da análise da estrutura geométrica local. Em geral, inicialmente define-se o tipo de contentor no interior do qual se vão depositar as partículas (Chan e Ng, 1986 e 1988; Chu e Ng, 1989a; Spedding e Spencer, 1995; Thompson e Fogler, 1997). Alguns autores definem apenas o tipo de superfície de deposição das partículas, permitindo desprezar os efeitos de parede na geração do leito de enchimento (Tassopoulos e Rosner, 1992). No entanto, independente da estratégia utilizada na geração da rede, uma estrutura altamente irregular é obtida, como se pode observar na Figura 2.8.

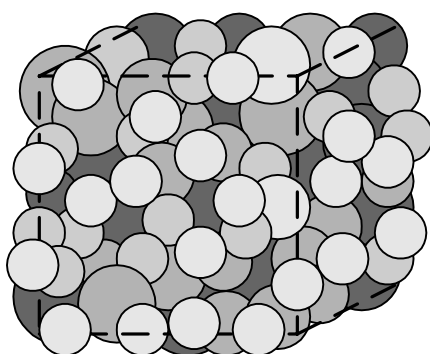


Figura 2.8 Exemplo de leito de enchimento formado a partir de esferas com uma distribuição de diâmetros.

As partículas são depositadas uma a uma no leito de enchimento (Pilotti, 1998). Após o primeiro contacto da partícula com as partículas do leito já depositadas, é permitido à partícula rolar até que encontre uma posição estável, que depende do posicionamento local das partículas e da presença ou não de uma parede que delimita o leito de enchimento. Chan e Ng (1986 e 1988) e Spedding e Spencer (1995), analisam em detalhe as condições de estabilidade e quais os trajectos das partículas até à posição de maior estabilidade.

A possibilidade das partículas rolarem é equivalente a um processo de empacotamento, em que a porosidade do meio poroso se vai reduzindo. Tassopoulos e Rosner (1992) analisaram a influência da imposição de restrições no número de rolamentos permitidos às esferas após o primeiro contacto com as esferas no leito de enchimento no valor da porosidade e na estrutura local do meio poroso, tendo observado uma forte influência das restrições impostas. No entanto, este processo de empacotamento das partículas depende apenas da influência da gravidade, permitindo a obtenção de valores de porosidade do leito de enchimento em redor de 0.4 para leitos de enchimento de esferas (Berryman, 1983).

Do ponto de vista computacional, o procedimento que acabou de ser descrito é adequado apenas à geração de leitos de enchimento formados por esferas de diâmetro uniforme, em que é possível determinar facilmente a direcção das partículas após o primeiro contacto com as partículas já depositadas no leito de enchimento. Chan e Ng (1987) estudaram também a influência da utilização de uma distribuição de diâmetros de esferas e da presença de uma parede na estrutura local do meio poroso. Outros autores analisaram o caso da simulação de leitos de enchimento formados por partículas irregulares, em que os efeitos das orientações relativas das partículas devem ser tomadas em conta, complicando bastante os algoritmos a implementar (Nolan e Kavanagh, 1995a; Coelho *et al.*, 1997; Adler e Thovert, 1998; Jia e Williams, 2001).

Nandakumar *et al.* (1999) usaram um modelo diferente que pode ser utilizado na geração de leitos de enchimento formados por qualquer tipo de partículas. Em vez de simular a deposição dinâmica das partículas no meio, estes autores determinam as posições de equilíbrio para as partículas no interior do meio poroso de modo que estas não se intersectem umas com as outras e que se encontrem em posições estáveis. Nandakumar *et al.* (1999) mostraram que para leitos de enchimento formados por esferas os resultados obtidos por esta estratégia comparam favoravelmente com o método de deposição de partículas, sendo no entanto o método proposto pelos autores válido para qualquer partícula desde que seja possível descrever a sua forma geométrica.

De modo a determinar a rede equivalente a um leito de enchimento, qualquer algoritmo deverá ser capaz de determinar a posição dos centros das partículas do leito de enchimento. Chu e Ng (1989a) assumiram que um leito de enchimento era formado por tetraedros formados por quatro esferas contíguas, correspondendo os vértices dos tetraedros aos centros das esferas. Assumindo que cada tetraedro possui uma câmara (equivalente ao espaço central de maiores dimensões) e quatro capilares, uma para cada uma das faces do tetraedro, após determinar a rede de tetraedros correspondente à estrutura do leito de enchimento, a determinação da rede equivalente é simples. A mesma estratégia foi utilizada por Bryant e Blunt (1992) e Bryant *et al.* (1993a e 1993b), tendo como base os leitos de enchimento estudados experimentalmente por Finney (1970) e Thompson e Fogler (1997) para a determinação da rede equivalente de um leito de enchimento. Chan e Ng (1989a) propuseram a utilização de pentaedros na zona do leito de enchimento mais próxima da parede, na qual não é possível a definição de tetraedros devido à não existência de esferas nessa zona. Para leitos de enchimento com valores baixos de porosidade, Nolan e Kavanagh (1995b)

mostraram através da geração computacional dos meios porosos, que a estrutura era dominada por octaedros e estruturas planas irregulares. No entanto, como para estas estruturas a caracterização geométrica e do escoamento é complexa, a definição de estruturas tetraédricas ainda é preferida.

A estrutura geométrica de um canal da rede equivalente é mesmo assim altamente complexa, o que torna a modelização dos fenómenos de transporte no meio poroso praticamente impossível. Como é possível definir com rigor o volume vazio de cada um dos tetraedros e a forma das constrições associadas à face de cada um dos tetraedros, admitindo uma forma para os poros é possível determinar as dimensões características dos elementos da rede. Chan e Ng (1989a) admitiram que o raio das constrições era igual ao raio hidráulico definido pela área do poro associado à face de cada um dos tetraedros. Bryant e Blunt (1992) propuseram que o valor adequado era o valor médio entre o maior cilindro possível de definir na face do tetraedro e um diâmetro efectivo calculado a partir da descrição do escoamento através de uma constrição presente no meio poroso. Após a definição da rede e das características geométricas dos elementos que a constituem, os métodos descritos em detalhe nas Secções 2.3.5 e 2.4.5 para a descrição do escoamento e do transporte de massa num meio poroso respectivamente podem ser aplicados.

Nolan e Kavanagh (1994) analisaram também a estrutura de leitos de enchimento formados pela deposição de partículas esféricas com uma distribuição log-normal. A estrutura equivalente do meio poroso foi considerada como sendo uma rede de espaços vazios de grandes dimensões, correspondentes aos nós, ligados entre si por canais. As distribuições de diâmetros dos nós e dos ramos são obtidas determinando as distribuições das esferas que podem ser introduzidas no leito de enchimento sem alterar a sua estrutura ou percolar através desta respectivamente. A influência da natureza do tipo de enchimento e da distribuição de diâmetros das partículas foram estudadas, tendo concluído os autores que quanto maior era o desvio padrão desta distribuição mais larga era a distribuição de diâmetros dos nós. Assouline e Rouault (1997) e Rouault e Assouline (1998) propuseram um método estatístico para descrever a distribuição das dimensões características dos volumes de vazios de um leito de enchimento de esferas. Assumindo que as esferas do enchimento apenas podem formar estruturas tetraédricas, estes autores determinam a função densidade de probabilidade das esferas pertencerem a uma tetraedro em função da distribuição dos seus diâmetros característicos. A dimensão característica é o raio da maior esfera que pode ser contida pelas quatro esferas do tetraedro. Os resultados obtidos por estes autores mostram que os desvios

padrão das distribuições de diâmetros das partículas e das dimensões características dos vazios são proporcionais, em concordância com os resultados de Nolan e Kavanagh (1994). Com exceção de distribuições de diâmetros de partículas que seguem uma lei de potências, distribuições gaussianas ou similares, como por exemplo log-normal, originam distribuições do mesmo tipo funcional.

Bentz e Martys (1994) analisaram a validade dos métodos de análise de cortes bidimensionais na determinação dos parâmetros que caracterizam a estrutura porosa de um meio poroso consolidado. O meio poroso foi gerado atribuindo aleatoriamente a posição das esferas no meio e permitindo que estas se sobrepusessem entre si. Os resultados previstos para a permeabilidade usando o meio poroso completo e as informações obtidas dos cortes bidimensionais são concordantes entre si, o que confirma a validade dos métodos estereológicos. Ioannidis e Chatzis (2000) verificaram também que o recurso a cortes bidimensionais era adequado para caracterizar as características estatísticas de meios porosos simulados com características aleatórias mas isotrópicos. Diferentes orientações dos cortes bidimensionais permitiram determinar o posicionamento das constrições existentes no meio poroso, tendo sido analisado como é que a forma de obtenção e tratamento dos cortes influencia os parâmetros geométricos obtidos na análise.

Do ponto de vista computacional os métodos descritos são bastante complexos, tanto ao nível da implementação como das capacidades de cálculo necessárias para simular leitos de enchimento com dimensões significativas. De modo a simplificar a determinação das distribuições das dimensões características, Dodds e Lloyd (1971) propuseram um modelo aplicável a leitos de enchimento formados por partículas com dois valores de diâmetro. O modelo baseia-se na definição de uma estrutura tetraédrica para o enchimento, como se vê na Figura 2.9. É assumido que os espaços vazios podem ser divididos em sub-unidades tetraédricas através da junção dos centros de quatro esferas contíguas e, ao mesmo tempo, interceptando os pontos de contacto entre as esferas.

Nas condições do modelo, Dodds e Lloyd (1971) admitiram que o leito de enchimento pode ser descrito por uma combinação entre cinco tipos diferentes de subunidades tetraédricas distintas. A percentagem de cada uma das subunidades presente num leito de enchimento depende da percentagem de cada um dos tipos de partículas presentes. Caracterizando geometricamente cada um destes tipos de subunidades distintas, e admitindo que a rede equivalente era composta por capilares de raio uniforme interligados por nós com volume nulo, estes autores determinaram as distribuições das dimensões características em função da

distribuição de diâmetros das partículas. Dodds e Lloyd (1971) utilizaram este modelo na determinação de curvas de pressão capilar, tendo observado boa concordância entre curvas simuladas e obtidas por via experimental. Andrade *et al.* (1992) e Andrade (1993) utilizaram o mesmo modelo na previsão da permeabilidade e na análise do transporte de massa em leitos de enchimento formados por esferas com uma distribuição bimodal de diâmetros.

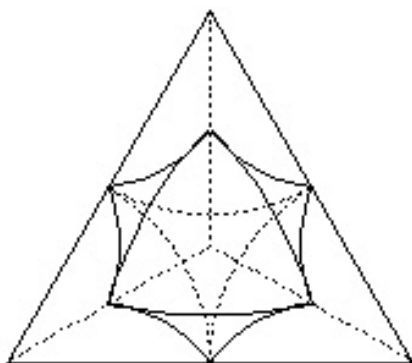


Figura 2.9 Célula utilizada por Dodds e Lloyd (1971) no modelo de enchimento de esferas.

Outras técnicas foram sugeridas na literatura para a determinação da distribuição de tamanhos de poros. Uma das mais promissoras relaciona-se com a aplicação de técnicas de RMN (ressonância magnética nuclear, na caracterização do espaço poroso (Gallegos e Smith, 1988; Gladden, 1993 e 1994; Gladden *et al.*, 1995; Rigby e Gladden, 1996; Sederman *et al.*, 1997 e 1998; Manz *et al.*, 1999; Song, 2000). Como o comportamento das fases sólidas e fluidas a campos magnéticos aplicados no meio poroso são distintos, é possível determinar a distribuição das várias fases no seu interior. Assumindo uma forma para os elementos da rede equivalente, é possível a partir desta informação a determinação da DTP. Em algumas situações, caso a resolução do método experimental seja suficiente, é possível mesmo obter a estrutura real do meio poroso e utilizá-la directamente na descrição do comportamento do meio (Manz *et al.*, 1999). Latour *et al.* (1995) propuseram usar RMN na determinação simultânea da DTP e da tortuosidade, com base na relação existente entre a difusão de um soluto num meio poroso para tempos longos. Estes autores observaram que a técnica era adequada para meios porosos não consolidados mas para meios porosos consolidados ou heterogêneos o método não era adequado, devendo a DTP e a tortuosidade ser determinadas por métodos diferentes. Este método foi usado em conjunto com técnicas de porosimetria de mercúrio e de adsorção de azoto na determinação da DTP e da estrutura porosa em partículas de catalisador por Rigby (2000), tendo estes autores que a combinação dos dois métodos permitia a obtenção de diferentes tipos de informação relevantes para a caracterização da estrutura local de um meio poroso.

A DTP pode também ser determinada recorrendo à adsorção de um componente num meio poroso. Quase sempre, recorre-se à adsorção e dessorção de azoto a 77 K, condições em que se pode assumir que ocorre a condensação nos poros do meio poroso e a equação de Kelvin é aplicável (ver por exemplo: Figueiredo e Ribeiro, 1988; Dullien e Batra, 1970, Dullien, 1992). Como no caso da porosimetria de mercúrio, a determinação da DTP passa muitas vezes pela definição de um modelo para a estrutura do meio poroso, tomando em conta as curvas de adsorção e dessorção (Dullien e Batra, 1970). Bhatia (1998) propôs determinar a DTP relacionando as características de um modelo para o meio poroso com as curvas referidas através um procedimento de ajuste por mínimos quadrados. Nguyen e Do (2000) usaram uma estratégia de optimização similar, mas baseada no conhecimento de algumas isotérmicas de adsorção para poros de raio fixado. Subdividindo a DTP num número de classes igual ao número de isotérmicas conhecidas e ajustando os dados experimentais é possível determinar-se a DTP eficientemente. Meyers *et al.* (2001b) combinaram os dados experimentais da adsorção de azoto com um modelo de redes tridimensional para modelizar a estrutura interna de partículas porosas usadas em cromatografia. Dois tipos de elementos foram considerados para o modelo de redes, tendo os dados experimentais sido bem ajustados por este modelo. Outras técnicas experimentais foram propostas na literatura para a determinação da DTP, aplicáveis a diferentes tipos de meios porosos (Figueiredo e Ribeiro, 1988; Kaneko, 1994). Rigby e Daut (2002) concluíram que os resultados obtidos usando técnicas de adsorção são concordantes com os resultados usando RMN, tendo estes autores concluído que os resultados eram representativos da estrutura local nas escalas mais pequenas ($< 10\mu m$). Rigby e Fletcher (2004a) e Rigby *et al.* (2004b) mostraram através da análise da estrutura local do meio poroso por cortes bidimensionais que a porosimetria de mercúrio e a adsorção de azoto dão informação a escalas diferentes. Estes autores sugeriram que as duas técnicas devem ser usadas simultaneamente para caracterizar adequadamente a estrutura de um meio poroso, tendo Rigby *et al.* (2004c) mostrado que é possível determinar além da DTP a distribuição dos comprimentos dos poros.

A determinação da distribuição das dimensões características de um meio poroso não permite inferir qual a estrutura mais adequada para o modelo de redes, nomeadamente no que se refere ao número de coordenação e à forma como os elementos se colocam no espaço. Este tipo de informação apenas pode ser obtido pela análise directa da estrutura local do meio poroso, o que é apenas possível recorrendo a técnicas de análise de imagem (Mata, 1998) ou de RMN (Manz *et al.*, 1999). Em leitos de enchimento gerados no computador, a função de distribuição do número de coordenação dos nós pode ser obtida facilmente da análise da rede

de tetraedros equivalente à estrutura do meio poroso. Devido às dificuldades associadas à determinação desta distribuição, é comum assumir um valor constante do número de coordenação para o modelo de redes.

2.3 Escoamento Monofásico em Meios Porosos

Com excepção de alguns fenómenos de transporte, como por exemplo a difusão de massa ou a transferência de calor por condução através da fase sólida, não é possível analisar o comportamento de um meio sem conhecer as características do escoamento através deste. Um dos exemplos mais importantes e que será analisado em profundidade nesta dissertação, diz respeito ao transporte de massa através de um meio poroso. Ao nível local, a importância relativa do transporte de massa por convecção e difusão dependem das características do campo de escoamento local.

Como ainda não é possível modelizar rigorosamente o escoamento através de um meio poroso, devido a limitações experimentais e computacionais, são usados modelos simplificados. Estes foram descritos em detalhe na secção anterior, podendo as formas de descrição do escoamento ser dividida em duas classes principais. De acordo com os objectivos deste trabalho, a revisão bibliográfica vai-se debruçar principalmente sobre o escoamento monofásico através de meios porosos, em particular em redes de elementos simples.

2.3.1 Caracterização dos Regimes de Escoamento

O comportamento hidrodinâmico ao nível macroscópico do escoamento ao longo de um meio poroso pode ser efectuado de forma análoga ao do escoamento através de um tubo cilíndrico. Deste modo, é possível definir zonas de escoamento linear e não-linear, análogas às zonas de escoamento em regime laminar e turbulento, e observadas para o escoamento de um fluido através de um tubo.

Estudos experimentais efectuados por Kim (1985), Fand *et al.* (1987), Kececioğlu e Jiang (1994) e Lage *et al.* (1997) mostram que, a partir de dados experimentais de queda de pressão em função do caudal volumétrico, é possível definir mais do que dois regimes de escoamento. Kim (1985) e Fand *et al.* (1987) usaram água e enchimentos de partículas esféricas de diâmetro uniforme, enquanto Lage *et al.* (1997) utilizaram ar e matrizes porosas de alumínio comprimidas, ou seja, um meio consolidado. A representação dos dados experimentais é em

geral feita em termos de grupos adimensionais, por exemplo, um factor de arrasto, F , em função do número de Reynolds, Re , como se mostra na Figura 2.10 (Fand *et al.*, 1987).

$$F = \frac{\Delta P_T}{L_X} \frac{D_p}{\rho v_T^2} \quad (2.3)$$

$$Re = \frac{\rho v_T D_p}{\mu} \quad (2.4)$$

em que ΔP_T é queda de pressão total através do meio poroso, D_p é o diâmetro equivalente das partículas, v_T é a velocidade superficial, L_X é o comprimento do meio segundo o sentido principal do escoamento e ρ e μ representam a densidade e a viscosidade do fluido, respectivamente.

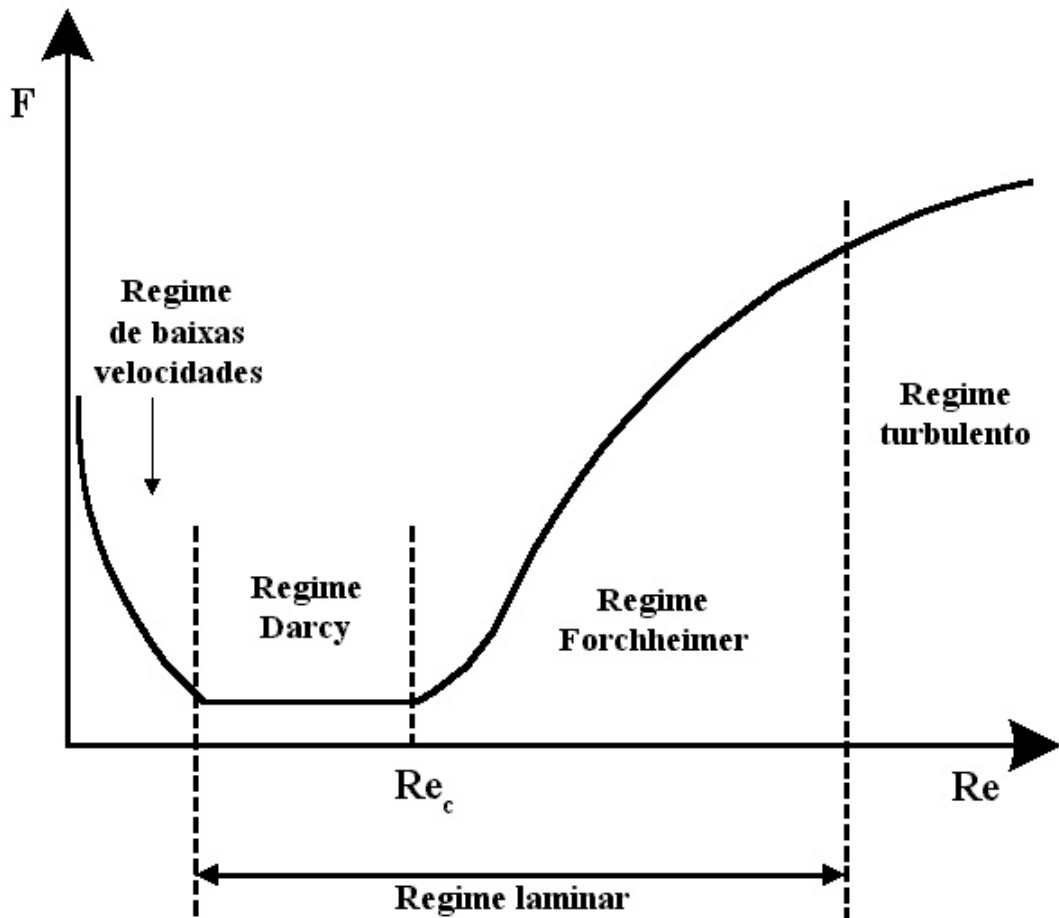


Figura 2.10 Regimes de escoamento num meio poroso (Fand *et al.*, 1987).

A Figura 2.10 mostra diversas zonas de escoamento que dependem do número de Reynolds. Na primeira zona o escoamento é não-linear. Como a velocidade do fluido é muito baixa, a

influência de fenómenos de adsorção na interface sólido-líquido ou de difusão molecular são dominantes, sendo a modelização do escoamento complexa (Fand *et al.*, 1987).

A segunda e terceira são zonas em que o escoamento ao nível local se encontra em regime laminar. Na segunda zona, os efeitos das forças inerciais são desprezáveis, pelo que o factor de fricção é constante. Apesar do comportamento na terceira zona ser não-linear, os resultados experimentais disponíveis para o comportamento hidrodinâmico do fluido ao nível dos elementos do meio poroso não mostram o comportamento irregular típico de escoamento turbulento (Mickley *et al.*, 1965; Dybbs e Edwards, 1984). Nesta zona os efeitos das forças inerciais e viscosas no escoamento são da mesma ordem de grandeza, sendo as primeiras devido principalmente às variações locais do espaço disponível para o escoamento do fluido (Trussel e Chang, 1999). De modo a diferenciar as duas zonas, alguns autores chamam à segunda zona *regime de Darcy* e à terceira zona *regime de Forchheimer* (Fand *et al.*, 1987).

A quarta zona corresponde a escoamento turbulento, embora com características diferentes da turbulência em tubos devido à estrutura irregular da matriz sólida (Lage *et al.*, 1997). Se os dados de F em função de Re forem representados em escalas logarítmicas, observa-se uma dependência linear nessa zona, análoga à observada para o escoamento de fluidos em tubos cilíndricos rugosos. Essa analogia será analisada em detalhe na Secção 2.3.4.

Dybbs e Edwards (1984) explicam a ocorrência de um regime inercial de escoamento para valores do número de Reynolds correspondentes a regime laminar, como uma consequência do desenvolvimento incompleto do escoamento no interior do meio poroso. Assumindo a estrutura interna do meio poroso como uma rede de capilares, Dybbs e Edwards (1984) mostraram que uma razão próxima da unidade entre o comprimento e o diâmetro dos canais permitia o melhor ajuste dos seus dados experimentais. Assim, estes autores argumentam que mesmo em condições de escoamento laminar é necessário tomar em conta as zonas de entrada e saída nos capilares.

Outros autores atribuem os desvios da linearidade à estrutura irregular. Em particular para leitos de enchimento de partículas, as contracções e expansões presentes no seu interior provocam a formação de recirculação, originando a ocorrência de zonas de escoamento não-linear (Payatakes *et al.*, 1973a; Mei e Auriault, 1991). Fand *et al.* (1987) justificaram a ocorrência de uma transição entre regime linear e não-linear através do escoamento em torno de uma esfera isolada. A análise de resultados experimentais obtidos com diferentes distribuições de partículas mostra que a transição entre regimes de escoamento depende das

características locais do meio. O regime turbulento ocorre para valores de $Re > 10^3$, não sendo possível definir um valor universal pois este é função da estrutura do leito, da distribuição das dimensões características das partículas e das condições de escoamento (Bear, 1972).

2.3.2 Parâmetros Macroscópicos

Dois dos parâmetros macroscópicos mais usuais para a caracterização do comportamento hidrodinâmico de um meio poroso são a permeabilidade e a tortuosidade, pelo que são descritos em detalhe a seguir.

2.3.2.1 Permeabilidade

Em certas condições de escoamento, em particular quando a velocidade através deste é baixa, observa-se que a queda de pressão é proporcional ao caudal volumétrico através do meio poroso. Este fenómeno foi observado pela primeira vez por Darcy (1856) nas suas experiências de escoamento num leito de enchimento formado por partículas com uma distribuição uniforme de tamanhos. Assumindo um perfil de escoamento unidimensional e uniforme, a queda de pressão através de um meio poroso pode ser expressa em função da velocidade superficial através do meio poroso, v_T , (igual ao caudal volumétrico a dividir pela área de secção recta do meio poroso) pela seguinte expressão (Kaviany, 1995)

$$-\frac{dP^*}{dx} = \frac{\mu}{k} v_T \quad (2.5)$$

em que P^* representa a pressão piezométrica, definida pela relação $P^* = P + \rho g x^*$, P é a pressão absoluta observada no interior do meio poroso e x^* representa a distância medida na vertical a partir de nível escolhido arbitrariamente, x é a coordenada segundo o sentido principal do escoamento e g é a aceleração da gravidade. O parâmetro k é a permeabilidade do meio poroso, e representa a condutividade do meio poroso, por analogia com um circuito eléctrico. O valor de k toma em conta a influência da estrutura do meio poroso no comportamento hidrodinâmico do meio poroso. Apesar de ser necessário tomar em conta os efeitos da pressão hidrostática ao aplicar a Equação 2.5, ao escrever-se a lei de Darcy esse termo de pressão é incluído implicitamente em P . Nesta dissertação vai-se seguir a mesma convenção.

Na forma original, Darcy não inclui a viscosidade do fluido na sua expressão, tendo esta sido uma correcção. Uma boa descrição das experiências de Darcy e da evolução da forma com a lei com o seu nome é apresentada em Lage (1998). Quando o meio poroso é isotrópico o valor da permeabilidade é independente da posição e da direcção do escoamento, o que permite escrever a Equação 2.5 na forma (Kaviany, 1995)

$$-\nabla P = \frac{\mu}{k} \mathbf{u} \quad (2.6)$$

em que $\mathbf{u}$ é o vector velocidade do fluido no interior do meio poroso. No caso mais geral, k é função da posição e da direcção do escoamento. Nestas condições, k deixa de ser um escalar mas passa a ser uma grandeza vectorial, definida por um tensor de segunda ordem. Nestas condições, a Equação 2.5 pode ser escrita na forma

$$-\nabla P = \frac{\mu}{\mathbf{k}} \mathbf{u} \quad (2.7)$$

Uma discussão detalhada das propriedades do tensor $\mathbf{k}$ e como este pode ser determinado experimentalmente é feita em Bear (1972). As equações anteriores foram estendidas a escoamento multifásico através de um meio poroso. Nessa situação, é usual escrever a equação de Darcy para cada uma das fases, definindo-se uma permeabilidade relativa para o escoamento dessa fase através do meio poroso. Além dos efeitos do meio poroso, é necessário tomar em conta as características dos fluidos, a sua distribuição no meio e as interacções entre estes (Dullien, 1992). Rose (2000) analisou a validade da aplicação da equação de Darcy no escoamento multifásico através de um meio poroso, em particular nos aspectos associados às interacções entre as várias fases estáticas ou móveis.

Verifica-se experimentalmente que lei de Darcy não é válida para escoamentos a elevadas velocidades ou quando se dá escoamento de gases a velocidades ou pressões muito baixas, casos em que a condição de não-deslizamento pode não ser válida. Estas observações são confirmadas pela análise teórica do escoamento através de um meio poroso, em que se mostra que a lei de Darcy é válida quando o escoamento é controlado pelas forças viscosas (Whitaker, 1986; Li e Helm, 1998). Scheidegger (1960) analisa estes efeitos e a influência da rugosidade interna, adsorção superficial, condensação capilar e difusão molecular no valor da permeabilidade. A análise destes efeitos ao nível dos poros permitiu concluir que os valores de permeabilidade de uma amostra porosa podem ser significativamente diferentes conforme são usados líquidos ou gases na sua determinação.

Na Tabela 2.1 são apresentados valores típicos da permeabilidade de meios porosos de diferentes tipos. É possível observar uma grande dispersão dos valores, notando-se no entanto que para meios consolidados os valores têm tendência a serem inferiores aos valores para meios não consolidados. Por outro lado, o aumento da porosidade implica normalmente um aumento da permeabilidade. Como a permeabilidade mede a resistência da matriz sólida ao escoamento de um fluido a redução da fracção volumétrica de sólidos implica normalmente a redução da resistência ao escoamento e consequente aumento de k .

Tabela 2.1 Valores típicos de permeabilidade para vários materiais porosos (Kaviany, 1995).

Material	k (m²)
Arenito	$5.0 \times 10^{-16} - 5.0 \times 10^{-12}$
Tijolo	$5.0 \times 10^{-15} - 5.0 \times 10^{-13}$
Calcário	$2.0 \times 10^{-15} - 4.5 \times 10^{-14}$
Couro	$9.5 \times 10^{-14} - 1.2 \times 10^{-13}$
Solo	$2.9 \times 10^{-13} - 1.4 \times 10^{-11}$
Fibra de Vidro	$2.4 \times 10^{-11} - 5.1 \times 10^{-11}$
Cimento Betuminoso	$1.0 \times 10^{-13} - 2.3 \times 10^{-11}$
Placas de Cortiça	$3.3 \times 10^{-10} - 1.5 \times 10^{-9}$
Selas de Berl	$1.3 \times 10^{-7} - 3.9 \times 10^{-7}$
Areia – Grãos soltos	$2.0 \times 10^{-11} - 1.8 \times 10^{-14}$

2.3.2.2 Tortuosidade

A tortuosidade é um parâmetro que mede a diferença entre o trajecto real das partículas do fluido ao longo do meio poroso e o comprimento macroscópico deste segundo o sentido principal de escoamento. Apesar da sua definição simples, este parâmetro não é de determinação fácil a partir de dados experimentais, dependendo fortemente da estrutura local do meio. Por outro lado, dado existirem diferentes caminhos para o escoamento de um fluido através de um meio poroso, diferentes partículas de fluido vão ter trajectos diferentes e percorrer distâncias diferentes através do meio, implicando valores de tortuosidade diferentes.

A tortuosidade pode ser quantificada através do factor de tortuosidade, T , definido por

$$T = \frac{L_x}{L_T} \quad (2.8)$$

em que L_T representa a distância real que o fluido tem de percorrer para o meio poroso. Na literatura, é também comum definir a tortuosidade pela expressão inversa. De acordo com a

definição acima, o factor de tortuosidade pode tomar dois valores limites. Se as partículas que constituem a matriz porosa se encontram muito afastadas entre si, isto é, se o valor da porosidade se encontrar próximo da unidade, T vai tender para 1. À medida que a porosidade diminui, maiores serão os trajectos percorridos pelo fluido através do meio, pelo que a tortuosidade diminui. A forma como esse aumento ocorre depende fortemente da estrutura do leito. Teoricamente, se o valor da porosidade tender para zero, a tortuosidade tende para zero. No entanto, para leitos de enchimento não é em geral possível ocupar todos os espaços vazios da estrutura porosa, obtendo-se deste modo um valor máximo finito de tortuosidade. Em meios porosos consolidados a redução da porosidade pode fazer com que a estrutura porosa se encontre abaixo do limite de percolação, não existindo nenhum caminho através do qual é possível observar o escoamento de um fluido. Neste caso o valor da tortuosidade tende para zero mesmo para valores de porosidade superiores a zero.

Várias técnicas podem ser utilizadas na determinação experimental dos valores da tortuosidade de um meio poroso. Usualmente, este parâmetro é determinado recorrendo a experiências de propagação de ondas sonoras no interior de um meio poroso ou pela determinação da condutividade de um meio poroso saturado com uma solução iónica (Liu e Masliyah, 1996), sendo este o método mais usado na prática. Várias correlações obtidas a partir de dados experimentais podem ser encontradas na literatura. Brudgemann, citado por Liu e Masliyah (1996), propôs a seguinte expressão, que se verifica ser adequada numa gama alargada de porosidade e para vários tipos de partículas em meios porosos não consolidados

$$T = \sqrt{\varepsilon} \quad (2.9)$$

Esta relação pode ser estendida para qualquer tipo de meio poroso, consolidado ou não-consolidado através da chamada lei de Archie (Liu e Maslyiah, 1996)

$$T = a_T \varepsilon^m \quad (2.10)$$

em que a_T é uma constante empírica e m é o factor de cementação, devendo ambas as constantes ser determinadas por ajuste de dados experimentais. Diferentes correlações foram obtidas para vários tipos de meios consolidados sendo apresentadas de seguida as duas mais usuais (Liu e Masliyah, 1996)

$$T = 1.61\varepsilon^{1.15}, \text{ fórmula de Humble} \quad (2.11)$$

$$T = 2.8\varepsilon^{5/4}, \text{ para leitos de vidro sinterizado} \quad (2.12)$$

Liu e Masliyah (1996) compararam as expressões anteriores com dados experimentais de tortuosidade tanto para meios consolidados como não-consolidados obtidos para vários tipos de meios porosos e numa gama alargada de valores de porosidade, determinados experimentalmente sobretudo pelo método da condutividade eléctrica. Estes autores recomendam o uso da Equação 2.12 se a porosidade for menor que 0.2 e a Equação 2.9 para valores superiores.

Combinando assintoticamente as Equações 2.12 e 2.9 obtém-se uma expressão válida em toda a gama de porosidade (Churchill e Usagi, 1972)

$$T = \left[\frac{(0.2 + 0.8\varepsilon)\varepsilon^7}{1 + 1.4 \times 10^{-8}(1 - \varepsilon)\varepsilon^{-13}} \right]^{1/16} \quad (2.13)$$

Comiti e Renaud (1989), com base em dados experimentais obtidos em leitos experimentais formados por esferas de diâmetro uniforme e outros tipos de partículas, propuseram a seguinte expressão para T em função da porosidade

$$\frac{1}{T} = 1 - P_{CR} \ln(\varepsilon) \quad (2.14)$$

em que P_{CR} é uma constante, dependente das características das partículas que formam o meio poroso. Para esferas, $P_{CR} = 0.49$ (Mauret e Renaud, 1997) e para partículas paralelipédicas, Comiti e Renaud (1989) determinaram as expressões de P_{CR} em função das suas dimensões características.

2.3.3 Modelos Fenomenológicos de Descrição do Escoamento

Os primeiros modelos desenvolvidos para descrever o comportamento de meios porosos foram baseados em analogias com o escoamento em sistemas distintos, mas em que o escoamento já era bem descrito. A inclusão da influência da estrutura local do meio poroso era tomada em conta através da definição de constantes empíricas, calculadas a partir de dados experimentais. Apesar de em muitas situações este tipo de estratégias não ser a mais correctas, actualmente ainda servem de base a muitas das correlações usadas na prática, como é o caso da equação de Ergun.

Rumpf e Gupte (1971) e Dullien (1992) através de análise dimensional, mostraram que a queda de pressão adimensional através de um meio poroso verifica a seguinte relação funcional

$$\frac{\Delta P_T}{\rho v_T^2} = F\left(\frac{\rho v_T D_p}{\mu}, \frac{L_x}{D_p}, \varepsilon, \phi, \psi, estrutura\right) \quad (2.15)$$

em que ΔP representa a queda de pressão na direcção do escoamento, já corrigida pelos possíveis efeitos gravitacionais; ϕ_i são parâmetros associados à distribuição de tamanhos das partículas e ψ_i são parâmetros relacionados com a forma das partículas. O primeiro termo representa o número de Reynolds, Re , definido em termos de D_p e v_T , e o segundo termo representa uma relação adimensional entre o comprimento do meio e o diâmetro médio das partículas.

Na Equação 2.15, a dimensão característica dos fenómenos de transporte é o diâmetro médio das partículas, D_p , ou seja, os fenómenos a nível local controlam o comportamento macroscópico. Esta hipótese é adequada para leitos de enchimento, em que é possível considerar que as dimensões características dos elementos que formam o meio poroso são localmente proporcionais à distribuição de tamanhos das partículas.

Quando as partículas não são aproximadamente esféricas ou possuem uma distribuição larga de dimensões características, poderá ser adequado definir outro valor para o diâmetro característico das partículas. MacDonald *et al.* (1979) e Rumpf e Gupte (1971) concluíram que o valor médio mais adequado é definido por

$$D_p = 6 \frac{V_p}{S_p} \quad (2.16)$$

Se a distribuição de tamanhos das partículas for determinada com recurso a peneiros, obtém-se o valor médio do diâmetro, em termos do volume das partículas esféricas equivalentes, D_v . MacDonald *et al.* (1979) determinaram D_p a partir de D_v usando um factor de esfericidade, ϕ , representando a razão entre a área superficial da esfera com o mesmo volume da partícula e a área real da mesma. Ward (1964), com base na análise dimensional do escoamento através de um meio poroso, propôs usar $\sqrt{k}$ como dimensão característica, qualquer que seja o meio poroso em estudo. Deste modo, este autor considera que a influência

da estrutura local do meio poroso pode ser contabilizada directamente, situação vantajosa ao uso de informação apenas dos elementos que formam o meio poroso.

A Equação 2.15 é equivalente à definição do factor de fricção, f_p , para o escoamento através de um tubo, sendo os parâmetros associados à distribuição de tamanhos e forma das partículas, assim como à estrutura do meio de difícil determinação mesmo nos casos mais simples. Um exemplo típico de um modelo empírico é o trabalho de Rumpf e Gupte (1971). Estes autores estudaram o escoamento de um fluido através de leitos de enchimento aleatórios constituídos por esferas, para gamas alargadas de porosidade e de números de Reynolds, em particular $0.3 \leq \varepsilon \leq 0.85$ e $0.01 \leq Re \leq 100$. Três distribuições de diâmetros de esferas, uma estreita e duas largas foram usadas nas experiências.

Para regime laminar, os resultados experimentais foram correlacionados pela expressão

$$f_p = K_p \frac{5.6}{Re} \varepsilon^{-5.5} \quad (2.17)$$

em que K_p representa um factor ajustável, função da distribuição de tamanhos das partículas, tendo sido obtidos os valores de 1.0 para uma distribuição estreita e 1.05 para as duas distribuições alargadas de tamanhos. Esta relação está de acordo com a lei de Darcy, que pode ser escrita na forma

$$f_p = \frac{\text{constante}}{Re} \quad (2.18)$$

sendo o valor da permeabilidade dado pela expressão

$$k = \frac{D_p^2}{\text{constante}} \quad (2.19)$$

A maior parte dos estudos nesta área pretenderam sobretudo determinar qual é a melhor função que representa os dados experimentais em função da porosidade e do diâmetro médio das partículas. Até ao momento, nenhuma relação universal foi encontrada, dependendo a constante da forma e distribuição de tamanhos característicos das partículas e da estrutura do meio, como o trabalho de Rumpf e Gupte (1971) permitiu concluir. A dependência de f_p em função da porosidade foi estudada extensivamente e algumas das expressões propostas na literatura são apresentadas em Dullien (1975).

Alguns autores determinaram também expressões empíricas para a caracterização do escoamento turbulento através de leitos de enchimento em regime não laminar (Scheidegger, 1960; Ziolkowska e Ziolkowski, 1988). As expressões obtidas são função da porosidade, do diâmetro das partículas e das condições de escoamento, sendo apenas aplicáveis aos casos para os quais foram determinadas.

Recentemente, Brasquet e Cloirec (2000) propuseram o uso de redes neurais na caracterização da queda de pressão no escoamento de água e ar através de têxteis. As variáveis de entrada da rede neuronal foram seleccionadas com base no comportamento qualitativo dos vários tipos de têxteis usados em relação às suas características geométricas e às propriedades físicas do fluido. A influência das diferentes variáveis no comportamento dos diferentes tipos de tecido foi contabilizada pela rede neuronal, com base em dados experimentais obtidos em tecidos de diferentes materiais e estruturas. Observou-se que, após treinar a rede neuronal com dados experimentais, são as características geométricas dos tecidos o factor dominante na queda de pressão através de um meio poroso.

Apesar de métodos deste tipo permitirem identificar quais são os factores dominantes no escoamento através de um meio poroso, continua a ser necessário dispor de dados experimentais do meio poroso em estudo. Estes servem de base à determinação dos parâmetros da rede neuronal, limitando a aplicabilidade do modelo ao tipo de meios porosos e condições de escoamento usadas para obter os dados experimentais. Deste modo, este tipo de modelos não é vantajoso em relação aos modelos descritos anteriormente, mas pode ajudar no desenvolvimento de um modelo preditivo baseado nas características do meio.

2.3.4 Modelos Baseados na Definição de Diâmetro Hidráulico

2.3.4.1 Regime Laminar

Este tipo de modelos baseia-se na aplicação do conceito de raio hidráulico ao escoamento através de um enchimento de partículas (Carman, 1937). Apesar de muitas vezes ser considerado um modelo puramente fenomenológico, este tipo de modelos procura substituir a descrição do escoamento no interior de um meio poroso, demasiado complexa devido à estrutura altamente irregular, pela descrição do escoamento num tubo, cujo diâmetro é determinado a partir das características do meio poroso.

Aplicando a definição hidrodinâmica de diâmetro hidráulico a um meio poroso, obtém-se

$$d_h = \frac{4 \times \text{volume de vazios}}{\text{área superficial}} = \frac{4\varepsilon}{A_{sp}(1-\varepsilon)} \quad (2.20)$$

Este modelo utiliza implicitamente a noção de tortuosidade do meio poroso, como uma correcção ao gradiente de pressão imposto ao meio poroso, de acordo com

$$\nabla P_{mod} = T \nabla P \quad (2.21)$$

em que ∇P_{mod} representa o gradiente de pressão adicional devido ao escoamento do fluido através do meio poroso. Assim, para escoamento laminar a velocidade real do fluido através do meio poroso, ou seja a velocidade intersticial, v_p , é dada por

$$v_p = -\frac{d_h^2 T}{16k_0 \mu} \nabla P \quad (2.22)$$

em que k_0 é uma constante função da forma dos capilares que constituem o meio poroso. Para tubos circulares, $k_0=2$, e varia entre 2 e 2.5 para tubos de geometria rectangular, elíptica e anular (Happel e Brenner, 1983; Liu *et al.*, 1994). A velocidade intersticial nos poros, v_p , pode ser relacionada com a velocidade superficial utilizada na equação de Darcy pela relação

$$v_T = v_p \varepsilon T = -\frac{k}{\mu} \nabla P \quad (2.23)$$

Relacionando as Equações 2.22 e 2.23, a permeabilidade pode ser expressa na forma

$$k = \frac{\varepsilon d_h^2 T^2}{16k_0} = \frac{\varepsilon d_h^2}{16k_k} = \frac{\varepsilon^3}{k_k (1-\varepsilon)^2 A_{sp}^2} \quad (2.24)$$

A constante $k_k = k_0 (1/T)^2$ é a constante de Carman-Kozeny. Substituindo na definição de D_p (Equação 2.16) a área superficial específica da partícula, V_p/S_p , pela área superficial específica do meio poroso, A_{sp} , obtém-se a seguinte expressão para a permeabilidade

$$k = \frac{\varepsilon^3}{36k_k (1-\varepsilon)^2} D_p^2 \quad (2.25)$$

Para os leitos de enchimento de partículas utilizados na prática, o valor da tortuosidade é aproximadamente igual a 2.5, pelo que a constante de Carman-Kozeny toma um valor igual a

5. Substituindo este valor na Equação 2.25, obtém-se a seguinte expressão, normalmente designada por equação de Carman-Kozeny

$$k = \frac{\varepsilon^3}{180(1-\varepsilon)^2} D_p^2 \quad (2.26)$$

Carman (1937) assumiu que o valor $k_k = 5$ era universal e independente do tipo de meio, no entanto, observa-se experimentalmente que o seu valor depende da porosidade e do tipo de partículas utilizadas (Coulson, 1948; Wyllie e Gregory, 1955). Para leitos de enchimento constituídos por esferas, os valores obtidos encontram-se na vizinhança de 5 para valores de porosidade da ordem de 0.4 (Fand *et al.*, 1987).

Em termos do factor de fricção esta equação pode ser escrita como

$$f_p = \frac{180}{\text{Re}} \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \quad (2.27)$$

Alguns autores, quase sempre suportados por dados experimentais, questionam a forma funcional como o modelo de Carman-Kozeny inclui a influência da porosidade do meio poroso (Rumpf e Gupte, 1971; Dullien, 1992). Estas expressões são empíricas e apenas podem ser aplicadas com rigor aos tipos de meios porosos nos quais os dados experimentais foram obtidos (Agarwal e O'Neill, 1988).

O caso em que o leito é formado por partículas com uma distribuição alargada de diâmetros de partículas foi analisado por MacDonald *et al.* (1991). Se a distribuição de tamanhos for conhecida, estes autores mostraram que a expressão mais adequada para o diâmetro hidráulico é dada por

$$d_h = \frac{4}{3\pi} \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} \frac{X_2}{X_1} \quad (2.28)$$

sendo X_1 e X_2 o primeiro e o segundo momentos não centrados da distribuição de tamanhos das partículas, definidos pela expressão

$$X_r = \int_{-\infty}^{\infty} \xi_p^r N(\xi_p) d\xi_p \quad (2.29)$$

Deste modo, a razão entre os momentos estatísticos representa o diâmetro equivalente das partículas que deverá ser utilizado para leitos de enchimento formados por misturas de partículas com diferentes diâmetros.

Com base neste modelo, MacDonald *et al.* (1991) propuseram a seguinte expressão para estimar a permeabilidade de um leito de enchimento com uma distribuição de diâmetros característicos, tendo observado boa concordância com dados experimentais

$$k = \frac{1}{180} \frac{\varepsilon^3}{(1-\varepsilon)^2} \left(\frac{X_2}{X_1} \right)^2 \quad (2.30)$$

2.3.4.2 Regime Turbulento

O modelo descrito anteriormente foi também aplicado na situação de escoamento turbulento perfeitamente desenvolvido (Bird *et al.*, 1960). Relacionando a queda de pressão por unidade de comprimento do meio poroso com f_p , é possível escrever a seguinte expressão

$$\frac{\Delta P}{L_X} = \frac{1}{d_h} \frac{1}{2} \rho \left(\frac{v_T}{\varepsilon} \right)^2 4f_p \quad (2.31)$$

Aplicando a definição de diâmetro hidráulico, a expressão anterior pode ser escrita na forma

$$\frac{\Delta P}{L_X} = 3f_p \frac{1}{D_p} \rho v_T^2 \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \quad (2.32)$$

Os dados experimentais sugerem que o valor de f_p que melhor ajusta os dados experimentais é $6f_p = 3.5$, pelo que a equação anterior se reduz a

$$\frac{\Delta P}{L_X} = 1.75 \frac{1}{D_p} \rho v_T^2 \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \quad (2.33)$$

Em termos de um factor de fricção, a queda de pressão através de um meio poroso em regime laminar pode ser descrita pela expressão

$$f_p = 0.875 \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \quad (2.34)$$

Comparando as expressões obtidas para escoamento laminar (Equação 2.27) e turbulento, Equação 2.34 observa-se que a dependência na porosidade é diferente. Por outro lado, em

regime turbulento f_p é independente do número de Reynolds, o que resulta directamente da analogia efectuada, pois para regime turbulento perfeitamente desenvolvido o factor de fricção para o escoamento através de um tubo é constante. Este facto restringe a aplicabilidade da Equação 2.34 a regime turbulento perfeitamente desenvolvido.

2.3.4.3 Escoamento Não-Linear - Equação de Ergun

Em regimes de escoamento não-linear, a influência das forças viscosas e inerciais deve ser tomada em conta. Ergun (1952) assumiu que a queda de pressão total através de um meio era a soma dos valores previstos pelas expressões limites para regime laminar e turbulento perfeitamente desenvolvido. Associando as equações 2.22 e 2.33, e ajustando a equação obtida a um vasto conjunto de dados experimentais, Ergun (1952) propôs a seguinte equação válida para a previsão da queda de pressão total em função do caudal volumétrico em qualquer regime de escoamento

$$\frac{\Delta P_T}{L_X} = \frac{150\mu v_T}{D_p^2} \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} + \frac{1.75\rho v_T^2}{D_p} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \quad (2.35)$$

Por comparação com dados experimentais, Ergun verificou que esta equação é adequada, com um erro de mais ou menos 50%, para os vários regimes de escoamento observáveis num leito de enchimento. Churchill e Usagi (1972) analisaram a validade dos valores das constantes propostos por Ergun (1952), tendo concluído que, tomando em conta os desvios entre valores experimentais e os valores previstos pela Equação 2.35, os valores propostos eram adequados.

Observa-se, no entanto, que as constantes 150 e 1.75 podem não ser adequadas em muitas situações, em particular para enchimentos constituídos por partículas não-esféricas. MacDonald *et al.* (1979), recomendaram a determinação das constantes com base em dados experimentais obtidos para cada leito de enchimento, através da expressão

$$\frac{\Delta P_T}{L_X} = A \frac{\mu}{D_p^2} \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} v_T + B \frac{\rho}{D_p} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} v_T^2 \quad (2.36)$$

Usando uma base de dados experimentais maior que a utilizada por Ergun (1952), estes autores propuseram valores diferentes para as constantes A e B . Em particular, a constante A toma um valor constante de $A=175$, enquanto B passa a ser uma função da rugosidade externa das partículas, tomando os valores de 1.80 para partículas pouco rugosas e de 4.0 para partículas muito rugosas. A determinação experimental das constantes A e B pode originar

valores muito diferentes conforme o meio poroso, sendo as diferenças mais significativas para leitos formados por partículas de forma irregular ou com uma distribuição larga de diâmetros. A análise dos dados experimentais efectuada por estes autores sugere ainda que a utilização de $\varepsilon^{3.6}$ em vez de ε^3 é mais adequada, de acordo com os resultados de Rumpf e Gupte (1971), mas, para a maioria dos dados experimentais, a melhoria do ajuste dos dados em relação à equação 2.36 não é muito significativa.

Ergun (1952), baseado na Equação 2.35, propôs a representação dos dados experimentais numa forma universal em termos de coordenadas adimensionais de duas formas distintas. Uma das representações apresenta os dados em termos do factor de fricção equivalente, F^* , em função do número de Reynolds generalizado, Re^* , ou seja

$$F^* = \frac{\Delta P_T D_P \varepsilon^3}{L_X \rho v_T^2 (1 - \varepsilon)} \quad (2.37)$$

$$Re^* = \frac{\rho v_T D_P}{\mu (1 - \varepsilon)} \quad (2.38)$$

podendo a equação de McDonald (Equação 2.36) ser expressa na forma

$$F^* = \frac{A}{Re^*} + B \quad (2.39)$$

Representando os dados experimentais nesta forma em coordenadas logarítmicas, é possível observar duas zonas limite (Ergun, 1952; Bird *et al.*, 1960; MacDonald *et al.*, 1979). Para valores baixos de Re^* , ou seja, para regime laminar, obtém-se uma recta de declive -1 . Esta situação é análoga à observada no escoamento em torno de uma esfera, e típica de escoamento em regime laminar. Para valores de Re^* elevados, correspondentes a regime turbulento, os dados tendem para um valor constante igual a B . Neste tipo de representação é então fácil determinar os valores das constantes A e B a partir das zonas limite.

A outra forma de representação baseia-se na definição da queda de pressão adimensional em função de Re^* . Se os dados experimentais forem representados na forma de $\Delta P_T / u_T L_X$ em função de u_T , em coordenadas logarítmicas, de acordo com a Equação 2.36, para regime laminar obtém-se um valor constante, e para regime turbulento uma recta de declive 1. Então pondo

$$F_V = \frac{\Delta P_T D_P^2 \varepsilon^3}{L_X \mu v_T (1 - \varepsilon)^2} \quad (2.40)$$

a Equação 2.36 passa a ter a seguinte forma

$$F_V = A + \frac{B}{\text{Re}^*} \quad (2.41)$$

Ergun (1952) recomenda a utilização da Equação 2.41, visto permitir a representação dos dados experimentais numa forma linear, o que simplifica a determinação dos valores das constantes A e B . Por outro lado, a determinação das características da zona de transição entre regime laminar e turbulento é mais simples, ao contrário da primeira forma, que tende a amortecer as diferenças entre estes.

Lage *et al.* (1997) recomendam a utilização do método dos mínimos quadrados para a determinação dos valores das constantes da Equação 2.36. Como as duas formas de representação dos dados são equivalentes entre si, a maneira mais adequada depende dos dados disponíveis e da sensibilidade dos métodos numéricos utilizados.

Mesmo para leitos de enchimento formados por esferas com uma distribuição apertada de tamanhos, verifica-se experimentalmente que os valores das constantes A e B podem variar apreciavelmente. Por exemplo, os valores das constantes obtidos por Kim (1985) e por Kececioğlu e Jiang (1992) estão de acordo com os valores recomendados por MacDonald *et al.* (1979), enquanto que os resultados experimentais obtidos por Rumpf e Gupte (1971) e Comiti e Renaud (1989) são descritos melhor se os valores propostos por Ergun (1952) forem usados. Para leitos de enchimento de partículas não esféricas, os valores das constantes podem depender fortemente da porosidade e das características geométricas das partículas que o constituem, pelo que é recomendável a determinação das constantes em cada situação (Comiti e Renaud, 1989).

Devido à analogia entre a variável F^* e o factor de fricção para o escoamento através de tubos cilíndricos, tem sido esta a forma preferida na representação de dados experimentais (Bird, 1960; Ahmed e Sunada, 1969; Kaviani, 1995). Em trabalhos mais recentes tem sido preferida (Fand *et al.*, 1987; Kececioğlu e Jiang, 1994) a segunda forma de representação sugerida por Ergun (1952), pois permite diferenciar, numa forma mais precisa, as zonas de transição entre os vários regimes de escoamento. Em particular, é possível determinar a zona

de transição entre os dois regimes de escoamento não-lineares, de Forchheimer e turbulento, impossível de fazer na forma F^* em função de Re^* .

Outros autores consideram outras formas de representação adimensional, quase sempre similares às duas formas propostas por Ergun (1952). Kececioglu e Jiang (1994) propuseram utilizar a raiz quadrada da permeabilidade como a dimensão característica para o escoamento através de um meio poroso, em vez do diâmetro das partículas, de acordo com Ward (1969). A utilização de k é vantajosa, pois o valor da permeabilidade de um meio poroso é função da sua estrutura local, o que inclui também a influência da porosidade, a forma das partículas e a forma como o meio poroso foi criado. As seguintes variáveis são então definidas

$$F_k = \frac{\Delta P_T k}{L_X \mu v_T} \quad (2.42)$$

$$Re_k = \frac{\rho v_T \sqrt{k/\varepsilon}}{\varepsilon \mu} \quad (2.43)$$

Visto que o modelo proposto por Kececioglu e Jiang (1994) é baseado na utilização da velocidade intersticial do fluido através do meio poroso, e como é mais fácil do ponto de vista experimental determinar a velocidade superficial, é necessária a inclusão da porosidade na definição do número de Reynolds. Com base em dados experimentais do escoamento através de leitos de enchimento constituídos por esferas de diâmetro quase uniforme, estes autores mostraram que a utilização das Equações 2.42 e 2.43, permite a representação destes através de uma única curva.

Em regime laminar, F_k deve ser independente do número de Reynolds. Comparando a Equação 2.42 com a Lei de Darcy, conclui-se que $F_k = 1$ para regime laminar.

Substituindo D_p por $\sqrt{k}$ na equação de Ergun, esta pode ser escrita na forma

$$F_k = 1 + \frac{B}{\sqrt{A}} Re_k \quad (2.44)$$

A representação dos valores de F_k em função de Re_k permite a determinação dos valores das constantes A e B , através do ajuste linear dos dados experimentais na zona de escoamento não-linear.

A Equações 2.35 e 2.36 podem ser vistas como sendo a soma da queda de pressão devido às forças viscosas, traduzida pelo termo proporcional a v_T , e a queda de pressão por acção das forças inerciais, definida pelo termo proporcional a v_T^2 . Forchheimer, citado por Fand *et al.* (1987), a partir da hipótese de Reynolds para o escoamento em tubos, foi o primeiro a propor que a queda de pressão num meio poroso poderia ser representada nessa forma. No caso geral, é possível escrever a seguinte expressão geral

$$\frac{\Delta P_T}{L_X} = a' \mu v_T + b' \rho v_T^2 \quad (2.45)$$

em que a' e b' são constantes a determinar a partir de dados experimentais, designadas por permeabilidade recíproca e coeficiente de inércia respectivamente. Se a velocidade superficial v_T for muito baixa ou se $b' \ll a'$, o escoamento através do meio poroso é controlado pelas forças viscosas, reduzindo-se a equação de Forchheimer à equação de Darcy.

Na literatura encontram-se expressões para a determinação das constantes em função das características do escoamento e do meio poroso (Ahmed e Sunada, 1969; Trussel e Chang, 1999). Ahmed e Sunada (1969), admitindo que a Equação 2.45 é uma representação adequada do escoamento através de um meio poroso, propuseram a seguinte expressão para a representação dos dados experimentais

$$\frac{(\Delta P_T / L_X)}{b' \rho v_T^2} = \left(\frac{a' \mu}{b' \rho v_T} \right) + 1 \quad (2.46)$$

Esta forma de representação é qualitativamente similar à representação de F^* em função de Re^* , podendo as constantes a' e b' ser consideradas como constantes generalizadas, definidas pelas expressões (Trussel e Chang, 1999)

$$a' = \frac{1}{k} \quad (2.47)$$

$$b' = \frac{1}{g \sqrt{ck^*}} \quad (2.48)$$

em que c é uma constante dependente das características do meio poroso e que pode ser determinada recorrendo a dados experimentais, g a aceleração da gravidade e k^* representa a permeabilidade intrínseca do meio poroso, estando k^* e c relacionados pela expressão

$k^* = cD_p^2$. A duas formas de permeabilidade, k e k^* estão relacionadas pela expressão $k^* = k\rho g/\mu$.

Ahmed e Sunada (1969), MacDonald *et al.* (1979), Venkataraman e Rao (1998) e Trussel e Chang (1999) mostraram que esta forma de representação é adequada na representação de dados experimentais obtidos em diferentes tipos de meios porosos. No entanto, MacDonald *et al.* (1979) concluíram que, como os valores das constantes também têm de ser estimados recorrendo a dados experimentais, dependentes portanto das características do meio poroso, a utilização deste modelo não é vantajosa em relação à equação de Ergun.

Trussel e Chang (1999) procuraram conciliar a análise de Ahmed e Sunada (1969) com os modelos baseados na definição de um raio hidráulico. Partindo da definição de permeabilidade intrínseca e relacionando esta com a Equação 2.25, Trussel e Chang obtiveram as seguintes expressões para as constantes a' e b' , na forma

$$a' = \frac{72}{TD_p^2} \quad (2.49)$$

$$b' = \sqrt{\frac{2}{cT}} \frac{6}{D_p} \quad (2.50)$$

Ziółkoskwa e Ziółkowski (1988) manipularam a Equação 2.45 de modo a realçar a analogia entre esta e o factor de fricção, f_p , assumiram que este era uma função da porosidade, tendo definido a seguinte equação

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{f}{D_p} f_p(\varepsilon) \rho v_T^2 \quad (2.51)$$

em que $f_p(\varepsilon)$ é uma função da porosidade, determinada a partir de dados experimentais e que depende das características das partículas e do enchimento. É geralmente usada a forma

$$f_p(\varepsilon) = \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon^3} \quad (2.52)$$

determinada a partir da hipótese de que a estrutura porosa do meio poroso pode ser descrita como sendo uma fieira de capilares paralelos embora seja possível definir funções diferentes

de acordo com o tipo e natureza dos dados experimentais disponíveis. Para f_p é proposta a seguinte equação empírica, na forma

$$f = a + b Re^{-1} \quad (2.53)$$

em que a e b são constantes empíricas, estando relacionadas com as constantes a' e b' da equação de Forchheimer pelas relações

$$a' = \frac{b}{D_p} f_p(\varepsilon) \quad (2.54)$$

$$b' = \frac{a}{D_p^2} f_p(\varepsilon) \quad (2.55)$$

Definidas desta forma, a constante a está relacionada com a resistência viscosa ao escoamento e a constante b está relacionada com as forças inerciais do escoamento.

O problema reduz-se agora à determinação, recorrendo a dados experimentais, dos valores das constantes a e b . Utilizando a expressão de $f_p(\varepsilon)$ definida pela Equação 2.52, Ziółkoska e Ziółkowski (1988) listaram algumas das expressões propostas na literatura para o factor de fricção f_p em regime turbulento. De notar que as expressões anteriores impõem que a função da porosidade apenas depende das características geométricas do meio poroso, o que pode não ser a situação mais correcta. Em particular, vários autores têm sugerido dependências diferentes da porosidade (Rumpf e Gupta, 1971), possuindo estas no entanto o defeito de se basearem em expressões empíricas ajustadas a dados experimentais.

A equação de Ergun é de facto a expressão mais utilizada para a previsão do comportamento macroscópico de um leito de enchimento. No entanto, em muitas situações os valores previstos por esta equação ou a extensão proposta por MacDonald *et al.* (1979) não são adequados para utilização prática, sendo alguns dos problemas apresentados de seguida.

Verifica-se experimentalmente que os valores previstos da queda de pressão para o escoamento através de um leito de enchimento formado por partículas de forma muito diferente da esférica pela equação de Ergun não são adequados. Comiti e Renaud (1989), Brunjail e Comiti (1990) e Seguin *et al.* (1998a e 1998b) determinaram as constantes da equação de MacDonald para leitos de enchimento formados por esferas e por cilindros, tendo observado que quanto maior fosse a razão entre o diâmetro e comprimento das partículas,

maiores eram os desvios observados entre os valores das constantes sugeridos e os valores obtidos por ajuste dos dados experimentais, em particular para a constante B . Os autores atribuíram estes desvios a efeitos de orientação das partículas no interior do meio poroso, o que provoca a ocorrência de caminhos preferenciais através dos leitos de enchimento formados pelas partículas. Conclusões similares foram obtidas por Foumeny *et al.* (1996) para cilindros com diferentes razões de dimensões características.

Para valores elevados de porosidade, a hipótese de que a estrutura do meio poroso pode ser considerada como um conjunto de capilares deixa de ser válida. Como as partículas se encontram bastante afastadas entre si, o escoamento em torno de cada uma delas deve ser indiferente da posição desta no leito de enchimento. Deste modo, é de se esperar que a queda de pressão prevista pela equação de Ergun seja superior ao valor real. Esta conclusão é suportada pelos resultados experimentais de Wentz e Thodos (1963). A mesma situação é observada em leitos de enchimento com uma estrutura regular (Martin *et al.*, 1951; Susskind e Becker, 1967), ou em leitos de enchimento em que a razão entre o diâmetro do leito de enchimento e o diâmetro das partículas seja pequeno, situação em que os efeitos de parede podem ser significativos (Mehta e Hawley, 1969; Foumeny *et al.*, 1993).

Para regime de escoamento turbulento perfeitamente desenvolvido, alguns autores observaram experimentalmente que a equação de Ergun não era adequada. Tallmadge (1970) conclui que f_p era função de Re , sendo a equação de Ergun válida até $Re < 1000$. Para valores de Re até cerca de 10000, este autor propôs a seguinte expressão

$$f_p = \frac{150}{Re} + \frac{4.2}{Re^{1/6}} \quad (2.56)$$

Conclusões idênticas foram obtidas por Hicks (1970). Em particular, este autor mostrou que os valores de quedas de pressão previstas pela equação de Ergun são sempre superiores às observadas experimentalmente, tendo sugerido a seguinte expressão, válida se $Re > 500$

$$f_p = 6.8 \left(\frac{Re}{1 - \varepsilon} \right)^{0.8} \quad (2.57)$$

2.3.4.4 Extensões à Equação de Ergun

Alguns autores re-analisaram o modelo de Carman-Kozeny, de forma a estender a validade deste. Liu *et al.* (1994) e Liu e Masliyah (1996) assumiram que a estrutura de um meio poroso

era isotrópica e poderia ser representada por um conjunto de tubos paralelos. Nestas condições, a relação entre v_P e v_T é dada pela expressão

$$v_P = v_T \varepsilon^{-7/6} \quad (2.58)$$

De notar na expressão anterior o expoente diferente da velocidade intersticial em comparação com o modelo de Carman-Kozeny. Para regime laminar, usando as Equações 2.20 e 2.58, a queda de pressão é expressa na forma

$$-\frac{\Delta p}{L} = \frac{36k_1 \mu (1 - \varepsilon)^2}{D_p^2 \varepsilon^{11/3}} v_T \quad (2.59)$$

em que k_1 é uma constante análoga à constante de Carman-Kozeny, k_k . A dependência da porosidade obtida é diferente da obtida por Carman, sendo o valor da potência associada a ε similar ao valor proposto por MacDonald *et al.* (1979) com base em dados experimentais.

O modelo de Liu *et al.* (1994) foi estendido para regimes de escoamento não-linear através de um meio poroso. Ao contrário de Ergum (1952), em que as expressões limites para regime linear e regime turbulento são combinadas entre si, estes autores definiram um número de Reynolds e um factor de fricção modificados, Re_{pLam} e f_{Lam} , tomando em conta as hipóteses assumidas para a estrutura do meio poroso.

$$Re_{pLam} = \frac{D_p \rho v_T}{(1 - \varepsilon) \varepsilon^{1/6} \mu} \quad (2.60)$$

$$f_{Lam} = \frac{\Delta p}{L} \frac{D_p^2 \varepsilon^{11/3}}{\mu v_T (1 - \varepsilon)^2} \quad (2.61)$$

Estes autores assumiram que nas condições limites em que as forças viscosas ou as forças inerciais são dominantes, f_{Lam} verifica as seguintes formas limites

$$f_{Lam} = 36k_1 \quad (2.62)$$

$$f_{Lam} = \beta_{Lam} Re_{pLam}^{n_L} \quad (2.63)$$

sendo β_{Lam} e n_L duas constantes empíricas determináveis de dados experimentais. As duas expressões estão de acordo com as previsões da Equação de Ergun, que prevê $n_L = 1$. Para

caracterizar o escoamento quando as forças inerciais são dominantes, Liu *et al.* (1994) consideram que este é a soma dos efeitos da mistura do fluido no interior do meio poroso e da curvatura dos poros. Este último efeito foi relacionado com a variação da área de secção recta disponível para o escoamento através do meio poroso, caracterizada pelo raio de curvatura médio dos poros.

De modo a tomar em conta estes efeitos, Liu *et al.* (1994) definiram um número de Reynolds modificado na forma

$$Re_m = \frac{1 + \sqrt{1 - \sqrt{\varepsilon}}}{(1 - \varepsilon)^{1/6}} \frac{D_p \rho v_T}{\mu} \quad (2.64)$$

De acordo com a hipótese de Ergun de que o factor de fricção global era a soma dos factores de fricção limites para regime laminar e regime turbulento, f_{Lam} pode ser escrito na forma

$$f_V = \frac{\Delta P_T}{L} \frac{D_p^2 \varepsilon^{11/3}}{\mu v_T (1 - \varepsilon)^2} = A_{LM} + \frac{Re_m^2}{C_{LM}^2 + Re_m^2} B_{LM} Re_m \quad (2.65)$$

em que A_{LM} e B_{LM} são constantes função da estrutura e das características do meio, análogas às constantes A e B da Equação 2.36, e C_{LM} é uma constante que traduz a importância relativa das forças inerciais no escoamento, sendo dependente da transição entre regime laminar e não laminar de escoamento. De acordo com a Equação 2.62, $A_{LM} = 36k_1$, dependendo k_1 das características geométricas do meio poroso. A partir dos dados experimentais de Ergun (1953) e MacDonald *et al.* (1979), $B_{LM} = 0.69$. O valor de C_{LM} foi determinado a partir de dados experimentais, assumindo que o seu valor é proporcional ao número de Reynolds crítico em que ocorre a transição para regime de escoamento não-linear. A partir dos dados de Dybbs e Edwards (1984) e Fand e Thinakaran (1993), $C_{LM} = 16$ e é possível definir um factor de arrasto, F_{Lam} , na forma

$$F_{Lam} = f_V \frac{1 - \varepsilon^2}{D_p^2 \varepsilon^{11/3}} \quad (2.66)$$

em que f_V é dado pela Equação 2.65. Liu *et al.* (1994) e Liu e Masliyah (1996) compararam as previsões deste modelo com as previsões do modelo de Ergun, para diferentes meios porosos e numa gama alargada de valores de porosidade. Em qualquer dos casos analisados e

para todos os regimes de escoamento, o modelo proposto por estes autores é superior. Liu e Masliyah (1996) estenderam a análise de Liu *et al.* (1994) ao caso em que o escoamento se encontra em regime turbulento. Nestas condições, estes autores argumentam que os efeitos da tortuosidade dos canais são desprezáveis, de acordo com os resultados obtidos por Skjetne *et al.* (1999). Com base em argumentos heurísticos, Liu e Masliyah (1996) assumiram que a Equação 2.65 podia também incluir a influência da turbulência do fluido, através da expressão

$$f_V = A_{LM} + B_{LM} \frac{Re_m^2}{C_{LM}^2 + Re_m^2} Re_m + (B_T \varepsilon Re_T - B_{LM} Re_m) \frac{Re_T^2}{700^2 + Re_T^2} \quad (2.67)$$

em que B_T é uma constante, designada por constante inercial por estes autores. Com base em dados experimentais disponíveis na literatura, estes autores estimaram $B_T = 1.6$. O factor de arrasto F_{Lam} é definido pela Equação 2.66. Re_T é um número de Reynolds modificado, definido pela expressão

$$Re_T = \frac{D_P \rho v_T}{\sqrt{\varepsilon} \mu} \quad (2.68)$$

Liu e Masliyah (1999) propuseram uma forma distinta para F_{Lam} , assumindo que o meio poroso poderia ser representando como uma rede bidimensional de câmaras e canais e que a queda de pressão para o escoamento através do meio é devida ao escoamento nos canais. Estes são considerados como sendo equivalentes a capilares, com o mesmo diâmetro e comprimento médios. Com base em dados experimentais da queda de pressão através de orifícios estes autores chegaram à seguinte expressão

$$F_{Lam} = \frac{18(1-\varepsilon)}{\varepsilon^{29/6} D_P^2} \left[0.637 + \frac{0.363}{s_\phi} + 0.048 \frac{1 + 0.46 s_\phi \sqrt{1-\sqrt{\varepsilon}}}{s_\phi} \frac{Re_o^2}{36 + Re_o^2} (Re_o - 3) \right] \quad (2.69)$$

em que s_ϕ é razão entre o diâmetro e comprimento dos canais e Re_o é um número de Reynolds definido por

$$Re_o = \varepsilon \frac{D_P \rho v_T}{\mu} \quad (2.70)$$

Comiti e Renaud (1989) procuraram estender a aplicabilidade da Equação de Ergun ao caso em que os leitos de enchimento são formados por partículas com formas muito diferentes da esférica. Estes autores tomam em conta a variação da tortuosidade com a forma das

partículas e a estrutura do meio poroso e a área superficial das partículas, tendo proposto que a queda de pressão através de um meio poroso pode ser descrita pela expressão (Mauret e Renaud, 1997)

$$\frac{\Delta P_T}{L_X} = 2\gamma_M \mu a_{vd}^2 \frac{1}{T^2} \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} v_T + \frac{f}{2} \rho \frac{1}{T^3} a_{vd} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} v_T^2 \quad (2.71)$$

em que γ_M é um factor geométrico dependente da forma dos poros existentes no meio poroso, a_{vd} é a área superficial específica das partículas e $f/2 = 0.0968$. Para leitos de enchimento formados por esferas, $\gamma_M = 1$ e $a_{vd} \approx a_V$, em que a_V a área superficial das partículas do meio poroso (Comiti e Renaud, 1989). A equação de Ergun pode ser representada num forma análoga à da Equação 2.71, na forma

$$\frac{\Delta P_T}{L_X} = A_M \mu a_V^2 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} v_T + B_M \rho a_{vd} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} v_T^2 \quad (2.72)$$

em que $A_M = 4.2$ e $B_M = 0.292$. O valores da tortuosidade T e de a_{vd} são determinados de dados experimentais obtidos para leitos de enchimento com diferentes tipos de partículas. Uma expressão para a determinação de T em função do tipo de partículas e da porosidade do leito foi proposta por estes autores, sendo esta apresentada na Secção 2.3.3 (Equação 2.14).

Comparando os valores previstos pela equação de Ergun (1952) com os valores previstos pelo modelo de Comiti e Renaud (1989), verifica-se que apenas para leitos de enchimento de esferas é que são concordantes. Este modelo foi aplicado por Comiti *et al.* (2000) na determinação dos critérios de transição entre regime linear e não-linear de escoamento. Estes autores mostraram que, independentemente do tipo de partículas que constituem o leito de enchimento e do tipo de fluido, os efeitos inerciais no escoamento podem ser desprezados desde que $Re < 4$.

Mauret e Renaud (1997) analisaram em que condições o modelo de capilares paralelos proposto por Comiti e Renaud (1989) era válido, quando comparado com as previsões dos modelos baseados no escoamento em torno de partículas, válidos quando os valores de porosidade são mais elevados. Utilizando dados experimentais obtidos em leitos de enchimento formados por esferas, com porosidade baixa, e fibras, com porosidade elevada, Mauret e Renaud (1997) mostraram que as zonas em que o modelo de Comiti e Renaud é válido dependiam das características das partículas e do regime de escoamento. Em particular,

para leitos de enchimento formados por esferas, em regime laminar o modelo de capilares paralelos é válido apenas para valores de porosidade baixos, enquanto que para regime turbulento é válido em toda a gama de valores de porosidade. A mesma situação ocorre para leitos de enchimento formados por fibras, embora os dados experimentais utilizados por Mauret e Renaud (1997) não permitam a obtenção de conclusões mais detalhadas. Estes autores atribuíram estas diferenças de comportamento à forma como as partículas influenciam o escoamento em função de Re .

Puncochár e Drahos (2000) analisaram também a validade dos resultados previstos pelos modelos de capilares paralelos. Em vez de comparar as previsões do modelo de capilares paralelos com dados experimentais, estes autores definiram uma função Q^* , definida pela expressão

$$Q^* = \left(-\frac{1}{F_D} \frac{\partial F_D}{\partial \varepsilon} \right)_{V_{T,\varepsilon}} \quad (2.73)$$

em que F_D é a força de arrasto total exercida pelo fluido nas partículas que formam o meio poroso. Assumindo que a queda de pressão pode ser determinada a partir dos modelos de capilares paralelos, de acordo com a seguinte forma geral

$$\frac{\Delta P_T}{L_X} = A_D \left(\frac{1}{T} \right)^2 \frac{\mu v_T}{D_p^2} \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} + B_D \left(\frac{1}{T} \right)^3 \frac{\rho v_T^2}{D_p} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \quad (2.74)$$

Aplicando a Equação 2.73, obtém-se a seguinte expressão

$$Q^* = \frac{1 - [\partial(1/T)/\partial \eta](B_D/A_D)Re}{1 - \varepsilon + (1/T)(B_D/A_D)Re} + \frac{3}{\varepsilon} - 2T \frac{\partial(1/T)}{\partial \varepsilon} \quad (2.75)$$

Puncochár *et al.* (1990) mostraram que a função Q^* é fisicamente válida desde que $\partial Q^*/\partial \varepsilon \leq 0$, pelo que o critério de validade dos modelos de capilares paralelos pode ser definido pelos pontos em que $\partial Q^*/\partial \varepsilon = 0$.

Estes autores determinaram as zonas de validade das equações de Ergun (1952), de MacDonald *et al.* (1979) e de Comiti e Renaud (1989) em função da porosidade do meio poroso e do número de Reynolds para o escoamento. Puncochár e Drahos (2000) concluíram que as zonas de validade dos vários modelos são idênticas. As mesmas dependências dos

regimes de escoamento observadas por Mauret e Renaud (1997) foram obtidas por estes autores, tendo também mostrado que a utilização de diferentes funções da tortuosidade em função da porosidade não modifica apreciavelmente a gama de validade do modelo.

2.3.5 Modelos Baseados em Redes de Elementos Simples

Os modelos descritos na secção anterior baseiam-se na aplicação de analogias com o escoamento em sistemas para os quais as características do escoamento são bem conhecidas, sendo o modelo de Carman-Kozeny o exemplo típico deste tipo de modelos. Estes modelos permitem uma descrição adequada do comportamento macroscópico mas é necessário definir constantes empíricas a determinar recorrendo a dados experimentais. Por outro lado, apenas informação das características macroscópicas do meio poroso, como por exemplo o valor da porosidade, são usados nesse tipo de modelos. Na descrição de certos fenómenos de transporte, como por exemplo no transporte de massa e na simulação da reacção química, o conhecimento detalhado da estrutura local pode ser fundamental, mesmo que baseado em dados experimentais.

Os modelos de redes de elementos podem ser considerados como similares aos modelos baseados no conceito de diâmetro hidráulico, pois ambos admitem que a estrutura do meio poroso pode ser representada por elementos mais simples. No entanto, os modelos de redes definem os elementos ao nível local, enquanto os modelos baseados no diâmetro hidráulico definem apenas um tubo equivalente para o escoamento, sendo o diâmetro deste tubo função das características do meio poroso.

Na Secção 2.2.4 foram descritos e caracterizados os vários modelos de redes de elementos simples propostos na literatura para a representação da estrutura de meios porosos. De acordo com a classificação para a estrutura dos modelos de rede proposta na Secção 2.2.4, é também aqui conveniente efectuar a divisão entre modelos unidimensionais e modelos bidimensionais e tridimensionais. Como nos modelos unidimensionais os elementos da rede são independentes uns dos outros, não se torna necessário entrar em conta na modelização do escoamento com as possíveis relações existentes entre estes. A inclusão da estrutura do modelo de redes, em particular da forma como os vários elementos estão associados, obriga a considerar o comportamento de todos os elementos da rede no modelo, tornando mais difícil a análise do escoamento numa rede bidimensional ou tridimensional.

2.3.5.1 Modelos Unidimensionais

Neste tipo de modelos de redes, os elementos não se encontram interligados entre si, comportando-se portanto de forma independente e assim, a modelização do escoamento pode ser efectuada analisando apenas um dos elementos. Mesmo quando as dimensões características dos elementos da rede não são constantes mas seguem uma distribuição estatística, é possível caracterizar o comportamento do meio usando parâmetros adimensionais e tomando em conta as características locais do meio poroso.

Um exemplo típico é o modelo de capilares paralelos, podendo ser observado um exemplo na Figura 2.2. Este modelo foi um dos primeiros modelos para a estrutura de um meio poroso proposto na literatura, ainda sendo utilizado regularmente na determinação de distribuições de tamanhos de poros a partir de dados experimentais de porosimetria de mercúrio. No caso mais simples, os elementos são considerados como sendo tubos cilíndricos com diâmetro constante, embora a definição de outro tipo de elementos regulares tenha sido proposta na literatura (Bear, 1972).

Assumindo que o meio poroso é uniforme, a área de secção recta do meio pode ser dividida em n_p capilares com o mesmo diâmetro médio. A porosidade do meio poroso pode ser relacionada com n_p e com o diâmetro médio d_c dos capilares pela expressão

$$\varepsilon = \frac{n_p \pi d_c^2}{4} \quad (2.76)$$

Se o escoamento através dos elementos da rede for laminar, a velocidade intersticial é dada pela expressão

$$v_p = -\frac{n_p \pi d_c^4}{128 \mu} \frac{dP}{dx} \quad (2.77)$$

Comparando a equação anterior com a equação de Darcy, a permeabilidade pode ser estimada pela expressão

$$k = \frac{\varepsilon d_c^2}{32} \quad (2.78)$$

Algumas desvantagens podem ser apontadas ao modelo anterior. O mais óbvio relaciona-se com o facto de os elementos que constituem um meio poroso apresentarem em geral uma

distribuição de dimensões características, excepto em casos muito específicos em que a estrutura do meio poroso é controlada. A utilização de um valor médio do diâmetro dos capilares pode não ser adequada para a descrição do escoamento em muitas situações, devido à forte influência das distribuições de dimensões características no comportamento de um meio poroso. Um exemplo desta influência pode ser encontrado no escoamento de um fluido em regime laminar, em que, como a resistência ao escoamento é proporcional ao inverso do diâmetro do capilar elevado à quarta potência, serão os capilares com menor diâmetro aqueles que controlam o comportamento do meio poroso.

Verifica-se também que o modelo de capilares paralelos não prevê o comportamento observado experimentalmente para o escoamento através de um meio poroso (Sheffield e Metzner, 1976; Duda *et al.*, 1983). Apesar do modelo de capilares em paralelo ser claramente incapaz de modelizar o escoamento de um meio poroso real, este poderá ser adequado em algumas situações especiais, em que a estrutura do meio é controlada. Um exemplo de interesse prático diz respeito aos monólitos utilizados nos conversores catalíticos de automóveis, actualmente uma forte área de investigação em engenharia de reacção química (Irlandoust e Anderson, 1988).

Uma forma natural de simular uma distribuição de diâmetros característicos é permitir que os diâmetros dos elementos tenham uma distribuição de diâmetros. No entanto, Scheidegger (1960) mostra que a relação funcional entre o valor da permeabilidade e a porosidade não é modificada pela inclusão de uma distribuição de dimensões características dos elementos da rede.

Por outro lado, o modelo de capilares paralelos apenas é capaz de descrever o comportamento do meio poroso segundo a direcção principal de escoamento. Com o objectivo de incluir a influência do escoamento em mais do que uma dimensão, Scheidegger (1960) sugeriu a inclusão de um parâmetro empírico que permite a extensão deste modelo a casos em que o escoamento não é só unidimensional, na forma

$$k = \frac{\varepsilon d_c^2}{T \alpha_s} \quad (2.79)$$

em que α_s representa uma constante dependente do número de dimensões independentes consideradas relevantes na descrição do escoamento através de um meio poroso. Scheidegger

(1960) sugeriu os valores de $\alpha_s = 32$ e $\alpha_s = 64$, para escoamento unidimensional e bidimensional, respectivamente.

O modelo anterior de capilares considera que os capilares são cilíndricos. Esta hipótese pode ser relaxada, podendo ser utilizada a forma geométrica mais adequada ao meio poroso em estudo. Em particular, um dos aspectos mais importantes da estrutura local é a existência de variações na área de secção recta disponível para o escoamento, equivalentes a contracções e a expansões. Esta característica da estrutura local do meio poroso apenas pode ser tomada em conta se as dimensões dos capilares variarem ao longo do meio. A capacidade de descrever a geometria do meio com mais rigor aumenta a complexidade da descrição do comportamento hidrodinâmico dos elementos da rede. Em particular, o escoamento ao nível local deixa de ser unidimensional. No entanto, como nos modelos de rede unidimensionais os elementos existentes não se intersectam entre si, o comportamento macroscópico previsto pela rede é essencialmente unidimensional. Por exemplo, se existir um perfil de velocidades de entrada do fluido à entrada de um meio poroso, o perfil de velocidades à saída do meio poroso vai ser idêntico. Como os elementos da rede não estão relacionados entre si, o comportamento qualitativo do perfil de velocidades não se modifica ao longo da rede. Exemplos de elementos complexos usados em redes unidimensionais são apresentados na Figura 2.2.

Petersen (1958) e Houpert (1959) foram os primeiros autores a sugerir a utilização de elementos com área de secção recta variável na modelização dos fenómenos de transporte através de um meio poroso. Em ambos os trabalhos, foi considerado que os elementos eram cilíndricos e que a variação da área de secção recta do capilar era uma função conhecida da posição. Petersen (1958) utilizou o seu modelo na modelização do transporte de massa por difusão no interior do meio poroso, pelo que este autor não necessitou de descrever o campo de escoamento no interior dos capilares. Houpert (1959) aplicou o seu modelo ao escoamento de um gás através de um leito de enchimento (ver Figura 2.2). Como a variação do raio do capilar é periódica, a análise do escoamento pode ser reduzida à parte do capilar que se repete sucessivamente ao longo deste. Fazendo um balanço de forças a um elemento representativo, e admitindo que o escoamento na constrição dos canais é equivalente ao escoamento através de um orifício, este autor mostrou que a queda de pressão através do capilar era uma função quadrática da velocidade, qualitativamente similar à equação de Forchheimer. No entanto, ao contrário desta última, os valores dos parâmetros podem ser determinados a partir das características geométricas dos capilares.

Blick (1966) utilizou uma estratégia similar à de Houpert (1959), mas os elementos da rede foram considerados como sendo tubos cilíndricos de raio constante com constrições no seu interior, como se pode observar na Figura 2.2. Do ponto de vista geométrico, o raio dos capilares é constante, actuando as constrições como orifícios. Definindo um volume de controle contendo duas constrições, este autor mostrou que a queda de pressão em função de v_p , podia ser expressa pela seguinte expressão

$$-\frac{\Delta P}{L_X} = \frac{2fRe}{d_c^2 \varepsilon} \mu v_p + \frac{C_D \rho}{2\varepsilon^2 d_c} v_p^2 + \frac{\rho v_p}{\varepsilon^2} \frac{\partial v_p}{\partial x} - \rho g \cos \theta \quad (2.80)$$

em que $\partial v_p / \partial x$ representa a variação da velocidade no interior do poro em função de x , coordenada axial do capilar (no sentido principal de escoamento através do capilar) e f e C_D representam, respectivamente, o factor de fricção e o coeficiente de arrasto para o escoamento através de uma placa com um orifício. O número de Reynolds é definido usando o diâmetro dos capilares. Para o escoamento de um gás em estado estacionário, desprezando a influência da gravidade e assumindo comportamento ideal, obtém-se uma equação quadrática para a queda de pressão através do meio poroso, na forma

$$-\frac{\Delta P}{L_X} = \frac{2fRe}{d^2 \varepsilon A_B} \mu v_p + \frac{\rho}{a \varepsilon^2} \left(\frac{C_D}{2d} - \frac{1}{T_a} \frac{\partial T_a}{\partial x} \right) v_p^2; \quad A_B = 1 - \frac{v_p^2}{\varepsilon^2} \frac{M}{Z \Re T_a} \quad (2.81)$$

em que Z e M são o factor de compressibilidade e a massa molecular respectivamente do gás, $\Re$ a constante universal dos gases e T_a a temperatura absoluta. A derivada da temperatura absoluta em ordem à coordenada espacial representa a dissipação de energia térmica provocada pela fricção nas paredes do tubo, termo significativo para velocidades do gás próximas da velocidade do som.

Da mesma forma que na análise efectuada por Houpert (1959), uma equação qualitativamente similar à equação de Forchheimer é obtida, sendo possível exprimir as constantes a' e b' em função das dimensões características geométricas do capilar e das propriedades do fluido em escoamento. O único termo variável na Equação 2.81 é a expressão de C_D a utilizar, dependente do tipo de constrição que é considerado. Blick (1966) comparou os valores previstos pelo seu modelo considerando várias expressões para C_D com dados experimentais, tendo concluído que este era capaz de descrever o comportamento do meio poroso para regime laminar e de transição. Para regime turbulento, desvios acentuados com os dados

experimentais foram observados, o que pode ser atribuído a uma escolha incorrecta da expressão de C_D utilizada. Niven (2002) efectuou uma análise similar à efectuada por Blick (1966) tendo obtido expressões similares à obtida por Blick (1966).

Elementos com variações abruptas do diâmetro foram utilizados por outros autores. Azzam e Dullien (1977), Ruth e Ma (1993) e Cao e Kitanidis (1998) propuseram a utilização de capilares cilíndricos constituídos por secções de raio constante, como se pode observar na Figura 2.2. A influência das forças inerciais foi tomada em conta explicitamente, tendo as equações sido resolvidas por um método de diferenças finitas nos dois primeiros trabalhos e por elementos finitos com uma grelha adaptativa no terceiro. Os resultados numéricos mostram que, mesmo em condições de escoamento puramente viscoso, a queda de pressão prevista é superior à queda de pressão prevista com o diâmetro constante, sendo as diferenças tanto mais acentuadas quanto maior for a razão entre os diâmetros das várias secções do capilar. Observa-se também uma transição suave entre os regimes linear e não-linear, que ocorre para valores de Re muito inferiores aos valores observados em tubos cilíndricos de diâmetro constante. Estas características podem ser atribuídas à formação de zonas de recirculação nas secções em que o diâmetro do tubo é maior, induzindo um comportamento não-linear no escoamento.

Os resultados experimentais obtidos por Dullien e Azzam (1973) e Cieslicki (1988) confirmam os resultados numéricos obtidos por Azzam e Dullien (1977). Cieslicki (1988) mostrou também, através da visualização directa do escoamento, que as zonas de recirculação apenas se formavam nas zonas dos tubos com maior diâmetro.

Ma e Ruth (1994) usaram os resultados obtidos por Ruth e Ma (1993) na determinação da força interfacial exercida pelo fluido na fase sólida. Admitindo que o meio poroso é espacialmente periódico, após definir uma célula representativa do meio poroso basta apenas determinar a força exercida nesta. Por um balanço de forças efectuado a todo o meio poroso, a força interfacial total pode ser determinada facilmente, visto esta ser aditiva. Recorrendo a um método de *volume averaging*, estes autores dividiram a força total em dois termos, representando a influência das forças viscosas e inerciais respectivamente. Os resultados obtidos permitem concluir que a perda de carga associada às forças inerciais depende sobretudo da razão de diâmetros entre as diferentes secções dos capilares, mas que a transição entre regime linear e não-linear é independente do número de Reynolds para estrutura do meio poroso considerada.

Os resultados obtidos pelos modelos descritos atrás estão qualitativamente de acordo com os dados experimentais disponíveis para o escoamento num meio poroso, em particular as características das zonas de transição previstas por estes modelos. No entanto, num meio poroso real não são de esperar variações abruptas do raio dos elementos que os constituem. Tomando novamente como exemplo um leito de enchimento formado por partículas, as dimensões dos capilares existentes entre as partículas variam de um modo contínuo e não abrupto.

Vários modelos foram propostos em que o raio dos tubos varia segundo uma função contínua da distância, tendo Pendse *et al.* (1983) analisado e comparado algumas das opções disponíveis na literatura. De modo a simplificar a resolução numérica das equações de conservação, a variação do raio é uma função periódica da distância no sentido do escoamento ao longo do tubo. O problema reduz-se então à análise do problema numa célula fundamental do escoamento, que se repete ao longo do tubo.

Payatakes *et al.* (1973a, 1973b) consideraram tubos em que o raio varia segundo uma função quadrática. Os efeitos inerciais são tomados em consideração, sendo as equações de conservação resolvidas através de um método de diferenças finitas. Os resultados previstos pelo modelo mostram que os efeitos inerciais são significativos muito antes do surgimento de turbulência no escoamento. Um modelo geométrico foi desenvolvido para a determinação dos parâmetros da função quadrática a partir de dados experimentais da penetração de água em leitos de enchimento. Os resultados previstos pelo modelo foram comparados com dados experimentais da queda de pressão em leitos de enchimento formados por partículas de diâmetro uniforme, tendo-se observado boa concordância entre eles. Uma solução analítica para a mesma geometria para regime de escoamento puramente viscoso, foi obtida por Neira e Payatakes (1978) recorrendo a um método de colocação ortogonal. Os resultados obtidos pelas duas estratégias são concordantes.

Sáez *et al.* (1986) usaram tubos em que o raio varia segundo uma função parabólica. Assumindo que o meio poroso pode ser representando por um leito de enchimento com uma estrutura regular cúbica simples e formado por esferas com diâmetro constante, foi possível determinar a expressão analítica da função de variação do raio dos canais em função das características das partículas. As equações de balanço foram resolvidas por um método de elementos finitos, sem tomar em conta os efeitos das forças inerciais. Os valores previstos para a constante A da equação de MacDonald estão de acordo com os resultados teóricos e experimentais disponíveis para a estrutura do meio poroso que foi assumida.

Fedkiw e Newman (1977) usaram uma função sinusoidal para descrever as variações do raio dos capilares. Assumindo que os efeitos inerciais no escoamento são desprezáveis, o campo de escoamento foi descrito usando um método de colocação ortogonal. O mesmo método foi considerado por Neira e Payatakes (1979), tendo estes autores obtido soluções analíticas para o comportamento do capilar. Tilton e Payatakes (1984) analisaram os resultados obtidos por Neira e Payatakes (1979) tendo corrigido um erro de implementação do método numérico, em que ocorria a formação de uma descontinuidade no perfil de velocidade do fluido nos capilares.

Hemmat e Borhan (1995) e Cao e Kitanidis (1998) analisaram o problema do escoamento em capilares com um raio variável segundo uma função sinusoidal. Em ambos os estudos as forças inerciais foram desprezadas, tendo-se observado que são as constrições existentes nos capilares que controlam a perda de carga no escoamento através dos capilares. A formação de zonas de recirculação depende das características geométricas e de escoamento. Hemmat e Borhan (1995) mostraram que o aumento da amplitude e a redução da frequência da função sinusoidal induzia à formação de zonas de recirculação. Para valores de velocidade baixos, o perfil de velocidades tende para o perfil de Poiseuille típico de tubos cilíndricos, de acordo com as conclusões de Deiber e Schowalter (1979).

Deiber e Schowalter (1979) e Lahbabi e Chang (1986) analisaram o mesmo problema mas tomando agora em consideração as forças inerciais no escoamento. No primeiro trabalho, uma técnica iterativa foi implementada com base no facto de que quando a frequência da função sinusoidal é muito elevada, o comportamento do tubo com constrições se aproxima do comportamento de um tubo com raio constante. Assumindo inicialmente um perfil de velocidades descrito pela equação de Poiseuille, Deiber e Schowalter (1979) vão modificando o perfil de velocidades até que as condições fronteira sejam verificadas. Lahbabi e Chang (1986) resolvem as equações de balanço por um método de Galerkin, usando funções trigonométricas como funções base. Os resultados previstos pelo modelo comparam-se favoravelmente com dados experimentais, em particular para regime laminar de escoamento. Estes autores mostraram que a influência das forças inerciais é significativa antes dos efeitos serem visíveis macroscopicamente, dependendo estes das características dos capilares. Os valores previstos do número de Reynolds para a transição previstos por Lahbabi e Chang (1986) estão qualitativamente de acordo com dados experimentais obtidos para leitos de enchimento de esferas.

Venkatesan e Rajagoplan (1980) assumiram que o raio varia segundo uma função hiperbólica, o que permite obter uma expressão fechada para a queda de pressão em função do caudal e das dimensões características do capilar (Happel e Brenner, 1983), se apenas os efeitos das forças viscosas forem tomados em consideração. Os valores previstos por este modelo são comparados com os valores previstos para um capilar em que o raio varia segundo uma função parabólica (Payatakes *et al.*, 1973a e 1973b), tendo-se observado que as previsões eram praticamente equivalentes.

A mesma estratégia de utilização de tubos em que o raio varia segundo uma função hiperbólica foi utilizada por outros autores (Saeger *et al.*, 1995; Thompson e Fogler, 1997). Saeger *et al.* (1995) determinaram as características geométricas dos elementos equivalentes do meio poroso analisando a estrutura local dos três tipos possíveis de enchimentos regulares cúbicos que é possível criar. Os resultados previstos pelo modelo comparam-se favoravelmente com os resultados teóricos de outros autores (Zick e Homsy, 1982).

Os resultados obtidos por Venkatesan e Rajagoplan (1980) e a comparação crítica dos modelos efectuada por Pendse *et al.* (1983) permitem concluir que qualquer das funções de variação do raio dos capilares propostas na literatura prevê valores similares para a queda de pressão através de um meio poroso. Por comparação com o modelo de Carman-Kozeny, Pendse *et al.* (1983) concluíram que funções sinusoidais eram as mais adequadas na descrição do comportamento de meios porosos reais.

Para leitos de enchimento de partículas esféricas ou quasi-esféricas assumir que os capilares da rede têm secção circular parece ser adequada. Para outros tipos, em particular meios porosos consolidados ou fracturados, outras formas geométricas são mais adequadas. Pozrikidis (1987) analisou o escoamento em regime puramente viscoso num elemento formado por duas placas, assumindo várias formas geométricas. O sistema de equações de balanço foi resolvido usando um método integral, em que a geometria do canal é tomada em conta explicitamente. Para elementos em que o espaçamento das paredes varia segundo uma função sinusoidal, os resultados obtidos mostram a existência de uma frequência limite a partir da qual se formam zonas de recirculação no escoamento, dependendo as suas características da amplitude desta função.

Skjetne *et al.* (1999) consideraram o caso em que os canais são de placas paralelas, em que o espaçamento é irregular, e a interface entre o fluido e o sólido possui características fractais. Os efeitos inerciais são tomados em consideração na descrição do escoamento, tendo sido

analisada a influência da estrutura do elemento nos perfis de velocidade para várias condições de escoamento. Os resultados obtidos permitem concluir que o perfil de velocidade é mais sensível à estrutura do canal quando as forças viscosas são dominantes, sendo a queda de pressão controlada pelas constrições do canal. Para escoamento com número de Reynolds elevado, os resultados obtidos mostram a existência de duas zonas distintas para escoamento através do tubo. Na zona mais próxima das paredes do canal forma-se uma camada limite em que se exercem as forças viscosas. Na zona central do canal são observadas as velocidades mais elevadas, sendo a estrutura do campo de escoamento independente das características da parede. Os resultados obtidos mostram também a existência de uma dependência cúbica da velocidade na queda de pressão na zona de transição entre regime linear e não-linear, de acordo com os resultados de outros autores (Mei e Auriault, 1991).

Mesmo tomando em conta que estes modelos podem não ser adequados na descrição do escoamento através de um meio poroso, alguns trabalhos utilizaram-nos na modelização de fenómenos de transporte através de um meio poroso. Por exemplo, Payatakes *et al.* (1974) e Choo e Tien (1995) utilizaram o modelo de Payatakes *et al.* (1973a e 1973b) na modelização do comportamento de um filtro de partículas coloidais. O modelo permite prever qualitativamente a variação de permeabilidade com a taxa de deposição de partículas, sendo necessária a definição de uma constante empírica para que a concordância com o modelo seja quantitativa. Paraskeva *et al.* (1991) estenderam esta análise a capilares com uma forma sinusoidal, com base nos resultados obtidos por Tilton e Payatakes (1984), tendo estudado a influência da orientação dos poros do meio poroso no comportamento do filtro.

Sheffield e Metzner (1976) propuseram uma estratégia de caracterização do escoamento para elementos de raio variável, válida quando o escoamento se encontra em regime laminar e a variação das dimensões características deste é contínua em função do comprimento, baseada na teoria da lubrificação. Apesar de nesse trabalho apenas se considerarem fluidos não-newtonianos, a mesma estratégia pode ser aplicada sem problemas ao caso de fluidos newtonianos (Dias e Payatakes, 1986a). Assumindo que o escoamento é paralelo, a queda de pressão num incremento infinitesimal do canal é dada pela expressão

$$-\frac{\partial P}{\partial x} \propto \frac{q}{d_c^4} \quad (2.82)$$

em que q e d_c representam o caudal volumétrico e a dimensão característica do elemento da rede respectivamente. Para um capilar cilíndrico, a constante de proporcionalidade é igual a

$128/\pi$, de acordo com a equação de Poiseuille. Assumindo que o escoamento é unidirecional, é possível integrar a Equação 2.82 para todo o comprimento da célula fundamental, obtendo-se a expressão

$$\Delta P = c_p q \int_0^{l_p} \frac{dx}{d_c^4(x)} \quad (2.83)$$

em que c_p é uma constante de proporcionalidade que depende das características geométricas do tubo, em particular da função de variação das dimensões características do canal.

Dias e Payatakes (1986a) utilizaram esta estratégia para incluir a influência das expansões e das contracções dos canais que formam a estrutura porosa. Estes autores admitiram que o diâmetro é descrito por uma função sinusoidal possuindo três parâmetros, determinados a partir de dados experimentais. Constantinides e Payatakes (1989) utilizaram um canal composto por três partes distintas. A uma parte central de raio constante encontram-se associadas em cada um dos extremos zonas de raio variável, podendo estas possuir formas distintas. Os elementos usados por estes autores foram usados em redes bi e tridimensionais, descritas na Secção 2.2.4.

Larson e Hidgon (1989) aplicaram a mesma estratégia na descrição do escoamento através de um meio poroso consolidado. O modelo foi construído a partir de um leito de enchimento formado por esferas dispostas segundo uma estrutura cúbica, em que os pontos de contacto se fundiram. Os resultados obtidos por esta aproximação foram comparados com os resultados teóricos obtidos para vários valores de porosidade, tendo-se concluído que a utilização da teoria da lubrificação era adequada para meios porosos com valores baixos de porosidade. Nestas condições, a resistência ao escoamento é essencialmente dependente das constricções existentes no meio poroso, situação bem descrita por este modelo limite.

Conclusões idênticas foram obtidas por Hemmat e Borhan (1995) na análise do escoamento através de tubos cilíndricos em que o raio varia segundo uma função sinusoidal. Comparando os resultados obtidos por simulação com os valores previstos por uma solução analítica válida para a zona da constricção, estes autores obtiveram boa concordância entre resultados teóricos e de simulação. Estes autores compararam ainda os resultados obtidos por simulação com os valores previstos pelo modelo proposto por Sheffield e Metzner (1976) assumindo um raio hidráulico equivalente para o tubo (equivalente a definir um tubo cilíndrico de raio constante). Os resultados obtidos permitiram concluir que o modelo de Sheffield e Metzner (1976) é mais

adequado na descrição dos resultados da simulação, tendo Hemmat e Borhan (1995) proposto alterações a esse modelo para torná-lo mais preciso.

2.3.5.2 Modelos de Redes Bidimensionais e Tridimensionais

Ao usar modelos de redes bidimensionais e tridimensionais, está-se a tomar em conta explicitamente a existência de interligações entre os elementos da rede. Deste modo, além da descrição do comportamento individual de cada um dos elementos da rede, é necessário tomar em conta as relações entre os vários elementos e o modo como interferem nos fenómenos de transporte estudados.

As alterações mais importantes na modelização do escoamento são a inclusão das equações de balanço material nos nós da rede e das equações de caracterização do escoamento nos canais. Na quase totalidade dos estudos (Sahimi, 1995), não é necessário escrever as equações de conservação de quantidade de movimento nos nós, ou porque se assume que a influência destes elementos da rede é desprezável, porque o seu volume é desprezável, ou porque os efeitos destas no escoamento são tomados em conta na modelização do escoamento nos poros (Dias e Payatakes, 1986a e 1986b). No entanto, alguns exemplos podem ser encontrados na literatura em que os dois tipos de elementos foram considerados explicitamente (Koplik, 1982; Thauvin e Mohanty, 1998; Wang *et al.*, 1999b).

Na literatura foram propostas duas estratégias para caracterizar o comportamento hidrodinâmico de redes de elementos bidimensionais e tridimensionais. A mais comum baseia-se na analogia com um circuito eléctrico, considerando-se quase sempre que nos nós a mistura de fluido é perfeita e que o escoamento se dá em estado estacionário. Esta é aplicável independentemente do tipo de elementos e da estrutura geométrica da rede. Assume-se que a pressão absoluta nos nós e o caudal nos canais são equivalentes ao potencial e à intensidade de corrente num ramo de um circuito eléctrico (Shearer *et al.*, 1967; Palm, 1983). Aplicando as leis de Kirchhoff ao circuito eléctrico equivalente, torna-se possível usar estratégias eficientes desenvolvidas na análise de circuitos (Desoer e Kuh, 1969).

Um método distinto de determinar as características do campo de escoamento nos elementos da rede consiste em utilizar o método de Hardy-Cross (Shames, 1982). Este método requer a solução de sistemas de equações lineares, sendo consideradas apenas as equações de balanço material nos nós da rede (Hampton *et al.*, 1993). O método é iterativo e requer a definição de uma estimativa inicial para os caudais volumétricos nos canais, devendo esta verificar o

balanço material nos nós da rede. A partir da estimativa inicial, os valores das pressões absolutas nos nós da rede são determinados até que se observe convergência nos valores calculados. A queda de pressão num ramo da rede é relacionada com o caudal volumétrico através deste, numa forma análoga à usada na aplicação da analogia com um circuito eléctrico.

Se a rede de elementos puder ser considerada como sendo espacialmente periódica Adler e Brenner (1985a e 1985c) propuseram um método distinto para analisar o escoamento através desta. Tomando em atenção as características locais do meio poroso, estes autores mostraram que o problema do escoamento se reduzia à caracterização do comportamento num bloco fundamental, de onde uma rede de quaisquer dimensões pode ser facilmente obtida. O sistema de equações que permite caracterizar o escoamento é resolvido tomando em conta as características espacialmente periódicas da rede e a célula fundamental. Uma expressão analítica para a permeabilidade da rede pode ser obtida através deste método, tendo as propriedades principais deste parâmetro neste tipo de modelos sido obtida. Situações em que o escoamento era linear (Adler e Brenner, 1985a) e não-linear (Adler e Brenner, 1985c) foram analisadas por este método.

Qualquer que seja a estratégia considerada na análise do comportamento da rede, é necessário caracterizar o comportamento individual dos elementos da rede. Apesar de ser possível usar qualquer das formas apresentadas na Figura 2.2, é comum assumir que os elementos são tubos cilíndricos, em que a resistência ao escoamento é determinada facilmente usando a definição de factor de fricção. Esta forma permite incluir explicitamente a influência das características geométricas dos elementos de uma forma simples e eficiente.

A aplicação da analogia com um circuito eléctrico na situação em que o escoamento nos elementos da rede é laminar e o fluido é newtoniano, em que o comportamento dos elementos da rede é linear, permite a obtenção de um sistema de equações linear nas pressões nos nós da rede (Dias e Payatakes, 1986a; Constantinides e Payatakes, 1989). Além de reduzir o número de equações que é necessário resolver simultaneamente, o sistema é simétrico e positivo definido, o que permite a utilização de algoritmos altamente eficientes na obtenção da solução deste (Suchomel *et al.* 1998a). Kantzas e Chatzis (1988a) comparam a aplicação de vários métodos iterativos de resolução de sistemas de equações lineares esparsos, tendo concluído que os mais vantajosos em termos de tempo de simulação eram os métodos de gradiente conjugado com pré-condicionamento.

Em alguns casos, como por exemplo para escoamento em regime não-linear, como é o caso se escoamento turbulento (Thauvin e Mohanty, 1998; Wang *et al.*, 1999b, Lao, *et al.*, 2004), ou se o fluido é não-newtoniano, o comportamento dos elementos da rede é não-linear. A segunda situação tem interesse na descrição e modelização de soluções de polímeros através de um meio poroso, importante em processos de recuperação terciária de petróleo. Além do comportamento não-linear da viscosidade em função da velocidade do fluido, certos fluidos apenas fluem após alcançar uma certa tensão de corte, como é o caso de fluidos de Bingham. Nestas condições, a resistência ao escoamento através dos canais depende apenas das características geométricas dos capilares da rede, resultando num sistema de equações não-linear. O perfil de pressões absolutas no interior dos nós e os caudais volumétricos nos canais devem ser determinados simultaneamente.

Sorbie *et al.* (1989) estudaram o escoamento de fluidos não-newtonianos de características pseudoplásticas através de um meio poroso usando um modelo de redes bidimensional com um número de coordenação igual a 4, tendo implementado um método iterativo para a resolução do sistema não-linear. Como a única diferença na definição da resistência ao escoamento se encontra no valor da viscosidade efectiva, Sorbie *et al.* (1989) admitem inicialmente que o fluido é newtoniano, o que permite obter um perfil de caudais e pressões no leito. Usando este perfil é possível determinar valores corrigidos da viscosidade efectiva utilizando as expressões analíticas para descrever o comportamentos dos fluidos. As características do campo de escoamento para fluidos newtonianos e não-newtonianos foram comparadas entre si, para diferentes distribuições de diâmetros dos canais. Os resultados das simulações mostram que a queda de pressão no escoamento de um fluido não-newtoniano prevista por um modelo deste tipo é inferior à real e função das características do polímero e do meio poroso.

Shah e Yortsos (1995) e Sahimi (1993b) estudaram o comportamento do escoamento de fluidos não-newtonianos descritos pela lei da potência para modelos de rede bidimensionais e tridimensionais regulares com uma geometria quadrado simples. O sistema de equações não-linear resultante é resolvido por estes autores utilizando métodos de sobre-relaxação sucessiva (Shah e Yortsos, 1995) ou de Newton-Raphson (Sahimi, 1993b). Estratégias similares foram usadas por Tsakiroglou (2002) e Balhoff e Thompson (2006) na determinação de modelos macroscópicos para caracterizar o escoamento de fluidos não newtonianos em meios porosos baseados na descrição do comportamento local por modelos de redes.

Shah e Yortsos (1995) usaram distribuições uniformes para o diâmetro dos capilares, tendo analisado a influência do valor do desvio padrão nas características do campo de escoamento. Para redes com distribuições de diâmetros com baixos valores de dispersão, a distribuição de velocidades nos capilares paralelos ao sentido do gradiente de pressões é uniforme com um valor praticamente constante. A velocidade nos canais normais à direcção do escoamento é praticamente nula, não se observando tendências locais no campo de velocidades. Estas conclusões reforçam a ideia de que os modelos de raio hidráulico são uma aproximação adequada para meios porosos com uma distribuição de tamanhos de poros uniforme. Estes autores observaram diferenças mais marcadas para distribuições de diâmetros com valores de desvio padrão mais elevados. O aumento deste valor origina a formação de caminhos preferenciais através da rede, dependendo a distribuição de velocidades também das características do fluido.

Sahimi (1993b) utilizou distribuições pontuais, em que um número aleatório de capilares toma um valor não nulo de condutividade. Estas distribuições são características de processos de percolação, e foram usadas para comparar com os resultados previstos por *effective medium approximation*. Este autor conclui que as expressões deduzidas para fluidos newtonianos devem tomar em conta as características não-lineares do fluido. Conclusões idênticas foram obtidas por Shah e Yortsos (1995).

A maior parte dos modelos de redes bidimensionais ou tridimensionais não toma em conta a influência dos nós no escoamento. No entanto, num meio poroso real existem variações locais das dimensões características dos elementos da rede e em geral o uso de elementos de dimensões variáveis permite uma descrição mais adequada da zona de transição.

Alguns modelos usam elementos iguais aos descritos na Secção 2.2.4.1 para descrever o comportamento hidrodinâmico dos canais (Dias e Payatakes, 1986a; Constantinides e Payatakes, 1989). Na escrita do sistema de equações, a influência das câmaras é tomada em conta como um termo correctivo nos canais, continuando os nós da rede a não ter influência directa no escoamento. Koplik (1982) considerou redes bidimensionais com dois tipos de elementos: câmaras esféricas ligadas por canais cilíndricos. Este autor mostrou analiticamente para regime laminar que a existência de uma ligação entre uma câmara e um canal resulta num excesso de queda de pressão. Esse termo adicional foi considerado como uma resistência adicional na modelização do escoamento. Ioannidis e Chatzis (1993) usaram a mesma estratégia no seu modelo de redes tridimensional em que os elementos possuem uma

geometria rectangular, tendo determinado a forma correcta do termo adicional de Koplik para esta geometria.

Thauvin e Mohanty (1998) e Wang *et al.* (1999b) usaram um modelo de redes tridimensional formado por dois tipos de elementos na modelização do escoamento em regime não-linear através de um meio poroso. A influência da existência de dois tipos de elementos foi determinada recorrendo a expressões que estimam a queda de pressão nos mesmos em função das características geométricas e de escoamento na rede. Foi admitido que a queda de pressão total entre o centro de duas câmaras da rede é a soma de quatro termos: um termo associado ao escoamento através dos canais; dois termos associados às expansões e contracções à saída e à entrada de um canal respectivamente; um termo adicional derivado da mudança de direcção das partículas do fluido nas câmaras. O primeiro termo é determinado admitindo escoamento laminar através dos canais, sendo os três seguintes calculados de expressões obtidas da literatura (Bird *et al.*, 1960). Nenhum termo correctivo similar à correcção de Koplik (1982) é utilizado neste modelo. Como as expressões utilizadas nos três últimos termos são não-lineares, o sistema de equações é não-linear, tendo sido usado um algoritmo de Newton-Raphson na sua resolução.

Thauvin e Mohanty (1998) mostraram que mesmo para valores baixos do número de Reynolds, correspondente a regime laminar de escoamento, os termos não-lineares são significativos, de acordo com as observações experimentais da existência de um regime de escoamento intermédio não-linear ao nível macroscópico mas laminar ao nível microscópico. Simulações foram efectuadas em modelos de redes tridimensionais com estrutura cúbica simples, para um número de coordenação igual a seis, e com distribuições distintas do diâmetro das câmaras e dos canais. A permeabilidade da rede é determinada desprezando a influência das expansões, contracções e mudanças de direcção. Os resultados obtidos permitem verificar a validade da equação de Forchheimer, permitindo a determinação da constante associada ao termo não-linear desta equação. Correlações do coeficiente inercial em função das características geométricas da rede foram obtidas, tendo os valores obtidos sido comparados favoravelmente com correlações apresentadas na literatura (Geerstema, 1974).

Wang *et al.* (1999b) utilizaram o modelo de Thauvin e Mohanty (1998) na descrição do comportamento hidrodinâmico de um meio anisotrópico. A influência das correlações entre os tamanhos dos elementos da rede, conectividade e estrutura espacial foi analisada em detalhe. A influência de cada um dos tipos de anisotropia e das características geométricas foi estudada, tendo-se concluído que a forma vectorial da equação de Forchheimer é adequada na

representação dos resultados das simulações efectuadas por Wang *et al.* (1999b). Lao *et al.* (2004) usaram um modelo de redes bidimensional para descrever o escoamento não linear através de um meio poroso, tendo atribuído o comportamento não linear às bifurcações e mudanças de direcção de escoamento existentes na rede. No entanto, estes autores não tomam em conta a existência de expansões e contracções na rede, sendo o modelo de redes também mais representativo de um meio poroso consolidado.

Implícita na utilização de dois tipos de elementos na rede encontra-se a ideia de duas distribuições distintas para descrever as dimensões dos elementos da rede. Em muitas situações, os dados experimentais disponíveis podem ser adequados para determinar os parâmetros de duas funções de distribuição. Na literatura não é comum a utilização de funções de distribuição baseadas em dados experimentais, sendo geralmente utilizadas funções de distribuição cujos parâmetros se admite serem significativos do tipo e estrutura do meio poroso em análise.

Na maior parte dos estudos efectuados com modelos de redes, as dimensões dos elementos que a constituem são descritas usando funções de distribuição, permitindo descrever a estrutura local irregular do meio poroso numa forma mais eficiente. No entanto, o uso de funções densidade de probabilidade coloca a questão de saber em que condições os resultados obtidos são estatisticamente válidos, em particular as dimensões da rede. De um modo geral, quanto maior for o número de elementos da rede utilizado, correspondente a uma amostra mais representativa das distribuições das dimensões dos elementos da rede, mais correctos são os resultados obtidos pelo modelo de redes. No entanto, o aumento do número de elementos da rede aumenta o número de equações a resolver simultaneamente, o que pode ser proibitivo do ponto de vista numérico. Deve-se então obter um compromisso entre as capacidades de cálculo e as condições necessárias para a obtenção de resultados significativos. Larson e Morrow (1981) analisaram este problema na análise de curvas de pressão capilar num meio poroso e concluíram que as dimensões da amostra a partir da qual os resultados são significativos são função da distribuição de tamanhos e da geometria do espaço poroso.

Na maior parte dos estudos, a determinação das dimensões da rede que asseguram a validade dos resultados é feita realizando simulações para diferentes dimensões e distribuições de tamanhos dos elementos, até que um comportamento assintótico dos resultados seja obtido (Sahimi *et al.*, 1983; Constantinides e Payatakes, 1989). Como os diferentes modelos de redes bidimensionais e tridimensionais são caracterizados por diferentes estruturas geométricas, tipos de elementos e funções de distribuição das dimensões características destes, não é

possível definir critérios quantitativos que permitam conhecer à partida em que condições os resultados previstos pelo modelo são estatisticamente válidos. De notar que o tipo de algoritmo ou estratégia de determinação dos perfis de velocidade e pressão não interferem no comportamento do modelo de redes.

Além do aspecto anterior, o procedimento de determinação das distribuições de dimensões características dos elementos da rede pode influenciar também os valores obtidos das características de escoamento. Deste modo, devem ser efectuadas não uma mas sim várias simulações, para diferentes conjuntos de parâmetros impostos no gerador de números aleatórios da rede, de modo a assegurar que os resultados representem um valor médio estatisticamente adequado e que estes possuam um valor baixo de variância (Sahimi *et al.*, 1986).

Ng e Payatakes (1985) compararam a performance dos modelos de redes e dos modelos estatísticos (Haring e Greenkorn, 1970) na previsão dos valores de permeabilidade de um meio poroso. Redes tridimensionais com estrutura cúbica, em que os elementos são iguais aos propostos por Neira e Payatakes (1978) foram utilizados. Os resultados previstos pelo modelo de redes são superiores aos do modelo estatístico, quando comparados com dados experimentais. Por outro lado, a descrição do escoamento pelo modelo de redes permite a inclusão directa da estrutura do meio poroso nos resultados da simulação, o que é impossível com modelos estatísticos.

Azzam e Dullien (1976) utilizaram redes tridimensionais com uma estrutura cúbica, em que os elementos possuem constrições em degrau, como se pode observar na Figura 2.2. A distribuição de dimensões características dos elementos da rede foi determinada recorrendo a dados de porosimetria de mercúrio e de análise de cortes bidimensionais do meio poroso. Como o modelo de redes proposto por estes autores pode ser visto como uma combinação de capilares em série e em paralelo, estes autores obtiveram uma expressão analítica para a permeabilidade do meio poroso em função da distribuição de dimensões características dos elementos da rede. Azzam e Dullien (1976) compararam os valores previstos pelo seu modelo com dados experimentais obtidos para o escoamento de gases em meios consolidados, tendo obtido boa concordância.

Usando modelos de redes determinados recorrendo à simulação numérica da formação de leitos de enchimento, Chan e Ng (1989) analisaram a influência dos efeitos de parede no escoamento através de um leito de enchimento. Esta estratégia permite utilizar a estrutura real

do meio poroso, sendo a forma dos elementos determinada directamente da estrutura local. Estes autores assumiram que os elementos possuem uma forma tetraédrica, sendo as suas características determinadas da deposição das partículas e da posição relativa do elemento em relação à parede do leito. Foi assumido que o escoamento nos elementos da rede era laminar, tendo sido usada a teoria da lubrificação para determinar a resistência ao escoamento de cada um dos elementos. A influência das dimensões características do leito de enchimento foi tomada em conta, tendo-se observado que a presença da parede aumenta o valor da permeabilidade.

A mesma estratégia foi usada por Thompson e Fogler (1997), tendo assumido que os elementos têm raio variável segundo uma função hiperbólica, o que permite usar expressões analíticas para caracterizar o escoamento. Os resultados previstos da permeabilidade foram comparados com dados experimentais publicados para leitos de enchimento de esferas, tendo-se obtido boa concordância entre estes. Tal como no trabalho de Chan e Ng (1989), apenas é necessária informação acerca da distribuição das dimensões das partículas que formam o leito de enchimento para caracterizar o modelo de redes e determinar o campo de escoamento através do meio poroso.

Constantinides e Payatakes (1989) estudaram o escoamento num meio poroso usando uma rede tridimensional com elementos cilíndricos com três partes distintas, de modo a simular a existência de espaços vazios com diferentes dimensões características. A estrutura da rede é regular mas foi imposta uma distribuição espacial das ligações entre os canais da rede. As dimensões características das diferentes partes dos elementos estão interrelacionadas entre si. Estes autores analisaram a influência das relações entre as dimensões características dos dois tipos de elementos e as distribuições de tamanhos, tendo determinado como estes influenciavam a permeabilidade da rede.

2.3.5.3 Aplicações dos Modelos de Redes Bidimensionais e Tridimensionais

Modelos de redes bidimensionais e tridimensionais serviram de base à descrição de muitos fenómenos de transporte num meio poroso que dependem fortemente do escoamento através deste. Na Secção 2.4.5 são descritos em detalhe os modelos usados na descrição do transporte de massa através de um meio poroso, cuja modelização é um dos objectivos deste trabalho. Alguns exemplos de aplicação destes tipo de modelos são apresentados se seguida.

A modelização da retenção de partículas num meio poroso, fundamental para descrever o comportamento de certos tipos de filtros, é um dos casos mais estudados na prática (Rege e Fogler, 1987; Imdakm e Sahimi, 1987 e 1991; Hampton *et al.*, 1993). Um dos aspectos mais importantes na descrição deste processo é a deposição das partículas no interior da rede, processo transiente e que modifica as características hidrodinâmicas dos elementos da rede. Para ser possível usar a analogia com um circuito eléctrico, é imposto que as variações nas características locais do escoamento são lentas em relação ao escoamento do fluido, o que permite usar a hipótese de espaço pseudo-estacionário. O campo de escoamento é recalculado periodicamente, dependendo o número de actualizações das características do meio, do escoamento e do processo que se encontra a ser descrito.

Rege e Fogler (1987) usaram redes bidimensionais com canais cilíndricos de raio constante, tendo os nós da rede volume desprezável, para descrever a filtração de uma solução de partículas. A distribuição das dimensões características dos canais é determinada de dados experimentais de porosimetria de mercúrio e de análise de imagem. As partículas deslocam-se ao longo da rede através dos canais com a mesma velocidade do canal em que se encontram. Ao entrar num canal com dimensões características que permitam a sua deposição, a partícula deposita-se e bloqueia o canal, que deixa de estar activo para o escoamento. Os resultados previstos pelo modelo foram comparados com dados experimentais, tendo-se obtido boa concordância, permitindo aos autores concluir que um modelo bidimensional pode descrever o comportamento de um sistema tridimensional, desde que o número de coordenação seja idêntico.

Imdakm e Sahimi (1991) usaram uma estratégia análoga à usada por Rege e Fogler (1987), numa rede tridimensional. A influência da mistura nos nós foi analisada em detalhe, em particular a possibilidade de existirem caminhos preferenciais das partículas ao chegar a um nó. Os valores previstos por este modelo comparam-se favoravelmente com dados experimentais disponíveis. Hampton *et al.* (1993) tomaram em conta a deposição de partículas nos canais sem os bloquear. A influência das características das funções de distribuição foi analisada neste trabalho, tendo estes autores concluído que mesmo para valores de porosidade constantes, a permeabilidade é fortemente dependente destes parâmetros. Verificou-se também que a redução de permeabilidade se deve sobretudo ao bloqueio dos canais, deixando de ocorrer escoamento antes de todos os canais se encontrarem bloqueados.

Sharma e Yortsos (1987a e 1987b) analisaram o problema da filtração de partículas num meio poroso, recorrendo a modelos de redes tridimensionais. Em vez de descrever directamente o

campo de escoamento, estes autores caracterizaram a retenção das partículas no meio através de equações de balanço de população. A influência da distribuição das dimensões características dos elementos da rede e as interligações entre estes são tomadas em consideração explicitamente nas equações de balanço. A influência das características geométricas no comportamento do meio é analisada em detalhe. Os resultados previstos pelo modelo foram comparados com dados experimentais, tendo-se verificado que o modelo proposto era válido para os instantes iniciais de filtração.

Burganos e Payatakes (1995) analisaram a filtração de partículas em meios porosos utilizando modelos de redes tridimensionais, em que os elementos são capilares em que o raio varia segundo uma função sinusoidal. A influência do campo de escoamento no comportamento do filtro é tomada em conta de modo explícito, embora a influência da deposição das partículas não tenha sido tomada em conta. Deste modo, o modelo apenas permite a descrição dos primeiros tempos de deposição das partículas. A influência do sentido do escoamento foi analisada, tendo-se concluído que a eficiência de um filtro a operar em regime descendente é superior, excepto para velocidades baixas, em que o fluxo horizontal é superior. Chang *et al.* (2004 e 2005) e Chan *et al.* (2005) também estudaram a filtração em meios porosos usando canais com constricções. A estrutura da rede é bidimensional e os canais da rede, assim como os parâmetros que os caracterizam foram determinados com base no modelo de Payatakes *et al.* (1973a). Estes autores analisaram os diferentes mecanismos de retenção das partículas e a influência do meio poroso na filtração e na redução da porosidade do meio, tendo concluído que a distribuição inicial das dimensões características dos canais tem um efeito significativo no comportamento previsto pelo modelo de redes.

Uma situação idêntica em que ocorrem alterações locais do comportamento hidrodinâmico dos elementos da rede surge na formação e crescimento de biofilme no interior de um meio poroso. Suchomel *et al.* (1998a, 1998b) utilizaram modelos de redes de capilares bidimensionais e tridimensionais para descrever esta situação tendo tomado em conta os efeitos do transporte de massa através do meio poroso. Assumiu-se que os canais são cilíndricos, de raio constante descrito por uma função de distribuição log-normal, e que o escoamento nos elementos da rede é laminar, o que reduz o problema de descrição do escoamento à resolução de sistemas de equações lineares. É considerado que o crescimento do filme biológico na superfície dos poros é um processo lento quando comparado com o transporte de quantidade de movimento e de massa na rede. Deste modo, apenas é necessário actualizar o campo de escoamento periodicamente. Devido ao crescimento dos filmes

biológicos nos capilares, é possível ocorrer o bloqueio de um poro, o que exige a reconstrução do sistema de equações. Além deste problema, a partir de uma dada percentagem de ocupação dos canais, deixa de haver escoamento devido à ultrapassagem do limiar de percolação, como Hampton *et al.* (1993) tinham observado no caso da filtração de partículas. Stewart e Kim (2004) analisaram também a evolução do crescimento bacteriano e de biofilmes formados em meios porosos usando um modelo de redes bidimensional, tendo analisado a influência deste na variação da resistência ao escoamento de um meio poroso.

O escoamento multifásico através de um meio poroso foi também descrito usando modelos de redes bidimensionais e tridimensionais. Nesta situação, além da interação entre as fases sólida e fluida, a influência entre as duas fases deve ser tomada em conta (Dullien, 1988 e 1998, Blunt *et al.*, 2002). A forma como esta é tomada em conta depende da miscibilidade das fases fluidas presentes no meio. O caso em que as duas são parcialmente miscíveis implica que as propriedades físicas destas são similares, sendo estes casos analisados como um processo de transporte de massa, a descrever na Secção 2.4. Para o caso de fluidos imiscíveis, duas situações podem ser diferenciadas, conforme os valores relativos das densidades das duas fases.

Se os dois fluidos possuírem valores de densidade da mesma ordem de grandeza e formarem fases imiscíveis, o comportamento hidrodinâmico das duas fases é similar. Como exemplo deste tipo de escoamento podem ser referidos o deslocamento de um fluido por outro, comum em recuperação secundária e terciária de petróleo (Payatakes e Dias, 1984). Como os dois fluidos se encontram separados por uma interface, existe uma diferença de pressões entre as duas fases por acção da tensão superficial. O análogo com um circuito eléctrico continua a ser válido, sendo esse termo uma fonte de tensão adicional à diferença de potencial ao nível macroscópico (Dias e Payatakes, 1986a e 1986b; Koplik e Lasseter, 1982 e 1984).

Assumindo que o escoamento é laminar, o sistema de equações que caracteriza o escoamento é linear e possui as mesmas características dos sistemas obtidos para escoamento monofásico. Como a interface se desloca simultaneamente com o fluido, é necessário seguir a sua evolução ao longo deste. Como os termos adicionais de fonte de tensão podem depender das características dos elementos da rede e da posição, a posição das várias interfaces deve ser conhecida em detalhe (Dias e Payatakes, 1986a). A modelização do escoamento é portanto um processo transiente, devendo os coeficientes do sistema de equações ser recalculados sempre que ocorrerem alterações nas interfaces no interior dos elementos da rede ou na distribuição dos fluidos no interior da rede.

A modelização deste tipo de processos foi de facto a primeira aplicação prática de modelos de redes na descrição do escoamento através de um meio poroso. Fatt (1956) utilizou modelos de redes bidimensionais, assumindo que o comprimento dos canais é proporcional ao seu diâmetro. Devido às limitações computacionais existentes na época, apenas os casos limites de distribuições com um único valor foram analisadas, tendo sido implementado um algoritmo de *time marching* para caracterizar a posição relativa das duas fases.

Koplik e Lasseter (1982b e 1984) e Dias e Payatakes (1986a, 1986b) aplicaram a analogia com um circuito eléctrico para descrever o escoamento de duas fases imiscíveis através de um meio poroso. Redes bidimensionais foram utilizadas, tendo Dias e Payatakes (1986a e 1986b) usado canais de raio variável. Para simplificar o seguimento da evolução da posição da interface entre fases, Dias e Payatakes (1986a e 1986b) dividiram os canais em vários segmentos, de tal forma que num incremento de tempo nenhuma interface se desloca mais do que um segmento, qualquer que seja o canal da rede. Nos nós de mistura foram definidas regras para a separação de fases, tomando estas em conta as interfaces e as fases existentes em cada um dos canais associados aos nós da rede. A influência das características das duas fases foi analisada, tendo-se obtido boa comparação com os dados experimentais de Hinkley *et al.* (1987).

Constantinides e Payatakes (1996) utilizaram o modelo de redes tridimensional de Constantinides e Payatakes (1989) para modelizar processos de imbibição e de escoamento bifásico em modo cocorrente de dois fluidos com as mesmas características num meio consolidado. Em ambos os artigos, a estratégia de determinação dos campos de escoamento proposta por Dias e Payatakes (1986a) foi utilizada, tendo sido analisada a influência dos parâmetros geométricos e dos fluidos no comportamento hidrodinâmico do meio poroso.

Outros modelos de redes com canais em que o raio dos canais é variável foram considerados. Ng e Payatakes (1980) usaram redes tridimensionais com os canais formados por uma constrição no centro destes, tendo o comportamento dos elementos com apenas uma fase no seu interior sido obtido desse trabalho. A evolução da distribuição das várias fases foi efectuada através de balanço de população, tendo sido possível relacioná-la com as características geométricas da rede. Lin e Slattery (1982) utilizaram modelos de redes tridimensionais com elementos de raio variável segundo uma função sinusoidal. As dimensões características dos capilares são determinadas de dados experimentais de curvas de retracção de água de um meio poroso, o que permite determinar os parâmetros das funções de distribuição das dimensões características dos elementos. Os resultados previstos pelo modelo

para curvas de pressão capilar em vários tipos de meios porosos, consolidados e não consolidados, encontram-se em concordância com os dados experimentais.

Outros tipos de elementos foram também considerados. Kantzas e Chatzis (1988b) usaram redes tridimensionais com elementos similares a canais de placas paralelas, para determinar a influência das características da rede de elementos nos valores da permeabilidade relativa, parâmetro dependente do comportamento relativo entre as duas fases. A comparação com resultados experimentais permite concluir que informação detalhada sobre a estrutura local do meio poroso é a única forma de permitir a obtenção de concordância quantitativa. Ioannidis e Chatzis (1993) usaram elementos rectangulares para simular as curvas de retenção e imbibição de um meio poroso, tendo tomado em conta a existência de mais do que um tipo de elementos na rede. Goode e Ramakrishnan (1993) utilizaram canais com a forma do espaço vazio contido entre quatro círculos de igual diâmetro tangentes entre si e dispostos de modo a formar um quadrado. A presença de um filme na parede dos canais é tomada em conta explicitamente na simulação do escoamento das fases no interior dos elementos da rede. Os resultados obtidos por simulação sugerem que o escoamento é fortemente dependente da saturação de cada uma das fases e da razão entre as viscosidades dos dois fluidos, tendo estes autores proposto correcções à equação de Darcy nestas condições.

Blunt *et al.* (1992) utilizaram modelos de redes tridimensionais regulares de geometria cúbica possuindo canais cilíndricos e câmaras esféricas para descrever o escoamento bifásico num meio poroso. Um algoritmo de percolação, em que a pressão imposta na rede é aumentada de modo a provocar a entrada de uma fase no meio poroso, foi utilizado. A possibilidade de retenção da fase deslocada é tomada em conta, sendo analisada a influência dos vários mecanismos de deslocamento na distribuição final dos fluidos no meio poroso e nos valores da permeabilidade. Blunt e King (1990) analisaram também o escoamento bifásico em modelos de redes irregulares, tendo mostrado que a interface entre as duas fases poderia ser descrita por um fractal. Os resultados previstos permitem concluir que os valores de permeabilidade relativa dependem do perfil de saturação e das condições de escoamento no meio poroso.

Hashemi *et al.* (1999) analisaram a situação em que dois fluidos imiscíveis fluem simultaneamente através de um meio poroso recorrendo a redes bidimensionais e tridimensionais formadas por dois tipos de elementos. Cada tipo de elementos possui a sua distribuição de dimensões característicos. Os resultados obtidos por simulação mostram que a distribuição dos fluidos na rede é função do tempo e da forma como os fluidos entram na

rede, possuindo características periódicas. Estes autores atribuíram este comportamento à quebra e coalescência dinâmica entre gotas dos dois fluidos.

A análise do escoamento usando um algoritmo similar ao usado por Blunt *et al.* (1992) é típica da situação em que um fluido entra num meio poroso. Uma situação típica ocorre em experiências de porosimetria de mercúrio. O procedimento experimental e a simulação do processo são equivalentes pois ambos se baseiam em incrementos sucessivos da pressão. A partir da variação da quantidade de mercúrio que entrou em função da pressão, é possível caracterizar a DTP associada ao meio poroso.

A análise dos dados experimentais é efectuada quase sempre recorrendo-se a um modelo de redes unidimensional. No entanto, estes modelos não prevêem a ocorrência normal de algum mercúrio ficar retido na amostra numa experiência de retracção de mercúrio (Androutsopoulos e Mann, 1979; Mann e Golshan, 1981; Mann *et al.*, 1986; Mata, 1998). A retenção de mercúrio deve-se à diferente acessibilidade da estrutura do meio poroso, que pode originar a formação de zonas das quais o mercúrio não é capaz de sair por redução da pressão. Um modelo de capilares paralelos não é capaz de prever este comportamento da curva de retracção, apesar de em muitos casos ser capaz de prever correctamente as curvas de penetração. Androutsopoulos e Mann (1979), Mann e Golshan (1981) e Mann *et al.* (1986) utilizaram redes em que os nós possuem volume desprezável. Tsakiroglou e Payatakes (1990) consideraram o caso em que as câmaras possuem um volume não nulo. Mata (1998) desenvolveu um algoritmo que permite ajustar os parâmetros da DTP aos dados experimentais de porosimetria de mercúrio, recorrendo a análise de imagens para complementar a informação obtida por este método. Knackstedt *et al.* (2001) analisaram os efeitos das correlações existentes entre os diferentes elementos da rede para porosimetria de mercúrio, tendo testado diferentes tipos de correlações. Os resultados mostram, quando comparados com dados experimentais, que existem correlações locais na estrutura de um meio poroso real, podendo estas estender-se mais do que as dimensões características de um poro. Estes autores concluem que apenas a inclusão directa destas correlações locais é que permite a simulação adequada do comportamento de um meio poroso.

Outra situação distinta ocorre no escoamento de dois fluidos imiscíveis mas com valores de densidade muito diferentes entre si, pelo menos duas ordens de magnitude, como por exemplo na simulação do escoamento gás-líquido através de um leito de enchimento. Santos *et al.* (1991) apresentam uma revisão das aplicações e do comportamento do escoamento gás-líquido em meios porosos, com especial relevo para leitos de enchimentos, aqueles mais

utilizados na prática. Chu e Ng (1989b) utilizam um modelo de redes tridimensional com uma geometria cúbica e número de coordenação constante e igual a seis, possuindo as câmaras volume desprezável, na modelização do escoamento bifásico cocorrente descendente de gás e líquido. Estes autores admitem que o escoamento bifásico nos poros apenas pode ocorrer segundo dois regimes de escoamento: regime anular para caudais baixos e regime segregado para caudais elevados. Escrevendo as equações de balanço material nos nós e de quantidade de movimento nos canais para ambas as fases, foi determinado o comportamento hidrodinâmico do meio poroso. Concordância qualitativa com os dados experimentais foi obtida por estes autores, tendo os desvios sido atribuídos pelos autores às reduzidas dimensões das redes utilizadas nas simulações.

Melli e Scriven (1991) utilizaram um modelo de redes bidimensional, com dois tipos de elementos, na análise do comportamento hidrodinâmico de um meio poroso para escoamento cocorrente bifásico de gás e líquido. Os canais são cilíndricos com raio variável, possuindo as câmaras um volume não nulo associado a elas. Nesta situação, para além das equações de balanço material e de quantidade de movimento para os elementos da rede, é necessário definir regras que relacionam os regimes de escoamento possíveis nos elementos da rede associados entre si. Estes critérios foram determinados recorrendo a informações experimentais (Melli *et al.*, 1990). Os resultados das simulações permitem a descrição qualitativa dos vários regimes de escoamento, em particular os fenómenos de histerese da queda de pressão observados para regime gotejante e o comportamento oscilatório observado em regime pulsante. Devido às reduzidas dimensões das redes usadas, apenas resultados qualitativos podem ser extraídos do trabalho de Melli e Scriven (1991). Stark e Manga (2000) analisaram também o escoamento de bolhas através de uma rede bidimensional quadrada com $C=4$, em que os nós possuem volume desprezável. O escoamento através dos poros é modelizado assumindo-se escoamento unifásico em todos os poros da rede, corrigindo-se a diferença de pressão entre a diferença de potencial entre os extremos dos poros através de um termo correctivo, função das características das bolhas e dos dois fluidos. A analogia com um circuito eléctrico é usada por estes autores para caracterizarem o comportamento do meio. O sistema de equações é não-linear devido aos termos de correcção, tendo sido resolvido por um método de iteração de ponto fixo. Para baixos valores de saturação do gás, os resultados mostram que o escoamento do gás se dá por um número reduzido de canais, aumentando a interacção entre as bolhas com o aumento da saturação de gás.

Laurindo e Prat (1998) usaram modelos de redes bidimensionais com canais cilíndricos para descrever a evaporação de uma fase fluida a partir de um meio poroso. Assumiu-se inicialmente que os elementos da rede se encontram saturados, ocorrendo o transporte de massa para o exterior apenas por difusão. Como a evaporação se dá na interface entre o vapor e o líquido, vai-se formar uma interface entre as duas fases que progride para o interior do meio poroso, ao longo do processo de evaporação. A evolução da frente de evaporação prevista pelo modelo de redes foi comparada com dados experimentais, tendo-se obtido boa concordância para o caso em que a evaporação é controlada pelas forças capilares. Le Bray e Prat (1999) estenderam a análise de Laurindo e Prat (1998) para modelos de redes tridimensionais com uma geometria cúbica, em que a distribuição de diâmetros dos capilares é descrita por uma função densidade de probabilidade uniforme. Do mesmo modo, a evolução da interface entre as fases líquida e de vapor foi determinada neste estudo, tendo sido possível mostrar que a interface entre as duas fases possui características fractais. Os resultados previstos pelo modelo estão de acordo com resultados experimentais respeitantes à distribuição das fases num meio poroso e os regimes de secagem de uma amostra porosa observados experimentalmente. Plourde e Prat (2003) estenderam o modelo anterior à situação em que o comportamento da fase sólida deve ser tomado em conta. Dois modelos de redes distintos foram considerados para descrever o escoamento e o transporte de calor no meio poroso. Os resultados mostram que dependendo das características das duas fases diferentes situações podem ocorrer, tendo os autores desenvolvido um diagrama para prever o comportamento do meio em situações de secagem.

Figus *et al.* (1999) compararam as previsões de um modelo de redes bidimensional de canais cilíndricos e um modelo baseado na definição de *continuum* na previsão da evaporação de um líquido sujeito a aquecimento. Os resultados previstos por ambos os modelos são idênticos desde que todos os canais da rede possuam o mesmo valor de diâmetro. A inclusão de uma distribuição de dimensões características dos elementos da rede origina a formação de frentes de evaporação irregulares, impossíveis de ser reproduzidas pelo modelo baseado na definição de *continuum*, mas observadas experimentalmente. Li e Yortsos (1995a e 1995b) e Satik e Yortsos (1996) analisaram o crescimento de bolhas de vapor no interior de um meio poroso saturado. A influência da estrutura do meio poroso, das condições em que as bolhas se formam e como elas se distribuem no interior do meio são analisadas em detalhe. Estes autores verificaram que a formação de uma fase de vapor no interior do meio poroso poderia ser descrita através de um processo de percolação.

Yiotis *et al.* (2001, 2005) analisaram o processo de secagem de meios porosos saturados por um fluido puro numa rede bidimensional de geometria quadrada com $C = 4$ e constituída por dois tipos de elementos. O escoamento das duas fases através do meio poroso, os efeitos capilares, e a transferência de massa nas duas fases e entre as duas fases são tomadas em consideração na modelização do processo de secagem. A evolução dos perfis de saturação do meio poroso em função dos parâmetros físicos e geométricos da rede foi estudada em detalhe, tendo sido possível definir diferentes regimes de secagem. Segura e Toledo (2005) analisaram também os processos de secagem em condições isotérmicas em redes bidimensionais e tridimensionais para condições em que as forças capilares e viscosas são dominantes, tendo estes autores investigado a influência das características da rede e dos seus elementos no comportamento de secagem previsto e nos valores dos parâmetros de transporte.

2.4 Transporte de Massa em Meios Porosos

O transporte de massa através de um meio poroso é um processo dependente das características do campo de escoamento e da estrutura porosa deste, assim como das várias fases presentes. Deste modo, uma descrição adequada do escoamento num meio poroso é uma condição essencial para ser possível descrever o transporte de um soluto no interior da estrutura deste. Nas secções seguintes, serão descritos vários modelos propostos para a modelização do transporte de massa através de um meio poroso. Atenção especial será dada aos modelos em que a estrutura do meio poroso e as características do escoamento são tomadas em conta de modo explícito.

2.4.1 Descrição Geral

A modelização do transporte de massa através de um meio poroso é feita mais facilmente analisando como é que uma fase fluida desloca outra fase fluida, sendo as duas fases miscíveis. Na zona em que ocorre a mudança de fases, forma-se uma zona interfacial em que as propriedades da fase fluida variam de forma contínua. Deste modo, na modelização do escoamento deixa de ser necessário tomar em conta as forças interfaciais.

Conforme as propriedades das duas fases, é usual considerar na literatura duas situações distintas (Sahimi, 1995). Quando as duas fases não são idênticas, além da transferência de massa na zona interfacial, é necessário tomar em conta os efeitos dos diferentes valores da densidade e da viscosidade entre as duas fases. É comum designar este tipo de processos por deslocamento miscível (Sahimi, 1995). Quando as propriedades físicas das duas fases são

idênticas, deixa de ser necessário assumir a existência de duas fases na modelização do escoamento. As duas fases são diferenciadas por propriedades não directamente relacionadas com o campo de escoamento. Quase sempre é usada a distribuição desigual de um soluto entre as duas fases, devendo a concentração deste ser facilmente detectável (Nigam e Saxena, 1986). Processos deste tipo são normalmente designados por dispersão hidrodinâmica.

Por exemplo, consideremos um meio poroso saturado através do qual se escoar água pura, sendo esta subitamente substituída por uma solução salina com uma concentração C_0 . Apesar de ser impossível distinguir as duas fases por observação visual, a sua concentração pode ser determinada facilmente por condutimetria. Na Figura 2.11 são apresentados os perfis de concentração ao longo do meio poroso, em função do tempo. Observa-se que a zona interfacial se alarga ao longo do meio poroso, devido à mistura e à transferência de massa entre as duas fases. Estas características são típicas dos processos de dispersão hidrodinâmica. A evolução das zonas de transição ao longo do meio poroso depende das características do meio, em particular das características geométricas locais e do escoamento.

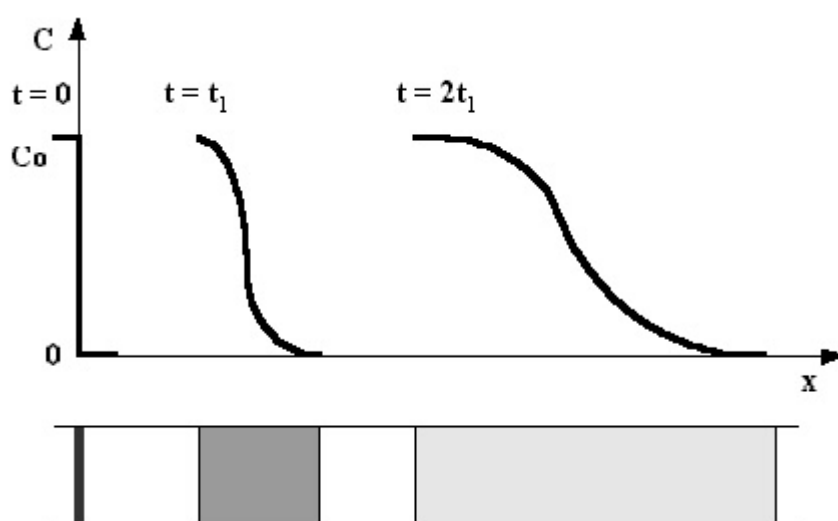


Figura 2.11 Evolução da zona de transição ao longo do meio poroso com o tempo (Fried e Combarnous, 1971).

Experiências em que as características do escoamento através de um meio poroso são determinadas a partir da resposta deste a uma perturbação imposta no escoamento são designadas por experiências de *tracer* (Nauman e Buflam, 1982). Experiências deste tipo permitem caracterizar o comportamento de unidades processuais e determinar formas de melhorar o seu desempenho.

Field (2002a, 2002b e 2003) analisou a metodologia subjacente às experiências de traçador em diferentes situações práticas, apresentando sugestões sobre a forma mais adequada de as realizar e tratar os dados obtidos. Mais informações sobre metodologias para a realização de testes de traçador podem ser encontrados em Levenspiel e Bischoff (1972) e Wen e Fan (1975). Coronado *et al.* (2004) analisaram a aplicabilidade de soluções analíticas e semi-analíticas para diferentes tipos de perturbações de traçador, com o objectivo de determinar as condições em que estes são válidos. As conclusões destes autores mostram que na análise dos dados experimentais as condições fronteira a usar no modelo devem ser o mais próximo possível da realidade.

2.4.2 Mecanismos de Transporte de Massa em Meios Porosos

2.4.2.1 Descrição geral

A dispersão hidrodinâmica está directamente ligada à forma como as partículas de fluido, e em particular de soluto, se deslocam no interior do meio poroso. Por sua vez, este movimento depende das características do campo de escoamento e da estrutura porosa. Além do transporte de massa convectivo, também ocorre o transporte de massa entre zonas em que a concentração de soluto é diferente, por difusão molecular. Este processo é particularmente importante na zona interfacial. Estes dois processos de transporte de massa ocorrem simultaneamente no interior de um meio poroso, dependendo a importância relativa de cada um deles sobretudo das características do escoamento. Por exemplo, para o caso particular de escoamento num tubo cilíndrico, três regimes possíveis podem ser definidos para a dispersão no transporte de massa, em função das condições de escoamento de um fluido através de um tubo (Wen e Fan, 1975).

- Se a velocidade do fluido for elevada, o transporte de massa por convecção é dominante, sendo o perfil de concentrações do soluto função do perfil de velocidades no tubo. Este regime de dispersão hidrodinâmica pode ser designado também por escoamento totalmente segregado.
- Para velocidades moderadas, ambos os mecanismos de transporte de massa devem ser considerados simultaneamente. Este caso foi analisado inicialmente por Taylor (1953), sendo estudado em detalhe na Secção 2.4.3.1.

- Para velocidades baixas, o transporte de massa por difusão é dominante, não dependendo o perfil de concentrações do campo de escoamento do fluido.

Ao nível local, assumindo que não ocorre reacção química a equação de balanço material que descreve o transporte de massa por difusão e convecção é dada por

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla(vC) = \nabla(D_M \nabla C) \quad (2.84)$$

em que D_M é a difusividade molecular do soluto no solvente, que pode ser função da coordenada espacial para meios anisotrópicos, C representa o perfil de concentração de soluto no fluido. O termo $\nabla(vC)$ representa o transporte de massa por convecção e o termo $\nabla(D_M \nabla C)$ representa o transporte de massa por difusão, assumindo que os dois termos são aditivos. O coeficiente D_M é um tensor de segunda ordem como a permeabilidade, mas, admite-se quase sempre que é constante, o que permite simplificar a expressão para a forma

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla vC = D_M \nabla^2 C \quad (2.85)$$

Mesmo com esta simplificação, a determinação analítica do perfil de concentração no tempo e no espaço é impossível em praticamente todas as situações, devido à dificuldade em determinar o campo de escoamento e a posição da interface entre as fases sólida e fluida.

Para meios isotrópicos, é possível admitir que as condições locais são uniformes no interior do meio poroso e que a distribuição de velocidades pode ser substituída por um valor médio, v . Nesta situação, a difusividade molecular do soluto no fluido é substituída por um coeficiente de difusividade efectiva, D_{eff} , que representa os efeitos da estrutura porosa e do campo de escoamento no transporte de massa através do meio poroso. Desta forma, a Equação 2.85 pode ser escrita na forma

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \nabla C = D_{eff} \nabla^2 C \quad (2.86)$$

Na prática, o coeficiente D_{eff} é desdobrado em dois termos: o coeficiente de dispersão axial, D_L , e o coeficiente de dispersão radial, D_T , associados respectivamente ao transporte de massa na direcção principal e normal ao sentido principal de escoamento. A Equação 2.86 pode ser escrita então na forma

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \nabla C = D_L \nabla^2 C + D_T \nabla^2_r C \quad (2.87)$$

Uma nomenclatura alternativa para estes dois parâmetros é utilizada frequentemente, baseada na analogia com o escoamento num tubo cilíndrico. Deste modo, D_L é designado por coeficiente de dispersão axial, D_{ax} , representando o transporte de massa segundo o eixo do tubo, e D_T é designado por coeficiente de dispersão radial, D_R (Froment e Bischoff, 1990).

A Equação 2.87 baseia-se na hipótese de que o processo de dispersão pode ser descrito de um modo semelhante ao processo difusivo, sendo a influência do perfil de velocidades através do meio incluída no modelo através do termo convectivo e dos coeficientes de difusividade efectiva D_L e D_T (Sahimi, 1995). Alguns autores (Sundaresan *et al.*, 1980; Westerterp *et al.*, 1995a, 1995b e 1996) puseram em questão as bases teóricas de aplicação deste modelo a meios homogêneos, sendo os trabalhos destes e outros autores apresentados nas secções seguintes.

No entanto, a Equação 2.85 permite concluir que a influência do escoamento apenas se faz sentir no transporte convectivo de massa, podendo ser definidos dois mecanismos distintos (Sahimi, 1995).

- O primeiro mecanismo é de natureza cinemática. Devido à estrutura heterogénea de um meio poroso, as linhas de corrente misturam-se e separam-se sucessivamente, devido à existência de um perfil de velocidades no interior do meio poroso. O perfil de concentrações ao longo do meio poroso vai-se modificando ao longo deste, dependendo a influência destes processos do tipo de estruturas e da interconectividade do meio poroso.
- O segundo mecanismo é de natureza dinâmica. Devido ao perfil de velocidades existente ao nível local num meio poroso, as moléculas de *tracer* em diferentes linhas de corrente atravessam o meio poroso em tempos diferentes, originando a dispersão do perfil de concentrações. Se perturbações pontuais forem impostas no meio, este mecanismo provocará o alargamento da perturbação.

Na Figura 2.12 é apresentado um exemplo em que é possível observar os dois tipos de mecanismos para o transporte de massa por convecção descritos (Fried e Combarnous, 1971). É possível observar que devido à presença das partículas do meio poroso, as linhas de fluxo são naturalmente curvas, e que vai ocorrer mistura de fluido no interior do meio. A forma

como se dão estes processos depende da estrutura do meio, podendo meios porosos possuir o mesmo valor de permeabilidade (mesmo comportamento hidrodinâmico macroscópico) mas terem comportamentos completamente distintos no transporte de massa (Bacri *et al.*, 1987). De igual modo, a evolução da estrutura local do meio poroso também deve ser tomada em conta (Rodier *et al.*, 1997).

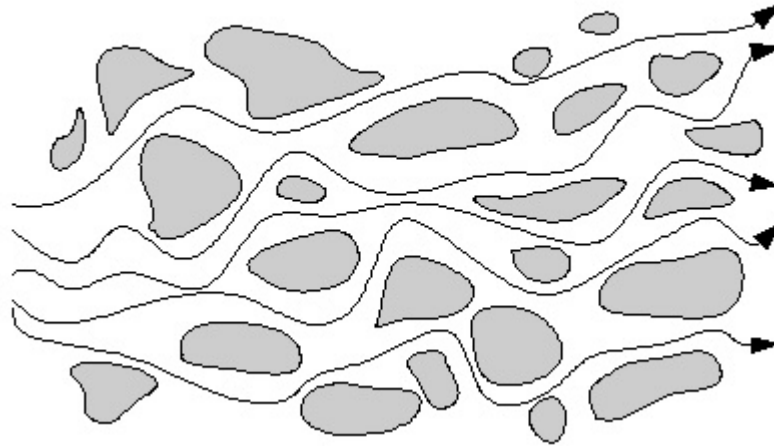


Figura 2.12 Diferentes mecanismos de dispersão de partículas de tracer (Fried e Combarous, 1971).

Apesar do transporte de massa por convecção ser dominante na maior parte das situações práticas, na modelização do transporte de massa é necessário tomar em conta a difusão. Devido à condição de não deslizamento do fluido na interface entre sólido e fluido, o *tracer* nestas zonas vai-se deslocar mais lentamente. Gradientes de concentração vão ocorrer entre o centro e as paredes dos capilares, originando difusão de *tracer* entres estas. Este processo é equivalente ao salto das partículas de *tracer* entre linhas de corrente no campo de escoamento.

Quando os processos de transporte de massa podem ser considerados lineares, a resposta a uma perturbação de concentração pode ser determinada pela expressão

$$C_s(t) = \int_0^{\infty} C_E(t-t^*) f(t^*) dt^* \quad (2.88)$$

em que $C_E(t)$ representa a concentração de entrada no meio poroso, $C_s(t)$ a concentração observada à saída do meio poroso, t^* é a variável de integração e a função $f(t^*)$ representa a forma como o meio modificou a perturbação inicial. O integral da equação anterior é equivalente ao produto de convolução, pelo que, aplicando transformadas de Laplace, a seguinte expressão é obtida

$$\bar{C}_s(s) = \bar{C}_E(s)G(s) \quad (2.89)$$

em que $G(s)$ representa a função de transferência do sistema. Para uma perturbação impulsional, $C_E(t) = \delta(t)$, é possível mostrar que a $G(s)$ é igual à transformada de Laplace da distribuição de tempos de residência, $E(t)$. Aplicando o teorema de Van der Laan (Wen e Fan, 1975), os momentos centrados na origem, μ_n , podem ser calculados a partir da seguinte expressão

$$\mu_n = (-1)^n \left(\frac{\partial^n G(s)}{\partial s^n} \right)_{|s=0} \quad (2.90)$$

De acordo com a expressão anterior, o primeiro momento representa o tempo médio de passagem das partículas de *tracer* no reactor, τ , sendo possível mostrar que na maior parte dos sistemas é igual à razão entre o volume do sistema e a velocidade do fluido neste, mais um termo correctivo. Os restantes momentos estatísticos caracterizam a influência do meio poroso no transporte de massa. Estratégias para a determinação da $E(t)$, determinação e análise dos seus momentos são apresentados em Levenspiel e Bischoff (1972).

2.4.2.2 Regimes de Dispersão Hidrodinâmica em Meios Porosos

A análise dos resultados experimentais obtidos em meios porosos permite definir cinco regimes distintos, como se apresenta na Figura 2.13.

A partir de uma análise dimensional do problema (Sahimi, 1995), é conveniente representar os resultados experimentais de D_L/D_m em função do número de Peclet, Pe_p , baseado no diâmetro da partícula, definido pela expressão

$$Pe_p = \frac{D_p v_T}{D_M} \quad (2.91)$$

Este número adimensional representa a importância relativa dos transportes de massa por convecção e por difusão. Da mesma forma que se observa para o escoamento de um fluido num meio poroso, as transições entre os vários regimes de escoamento são suaves e dependem das características do meio poroso.

$Pe_p < 0.3$

Regime difusional; a razão entre difusividades D_L/D_M tende para um valor constante menor que 1, sendo iguais os valores dos coeficientes de dispersão longitudinal e transversal. A seguinte expressão para D_L/D_M é válida neste regime

$$\frac{D_L}{D_T} = \frac{1}{F_F \varepsilon} \quad (2.92)$$

em que F_F representa o factor de formação. O valor da razão tende para um valor menor que 1 devido à influência da estrutura sólida no transporte de massa, que limita a difusão ao espaço vazio da estrutura porosa do meio poroso.

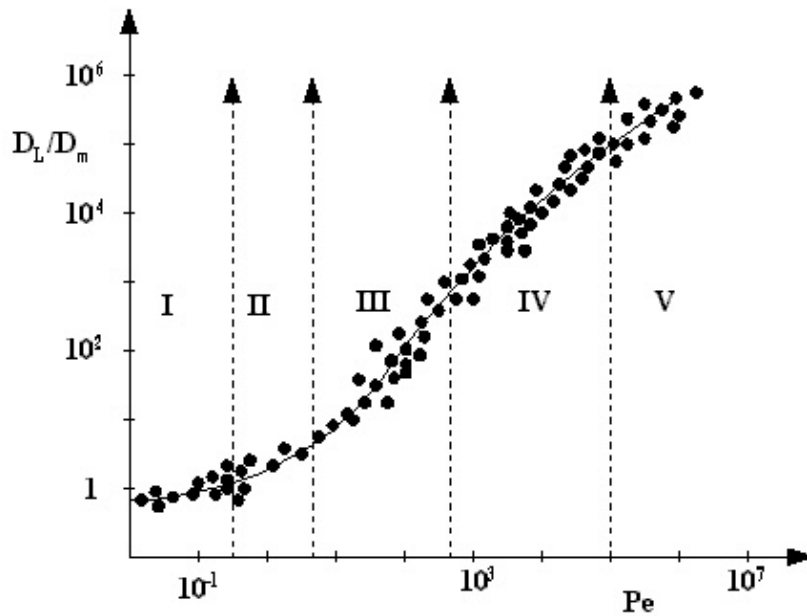


Figura 2.13 Regimes de dispersão em função do número de Peclet (Sahimi, 1995).

$0.3 < Pe_p < 5$

Regime de transição em que a difusão e a convecção são igualmente importantes. O valor de D_L/D_M aumenta mas não é possível definir nenhuma expressão para a sua variação.

$5 < Pe_p < 300$

Regime da lei de potência; o transporte de massa no meio é dominado pela convecção, sendo os efeitos da difusão ainda significativos. O valor da razão D_L/D_M pode ser descrito por expressões do tipo

$$\frac{D_L}{D_M} = \frac{1}{F_F \varepsilon} + \alpha_L Pe_p^{\beta_L} \quad (2.93)$$

$$\frac{D_T}{D_M} = \frac{1}{F_F \varepsilon} + \alpha_T Pe_p^{\beta_T} \quad (2.94)$$

em que α_L , α_T , β_L e β_T representam constantes a determinar de dados experimentais. Para β_L e β_T os valores médios obtidos são de 1.2 e 0.9 respectivamente, enquanto que para as constantes α_L e α_T são obtidos valores de aproximadamente 0.5 e 0.01 respectivamente. Comparando os valores das constantes α_L e α_T pode-se concluir que para valores elevados de Pe_p a dispersão transversal é pouco significativa quando comparada com a dispersão longitudinal de massa. Este regime é designado por dispersão de camada-limite (Koch e Brady, 1985; Saffman, 1959a), pois é consistente com a existência de uma camada limite junto da superfície sólida em que a velocidade do fluido é praticamente nula, em que o transporte de massa é efectuado apenas por difusão molecular.

$300 < Pe_p < 10^5$ Regime de convecção pura. A partir das Equações 2.93 e 2.94 observa-se que ambas as razões de difusividades são proporcionais ao número de Peclet. Neste caso, a dispersão resulta apenas das variações do campo de escoamento induzidas pela estrutura irregular do meio, sendo difícil definir uma função de Pe_p .

$Pe_p > 10^5$ Regime de difusão turbulenta, em que o número de Reynolds baseado no diâmetro médio das partículas tem influência na dispersão. Como escoamento completamente turbulento é de ocorrência rara em leitos de enchimento (Bear, 1972), este regime de transporte de massa não é muito observado na prática.

Alguns autores definem um sexto regime de dispersão, designado por *Holdup Dispersion* (Koch e Brady, 1985), analisado inicialmente por Aris (1959a). Este regime encontra-se associado aos poros da estrutura porosa sem saída ou em que a velocidade do fluido é muito baixa, nos quais o transporte de massa apenas se dá por difusão. A análise deste regime de escoamento depende da estrutura do meio poroso, sendo de análise complexa.

2.4.3 Modelos de Descrição da Dispersão num Tubo

Os modelos mais simples para a estrutura de um meio poroso consistem em modelos de redes unidimensionais, em que os elementos da rede não se intersectam entre si. A análise do transporte de massa numa estrutura deste tipo é equivalente à modelização do transporte de massa num tubo isolado, sendo esta considerada de seguida. Duas estratégias principais foram consideradas, em função dos mecanismos de transporte assumidos como dominantes.

- Apenas o transporte de massa por convecção é tomado em consideração. Nesta situação, o perfil de concentrações vai depender apenas do perfil de velocidades no tubo, visto que as partículas se deslocam nas linhas de fluxo definidas pelo escoamento do fluido. Devido à diferença de velocidade existente entre as várias linhas de corrente, o perfil de concentrações vai-se tornar cada vez mais pronunciado. Modelos baseados nestas hipóteses são inválidos se o escoamento for turbulento ou exista a formação de zonas de recirculação no escoamento, situações em que ocorre mistura de fluido e as partículas podem mudar de linhas de fluxo.
- O transporte de massa é efectuado por convecção e por difusão. Desta forma, as partículas do fluido podem-se deslocar entre as várias linhas de fluxo e o perfil de concentrações vai variar ao longo do tempo, tendendo a uniformizar-se por influência do transporte de massa por difusão no sentido normal ao do escoamento.

Na Figura 2.14 são apresentados e comparados os perfis de concentração de *tracer* em função do tempo e da coordenada axial a uma perturbação instantânea aplicada em toda a secção recta do tubo cilíndrico, para os dois tipos de modelos descritos anteriormente. Na Figura 2.14b é apresentado o comportamento se apenas o transporte de massa por convecção for significativo e na Figura 2.14c para o caso em que tanto a convecção como a difusão são significativas. O último caso, considerado mais realista, é descrito em detalhe a seguir.

2.4.3.1 Modelo de Taylor-Aris

Se apenas for tomado em consideração o transporte de massa por convecção, devido à condição de não deslizamento do fluido na parede do tubo, vão existir partículas de fluido que não vão sair do tubo. Apesar de se observar experimentalmente a existência de caudas na $E(t)$ (Korenaga *et al.*, 1989), estas normalmente não são muito pronunciadas. Este facto é devido ao facto das partículas se poderem deslocar para linhas de fluxo mais rápidas por difusão molecular. Este transporte de massa dá-se no sentido normal ao do escoamento,

uniformizando o perfil de concentrações. Dependendo das condições de escoamento, este processo de uniformização pode ser provocado também por zonas de recirculação ou mistura turbulenta (Taylor, 1954a).

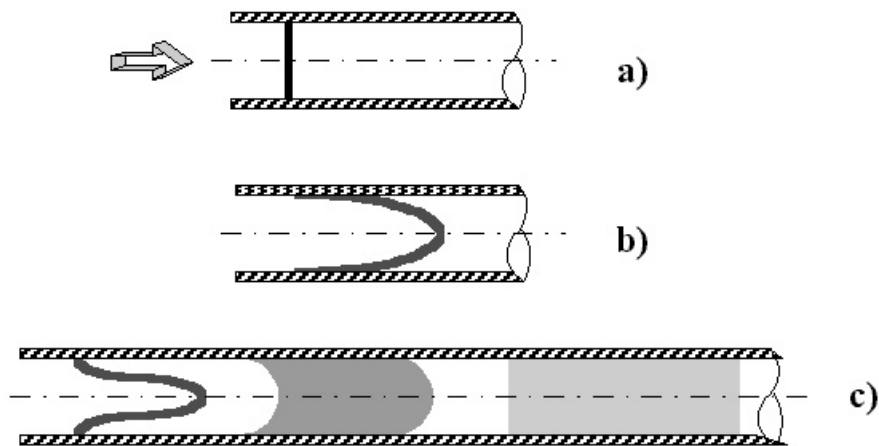


Figura 2.14 Evolução do perfil de concentrações num capilar em regime laminar; a) perturbação inicial b) sem difusão molecular; c) com difusão molecular (Kaviany, 1995).

Para o caso em que o transporte de massa se dá por difusão e convecção e o escoamento é laminar, é possível definir quatro períodos distintos para a evolução temporal do perfil de concentrações no interior do tubo cilíndrico (Nunge e Gill, 1969).

- Após a imposição da perturbação, vai ocorrer difusão molecular no sentido longitudinal, devido à diferença de concentrações entre *tracer* e fluido. Este período é de curta duração e é usual desprezá-lo na modelização do transporte de massa.
- No período seguinte, o transporte de massa por convecção é dominante e o perfil de concentrações é parabólico, como o perfil de velocidade no tubo. Esta situação pode ser observada na Figura 2.14b.
- A formação de um perfil de concentrações parabólico origina a formação de gradientes de concentração na direcção radial do escoamento. Após o estabelecimento do perfil parabólico de concentrações, o *tracer* vai-se difundir no sentido normal ao escoamento.
- A acção da difusão radial tende a uniformizar o perfil radial de concentrações. Para tempos suficientemente longos, que dependem das características do escoamento e do fluido, vai-se estabelecer uma situação de equilíbrio. Nesta situação, o movimento do *tracer* no capilar é semelhante ao escoamento pistão, apesar de realmente existir um perfil parabólico de velocidades no escoamento.

Na Figura 2.14c são apresentados os perfis de concentração para os três últimos períodos. Taylor (1953, 1954a) e Aris (1956) foram os primeiros autores a considerar o transporte de massa por convecção e difusão num tubo cilíndrico. De modo a ser possível a obtenção de uma solução analítica, ambos os autores admitiram que o escoamento era laminar e o que o tubo era cilíndrico. Assumindo que não ocorre reacção química, a seguinte equação de balanço material pode ser escrita (Taylor, 1953)

$$\frac{\partial C}{\partial t} + 2v \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \frac{\partial c}{\partial x} = D_M \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} \right) \quad (2.95)$$

em que v é a velocidade média através do tubo cilíndrico. Na forma apresentada, a resolução da equação diferencial é muito complexa, tendo Taylor imposto duas condições para simplificar a sua análise (Fried e Combarous, 1971):

- o transporte de massa por difusão longitudinal, ou seja, no sentido de escoamento do fluido, é desprezável em relação ao transporte de massa por convecção;
- o tempo necessário para ocorrerem modificações apreciáveis no perfil de concentrações devido ao transporte convectivo de massa é longo quando comparado com o tempo necessário para reduzir as diferenças de concentração radial por transporte difusivo.

De acordo com a primeira condição, o termo de transferência de massa por difusão longitudinal é desprezável relativamente ao termo correspondente mas radial,

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \ll \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \quad (2.96)$$

o que permite simplificar a Equação 2.95 na forma

$$\frac{\partial C}{\partial t} + 2v \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \frac{\partial c}{\partial x} = D_M \left(\frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} \right) \quad (2.97)$$

Definindo uma concentração média

$$C_m = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^R C(x, r) r dr d\theta}{\int_0^{2\pi} \int_0^R r dr d\theta} = \frac{2}{R^2} \int_0^R C(x, r) r dr \quad (2.98)$$

e aplicando a mudança de variável $x_m = x - ut$, equivalente a mudar o sistema de coordenadas fixo para um não fixo que se desloca à velocidade média do fluido, Taylor (1954b) mostrou que, desde que a seguinte condição seja verificada

$$\frac{L_X}{v} \gg \frac{R^2}{14.44 D_M} \quad (2.99)$$

a equação de balanço material reduz-se à segunda lei de Fick em que a constante de proporcionalidade é dada pelo coeficiente de dispersão axial

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C_m}{\partial x_{m1}^2} \quad (2.100)$$

sendo D_L definido pela expressão

$$D_L = \frac{R^2 v^2}{48 D_M} \quad (2.101)$$

Aris (1956) corrigiu a expressão anterior deduzida por Taylor (1953) incluindo os efeitos da difusão molecular, resultando na seguinte expressão

$$D_L = D_M + \frac{R^2 v^2}{48 v} \quad (2.102)$$

A Equação 2.102 pode ser adimensionalizada, resultando na expressão

$$\frac{D_L}{D_M} = 1 + \frac{1}{48} Pe^2 \quad (2.103)$$

sendo aqui Pe definido em função do raio do capilar. Os resultados experimentais de Bailley e Gogarty (1962) e Korenaga *et al.* (1989) confirmam a validade da análise efectuada. Na situação em que o perfil de concentrações ainda não se estabeleceu completamente, pode ocorrer a formação de mais do que um pico na resposta, devido à influência da difusão radial de massa. Estes resultados foram confirmados teoricamente por Vrentas e Vrentas (2000).

Aris (1956) estendeu a análise a capilares de forma elíptica ou do tipo placas paralelas, tendo obtido a seguinte expressão geral,

$$D_L = D_m + \delta_s \frac{l_s^2 v^2}{D_M} \quad (2.104)$$

em que l_s representa a dimensão característica do tubo e δ_s representa um factor de forma dependente da geometria do tubo. Por exemplo, para tubos de secção elíptica, a seguinte expressão para δ_s foi obtida

$$\delta_s = \frac{1}{48} \frac{24 - 24e^2 + 5e^4}{24 - 12e^2} \quad (2.105)$$

em que e representa a excentricidade da elipse, definida a partir dos comprimentos dos semi-eixos principais a_e e b_e da elipse pela relação $e = \sqrt{1 - (b_e/a_e)^2}$. Para um tubo constituído por duas placas paralelas, $l_s = h_p$ e $\delta_s = 2/105$, sendo h_p metade da distância entre as duas placas do tubo. Em qualquer dos tipos de tubos estudados, observa-se sempre a dependência de Pe^2 dos valores de D_L . Para tubos possuindo geometrias distintas das apresentadas Nigam e Saxena (1986) apresentam expressões obtidas por este modelo para outras formas geométricas.

Guell *et al.* (1987) propuseram um modelo geral que permite a determinação do coeficiente de dispersão longitudinal para tubos em que a razão entre as dimensões características é muito elevada. Partindo da equação de balanço material válida para tempos longos (Brenner, 1980), e admitindo que a geometria dos tubos poderia ser aproximada a um corpo regular, estes autores obtiveram por técnicas perturbativas expressões que permitem determinar D_L a partir das características geométricas dos tubos.

O caso da dispersão de massa em tubos para fluidos não-newtonianos foi analisado por Wen e Fan (1975) e Nigam e Saxena (1986). Os resultados obtidos verificam a mesma dependência no quadrado do número de Peclet, como já se tinha observado para fluidos newtonianos. Para fluidos descritos pela lei de potência verificou-se que as condições com base nas quais se obtém o perfil de concentrações assintótico é função das características do fluido (Wen e Fan, 1975).

Vrentas e Vrentas (1988 e 2000) e Takahashi *et al.* (1990) analisaram o transporte de massa em fluxo laminar através de um tubo, tendo proposto estratégias distintas das descritas atrás. Vrentas e Vrentas (1988) e Takahashi *et al.* (1990) propuseram a utilização de técnicas

perturbativas, tendo como base a solução da equação de balanço material sem os termos convectivos de transporte de massa. O método proposto é válido para qualquer valor de tempo, dependendo a precisão da solução do número de termos das séries de perturbação utilizadas na solução. Os resultados previstos pelo modelo foram comparados com as expressões assintóticas previstas pelo modelo de Taylor-Aris tendo os autores analisado a gama de validade desta. Vrentas e Vrentas (2000) analisaram o comportamento para tempos curtos recorrendo a transformadas integrais, tendo mostrado que o método era vantajoso quando comparado com o método proposto por Vrentas e Vrentas (1998).

Roux *et al.* (1998) estudaram o transporte de massa através de uma fractura com espaçamento variável, sendo esse espaçamento irregular. Os resultados das simulações mostram que o valor do coeficiente de dispersão é função da estrutura das paredes, em particular da abertura da fractura, tendo-se concluído que D_L é dependente da distância percorrida pelo fluido mas proporcional ao valor do número de Peclet. As mesmas conclusões foram obtidas por Keller *et al.* (1999), que concluíram que apenas através da inclusão directa da estrutura local da fractura é que os resultados da simulação se compararam favoravelmente com os dados experimentais.

2.4.3.2 Limitações e Extensões do Modelo de Taylor-Aris

O modelo de Taylor-Aris não é válido para descrever o transporte de massa para tempos curtos, em que a difusão de massa no sentido normal ao escoamento ainda não teve tempo para uniformizar o perfil de concentrações. Ananthakrishnan *et al.* (1965) e Gill e Ananthakrishnan (1966, 1967b) resolveram numericamente a Equação 2.95 por diferenças finitas para várias situações físicas, num esforço para determinar as condições de validade do modelo de Taylor-Aris. Estes autores concluíram que, se $Pe > 100$, a influência das condições fronteira impostas na entrada do tubo podem ser desprezados. Estes autores determinaram também o tempo adimensional, τ_d , definido pela expressão

$$\tau_d = \frac{L_X}{v} \frac{D_M}{R^2} \quad (2.106)$$

a partir do qual a solução de Taylor-Aris é válida, tendo concluído que o valor desse parâmetro depende de Pe e da perturbação de concentração que foi imposta. Nunge e Gill (1969) apresentam alguns dos valores limites de τ_d para tubos cilíndricos, anulares, de placas de paralelas e outros, em função do número de Peclet. Para líquidos, em que Pe é elevado

devido aos baixos valores do coeficiente de difusão molecular do *tracer* no fluido, a teoria de Taylor-Aris é válida desde que τ_d seja superior a 0.8, independentemente do tipo de perturbação ou de condições fronteira.

Alguns autores propuseram estender a validade do modelo Taylor-Aris a tempos inferiores ao necessário para o estabelecimento do perfil assintótico. Gill (1967a, 1967c) propôs uma solução analítica da Equação 2.97, baseada numa expansão em série de Taylor da concentração de soluto num ponto qualquer do tubo. A descrição do problema reduz-se à determinação dos valores próprios do respectivo sistema de equações, dependendo o número de termos necessários da expansão de Taylor da precisão pretendida. Os resultados obtidos por este método comparam-se favoravelmente com os resultados assintóticos de Taylor-Aris e com os resultados numéricos de Ananthakrishnan *et al.* (1965) e Gill e Ananthakrishnan (1966, 1967) para tempos curtos.

Gill e Sankasubramian (1970, 1971 e 1972) reanalisaram os mecanismos de transporte de massa num capilar e propuseram uma equação de balanço material generalizada, válida para todos os valores de τ_d . De forma similar ao método proposto por Gill (1967a, 1967c), estes autores fazem uma expansão em série das derivadas espaciais através da definição de funções desconhecidas, dependentes das características do escoamento. Estes autores mostraram que, para valores elevados de $\tau_d > 0.5$, o uso de apenas duas funções permite a obtenção de resultados equivalentes aos do modelo de Taylor-Aris. Esta estratégia foi estendida por Sankarasubramanian e Gill (1972 e 1973) ao caso de perturbações pré-definidas impostas no escoamento ou quando ocorre transferência de massa entre fases.

Tseng e Besant (1970) e Fife e Nicholes (1975) propuseram estratégias diferentes para resolver analiticamente a equação geral de balanço material. Tseng e Besant (1970) assumem que a solução geral é uma combinação linear entre os valores e os vectores próprios obtidos a partir da Equação 2.95. A solução é válida para todos os tempos e os resultados são concordantes com os resultados analíticos de Taylor (1953) e Aris (1956). Fife e Nicholes (1975) assumem que a solução é uma combinação linear de funções, divididas em dois tipos, conforme estas representam o comportamento transiente para tempos curtos ou para tempos longos. As várias funções da combinação linear podem ser determinadas a partir da equação geral de balanço material, sendo possível variar o nível de precisão alterando o número de termos da combinação linear.

Hoagland e Prud'Homme (1985) analisaram a situação em que o escoamento se dá num tubo cilíndrico de diâmetro variável, sendo o raio deste definido por uma função sinusoidal. O método dos momentos proposto por Brenner (1980) foi usado na descrição do transporte de massa. Este permite reduzir o problema à descrição do campo de escoamento e do primeiro e do segundo momentos da distribuição de concentrações no tubo. Na modelização do escoamento foi usado o modelo de Neira e Payatakes (1979). Os resultados obtidos mostram que os valores de D_L são fortemente dependentes da frequência e da amplitude da rugosidade dos tubos, comparando-se favoravelmente com dados experimentais apenas quando $Pe > 100$.

Stone e Brenner (1999) analisaram a situação em que o perfil de velocidades é radial, como é a situação de escoamento numa placa paralela com saída pontual de fluido. Como na análise de Taylor (1953), o escoamento é laminar mas com um perfil de velocidades radial. A expressão para o coeficiente de dispersão é função da coordenada espacial e do campo de escoamento. Rosencrans (1997) analisou uma situação similar para tubos curvos de diferentes características geométricas. Na resolução da equação de balanço material o tubo é dividido em células, tendo-se usado técnicas perturbativas para resolver o sistema de equações em cada célula. Os resultados obtidos por esta estratégia estão de acordo com os resultados teóricos obtidos por outros autores, tendo este autor previsto que para algumas formas geométricas particulares, D_L poderá ser inferior a D_M .

Gupta e Gupta (1972), Wan e Ziegler (1973), Subramanian *et al.* (1974), Paine *et al.* (1983) e Pal (1999) analisaram a influência da inclusão de reacção química no modelo de Taylor-Aris. Gupta e Gupta (1972) analisaram os efeitos da reacção homogénea e heterogénea de primeira ordem nos valores previstos do coeficiente de dispersão axial, para a situação em que o escoamento se dá entre duas placas paralelas, tendo observado que D_L reduz-se com o aumento do valor da constante cinética da reacção. Subramanian *et al.* (1974) estenderam a análise de Gill e Sankasubramian (1970) à situação em que o termo de reacção química é de primeira ordem. Os resultados do modelo prevêem também uma redução de D_L com o aumento da constante cinética da reacção de primeira ordem, em concordância com os resultados obtidos por Gupta e Gupta (1972). Paine *et al.* (1983) analisaram a situação em que ocorre uma reacção irreversível ou adsorção reversível na parede do tendo mostrado que para tempos curtos os coeficientes da equação de balanço material poderiam variar de uma forma muito complexa no tempo. Para tempos grandes estes autores mostraram que o comportamento limite previsto pelo modelo de Taylor é alcançado. Balakotaiah e Chang

(1995) estenderam a análise para o caso em que ocorre adsorção na fase sólida de um meio poroso. A influência dos valores das constantes de reacção e de adsorção foi analisada, tendo-se determinado em que condições eram válidas as aproximações usadas por Taylor (1953) em função desses parâmetros e determinado as formas correctas das equações efectivas para o transporte de massa, para diversos casos.

Ananthakrishnan *et al.* (1965) utilizaram a solução numérica da equação geral de balanço material para determinar em que condições o transporte de massa através de um meio poroso pode ser descrito usando um modelo mais simples. Estes autores consideraram cinco modelos simplificados na sua análise: zona de convecção pura, em que o transporte de massa por difusão pode ser desprezado; zona em que o modelo de dispersão axial é válido; zona em que a solução de Taylor, sem a correcção de Aris, é válida; zona em que a solução de Taylor-Aris é válida; e zona em que o transporte de massa é dominado pelos fenómenos de difusão molecular. Na Figura 2.15 são apresentadas as zonas em que os vários modelos simplificados são válidos.

Outros autores contestaram também a aplicabilidade do modelo de Taylor-Aris, em particular a sua aplicação na descrição do comportamento de meios porosos, tendo Sundaresan *et al.* (1980) apresentado as razões principais.

- Como a equação diferencial de balanço material é de segunda ordem, esta prevê uma resposta instânea a qualquer perturbação de concentração. Visto que as partículas de soluto se deslocam com o fluido, entre a entrada do tubo e a saída deste decorre um tempo não nulo, o que representa matematicamente um atraso.
- Por outro lado, em algumas situações, o modelo prevê o movimento das partículas de fluido contra o sentido principal de escoamento, situação não observada experimentalmente (Hiby, 1962).

Várias estratégias para a resolução deste problema foram consideradas na literatura, sobretudo na aplicação para a modelização do transporte de massa. Sundaresan *et al.* (1980) re-analisaram as equações de balanço material que descrevem o transporte de massa através de um meio poroso. Tomando em conta a mistura do fluido através de um modelo de células, foram propostas modificações da Equação 2.87 que tomam em conta a existência de um atraso devido ao escoamento do fluido.

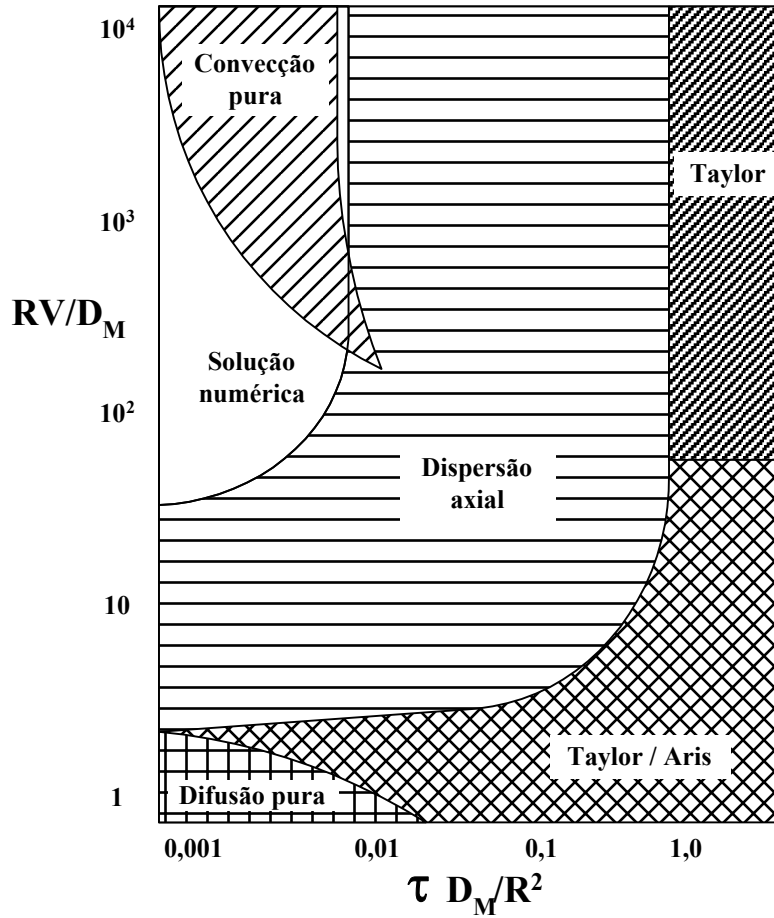


Figura 2.15 Zonas de validade das várias soluções aproximadas da equação geral de balanço material num tubo cilíndrico (Nigam e Saxena, 1986).

Uma abordagem diferente foi proposta nos trabalhos de Westerterp e colaboradores (Westerterp *et al.*, 1995a, 1995b e 1996). De modo a tomar em conta a existência de fortes gradientes na direcção normal ao escoamento no perfil de concentrações do soluto para tempos curtos, estes propuseram a utilização de uma equação adicional que representa o fluxo segundo essa direcção do escoamento. Recorrendo a uma análise similar à efectuada por Taylor (1953), estes autores chegaram ao seguinte sistema de equações

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} + v \frac{\partial C_m}{\partial x} + \frac{\partial j}{\partial t} = 0 \quad (2.107)$$

$$\left[1 + \tau_w q^*(C_m, x, t)\right] j + \tau_w \frac{\partial j}{\partial t} + \tau_w (v + v_a) \frac{\partial j}{\partial x} = -D_L \frac{\partial C_m}{\partial x} \quad (2.108)$$

em que j representa o fluxo adicional e D_L , τ_w e v_a são os parâmetros do modelo, sendo estes função das condições de escoamento. Westerterp *et al.* (1995a, 1996) mostraram que a segunda equação encontra-se relacionada com a relaxação do fluxo de massa no sentido normal ao escoamento, o que justifica o carácter transiente deste. As equações do sistema são

do tipo hiperbólico, possuindo portanto um carácter ondulatório, razão pela qual estes autores chamaram ao modelo, *Wave Model*.

As previsões do modelo foram comparadas com as previsões do modelo de Taylor e da resolução numérica das equações de balanço material completas (Westerterp *et al.*, 1995b; Benneker *et al.*, 1997). Os resultados mostram que o modelo proposto, assim como o de Taylor-Aris, são válidos apenas na situação em que os perfis de concentração variam lentamente com o tempo. No entanto, as previsões do *Wave Model* encontram-se mais próxima dos resultados do modelo completo do que o modelo de Taylor-Aris. Kronberg *et al.* (1996) aplicaram este modelo à modelização de um reactor em que o escoamento se dá em regime laminar, comparando os resultados com as previsões dos modelos de escoamento pistão e de dispersão. Os resultados obtidos mostram que o *Wave Model* possui uma gama de validade maior que os outros dois modelos, devido à capacidade de modelizar variações rápidas do perfil de concentrações no interior do reactor.

Benneker *et al.* (2002) realizaram experiências em que uma perturbação pontual de traçador é aplicada num leito de enchimento de partículas com uma distribuição apertada de diâmetros. Os perfis previstos pelo *Wave Model* e o modelo de dispersão axial são comparados entre si, tendo-se mostrado que o primeiro permitia uma descrição mais adequada do comportamento observado experimentalmente. Os parâmetros do *Wave Model* foram determinados directamente a partir das características do leito de enchimento. Iordanidis *et al.* (2003) usaram dados experimentais do comportamento de reactores de leito fixo, tendo mostrado que as previsões dos dois modelos são similares desde que a velocidade de reacção não seja muito elevada. Para reacções rápidas ou fortemente exotérmicas, as previsões do *Wave Model* eram superiores às do modelo de dispersão axial.

Brenner (1980) e Brenner e Adler (1982) re-analisaram o modelo de Taylor-Aris, assumindo que o deslocamento de uma partícula de tracer é a soma de dois termos. Um deles representa o movimento browniano da partícula, equivalente à difusão, e o outro representa a convecção do fluido (Edwards e Brenner, 1993). Relacionando o fluxo de partículas nos níveis microscópico e macroscópico, é possível determinar expressões para o coeficiente de dispersão num meio poroso, sendo alguns casos analisados em detalhe por Edwards e Brenner (1993). Shapiro e Brenner (1986, 1987 e 1988) e Dungan *et al.* (1990) tomaram em conta a influência da reacção química, tendo analisado como é que as características desta influenciavam o transporte através de um meio poroso. Brenner e Adler (1982) tomaram em conta o transporte de massa entre fases e Dill e Brenner (1983) analisaram o caso em que o

campo de escoamento não é estacionário. Huseby *et al.* (2001) aplicaram este método à dispersão de um soluto numa rede tridimensional de fracturas. A influência das características da conectividade e forma das fracturas é analisada em detalhe, tendo os autores mostrado que o comportamento do meio poroso é uma forte função destas.

Os modelos descritos anteriormente assumem que o escoamento se encontra em regime laminar. Taylor (1954a) analisou o caso do transporte de massa num tubo com escoamento turbulento. Recorrendo à analogia de Reynolds entre a transferência de quantidade de movimento e de calor em escoamento turbulento, este autor obteve uma expressão para D_L em função das condições de fluxo. Nestas condições de escoamento, a mistura do fluido é suficiente para estabelecer o perfil assintótico de concentrações. Os valores previstos por este modelo comparam-se favoravelmente com os dados experimentais. Tichacek *et al.* (1957) re-analisaram o transporte de massa em escoamento turbulento, tendo mostrado que as expressões para o cálculo de D_L são dependentes do perfil de velocidades assumido para o escoamento através do tubo. Ekambara e Joshi (2003) usaram técnicas de CFD para caracterizar a dispersão axial em tubos em que o escoamento se encontra em regime de transição ou turbulento. O escoamento turbulento foi modelizado usando um modelo $k-\varepsilon$, tendo-se observado uma boa concordância entre o comportamento previsto e os dados experimentais.

2.4.3.3 Método dos Momentos de Aris

Aris (1956) analisou o mesmo problema de Taylor (1953), sem procurar resolver analiticamente a equação de balanço material. Partindo do facto que o comportamento de um sistema a uma perturbação de *tracer* pode ser caracterizado através dos momentos estatísticos da resposta obtida, Aris (1956) procurou determinar expressões para estes analisando directamente a equação de balanço material.

Por definição, o momento de ordem n , μ_n , da concentração à saída de um meio poroso é dado por

$$\mu_n(y, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^n C(x, y, t) dx \quad (2.109)$$

em que $C(x, y, t)$ representa a função distribuição no interior do meio poroso. Substituindo esta expressão na Equação 2.95, Aris (1956) mostrou que os três primeiros momentos da resposta de um meio poroso deveriam verificar as seguintes expressões

$$\frac{\partial \mu_0}{\partial t} = -v \nabla \mu_0 + D \nabla^2 \mu_0 \quad (2.110)$$

$$\frac{\partial \mu_1}{\partial t} = v \mu_0 - v \nabla \mu_0 + D_m \nabla^2 \mu_0 \quad (2.111)$$

$$\frac{\partial \mu_2}{\partial t} = 2v \mu_1 + 2D_m v \mu_0 - v \nabla \mu_2 + D_m \nabla^2 \mu \quad (2.112)$$

As condições fronteira dependem da natureza das duas fases, e as condições iniciais do tipo de perturbação de concentração imposta no sistema. Apesar de ser possível definir as expressões que verificam os momentos estatísticos de qualquer ordem, e serem necessários todos os momentos para caracterizar completamente a resposta de um sistema, a informação obtida a partir dos valores dos três primeiros momentos da distribuição é quase sempre suficiente.

Aris (1956), usando este método, mostrou que D_L era a soma de dois valores, devidos à difusão e à convecção de massa. Aris (1959a) aplicou este método na determinação de D_L para um meio poroso descrito pela estrutura de Turner (1958), como se apresenta na Figura 2.2. O transporte de massa nos poros normais ao sentido de escoamento dá-se apenas por difusão. Os resultados mostram que D_L depende não só das características do perfil de velocidades no canal principal, mas também do volume nos poros em que o transporte de massa se dá apenas por difusão, podendo os dois valores ser muito diferentes. A solução analítica obtida por Aris (1959a) foi comparada por Evans e Kenney (1966) com dados experimentais obtidos para o transporte de massa através de um tubo em que ocorre transferência de massa para uma fase sólida, tendo-se observado boa concordância entre estas. Gill e Ananthakrishnan (1967b) analisaram o mesmo problema mas associaram todos os poros no sentido normal ao escoamento num único poro. Deste modo, a geometria do sistema é formada por dois elementos lado a lado, ocorrendo a transferência de massa entre as duas partes apenas por difusão molecular. Os resultados obtidos são concordantes com os obtidos por Aris (1959a).

Aris (1959b, 1960) aplicou este método à análise de transporte de massa com transferência de massa entre fases e quando o escoamento é periódico no tempo. Na segunda situação (Aris, 1960), a análise é equivalente à efectuada por Aris (1956), sendo apenas mais complexa devido à natureza do campo de escoamento. O carácter periódico do escoamento influencia D_L , sendo os termos de correcção função das características deste. No entanto, para um tempo suficientemente grande, a influência do carácter do escoamento é pouco significativa. A inclusão do transporte de massa entre fases resulta em alterações em D_L , sendo as variações dependentes da razão de partição do soluto entre a fase sólida e fluida.

Horn (1971) estendeu o método ao caso em que pode ocorrer difusão de massa na fase sólida. Visto que experimentalmente apenas a concentração de soluto na fase fluida é que pode ser determinada facilmente, o método deve ser aplicado numa zona representativa do meio, em que uma equação efectiva é determinada, tomando em conta a influência da fase sólida. Horn (1971) conclui que D_L é função também da difusividade molecular do soluto na fase sólida e do coeficiente de transferência de massa entre fases.

Barton (1983) estendeu o método proposto por Aris (1956) à análise do transporte de massa para tempos curtos. A equação diferencial geral que permite calcular o momento de ordem n obtida por Aris (1956) é resolvida por separação de variáveis, o que permite a determinação de expressões analíticas para os momentos válidas mesmo para tempos curtos. Observou-se concordância entre as expressões obtidas e os valores previstos pelo modelo de Taylor-Aris para tempos grandes. Espinoza e Valocchi (1998) propuseram uma estratégia para a caracterização do transporte de massa em meios porosos heterogéneos, em que se dá uma reacção química, baseada na definição dos momentos temporais. A distribuição de zonas activas (em termos de reacção química) é definida como uma variável aleatória, sendo esta incluída na resolução da equação de balanço material, resultando numa equação diferencial estocástica. Esta é resolvida para determinar os momentos da resposta do meio, tendo Espinoza e Valocchi (1998) analisado várias distribuições espaciais para as zonas reactivas.

Adler e Brenner (1985b) aplicaram esta estratégia na descrição do transporte de massa através de uma rede tridimensional espacialmente periódica, assumindo transporte por convecção nos poros e mistura perfeita nos nós da rede. Com base no modelo proposto por Adler e Brenner (1985a) para a descrição do escoamento laminar através de uma rede com as mesmas características, Adler e Brenner (1985b) mostraram como era possível caracterizar o campo de escoamento e determinar o coeficiente de dispersão resolvendo um sistema de equações

lineares. Um modelo similar foi proposto anteriormente por Gavalas e Kim (1981) na análise do transporte de massa por difusão através de um meio poroso, tendo os autores concluído que modelos deste tipo são adequados numa primeira análise do problema. Edwards (1995) analisou a deposição de partículas de aerossóis no interior de pulmões recorrendo a uma rede bidimensional com uma estrutura ramificada, como se pode observar na Figura 2.3. Assumindo que a rede era espacialmente periódica, este autor mostrou que era necessário apenas descrever o comportamento de uma célula fundamental da rede, representativa da sua estrutura. Os valores previstos para o coeficiente de dispersão efectivo das partículas pela rede podem ser previstos por esta teoria. Os resultados previstos para a deposição das partículas comparam-se favoravelmente com dados experimentais.

Srivastava *et al.* (2002, 2004) e Delay *et al.* (1998) consideraram que os momentos podem ser função do tempo e da posição do traçador no meio poroso. Ao contrário das equações de balanço escritas para o modelo de dispersão, nesta situação os coeficientes das equações são função de tempo. As expressões dos momentos tomam em conta estes aspectos, sendo possível desta forma descrever no tempo a evolução dos parâmetros que caracterizam o transporte no meio poroso. Pang *et al.* (2003) usaram o método dos momentos temporais para descrever o transporte de massa em sistemas multicomponente em que ocorre adsorção e reacção química. Os resultados mostram que este tipo de modelos é mais adequado, em especial para descrever a resposta para tempos longos. No entanto, o modelo requer a utilização de mais informação experimental que o modelo de dispersão, o que pode limitar a sua aplicabilidade.

2.4.4 Modelo de Dispersão

Um meio poroso é por definição heterogéneo, possuindo um campo de escoamento não homogéneo no interior deste. No entanto, as variações em relação à velocidade média do fluido são pequenas normalmente. Deste modo, é possível assumir que a velocidade do fluido é constante, evitando as complicações de usar um perfil de velocidades. Além desta hipótese, assume-se também quase sempre que o transporte de massa pode ser caracterizado por dois coeficientes de dispersão, traduzindo o transporte de massa no sentido do escoamento e no sentido normal ao escoamento. Assumindo uma geometria cilíndrica, a seguinte equação de balanço material descreve o perfil de concentração no interior do meio

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_T \frac{\partial C}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right) \quad (2.113)$$

Em muitos trabalhos, D_L é substituído por D_{ax} , coeficiente de dispersão axial, e D_T é substituído por D_R , coeficiente de dispersão radial. A resolução analítica desta equação requer a definição de um conjunto de condições fronteira e uma condição inicial. Em relação às coordenadas radiais, é comum assumir condições de simetria radial e de paredes impermeáveis ao soluto. Em relação à coordenada axial, o conjunto de condições fronteira depende da natureza da entrada do sistema (Levenspiel e Bischoff, 1972; Wen e Fan, 1975). Usando as condições propostas por Danckwerts (1953), Wen e Fan (1975) apresentam a função de transferência da Equação 2.113, de onde podem ser obtidos os valores dos coeficientes de dispersão a partir da resposta do sistema a uma perturbação na concentração de soluto. Kocabas e Islam (2000a e 2000b) analisaram as bases da aplicação da Equação 2.113 ao transporte de massa através de um meio poroso. Em particular, estes autores rescreveram a Equação 2.113 em termos do fluxo de massa através do meio poroso, em que as características locais podiam variar. Soluções analíticas para diferentes casos são apresentados por Kocabas e Islam (2000).

Gunn (1969 e 1987) modeliza o transporte de massa ao nível local para determinar expressões para os parâmetros que caracterizam o comportamento da rede. Assumindo que o movimento das partículas é equivalente a um processo de *Random Walk*, este autor mostrou que no limite é possível obter uma equação de balanço material similar à do modelo de dispersão. Os parâmetros que caracterizam o *Random Walk* foram caracterizados em função da forma das partículas a partir de dados experimentais. Concordância entre o comportamento qualitativo previsto pelo modelo e observado experimentalmente foi observada, tendo determinado correlações usando dados experimentais adequados para um conjunto alargado de fluidos e condições de operação.

As expressões obtidas a partir da Equação 2.113 podem ser simplificadas se a perturbação imposta for uniforme. Como o perfil de velocidades assumido é uniforme, a influência do transporte de massa no sentido radial deixa de ser significativo, obtendo-se então a expressão

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_T \frac{\partial C}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.114)$$

Se não ocorrer reacção química ou esta for de primeira ordem, após a definição das condições fronteira e inicial, é possível determinar a função de transferência do sistema. As soluções analíticas para muitos casos podem ser encontradas na literatura (Bischoff e Levenspiel, 1962a e 1962b; Brenner, 1962; Levenspiel e Bischoff, 1972; Himmelblau e Bischoff, 1968;

Wen e Fan, 1975, Gill *et al.*, 1975). Rasmusson e Neretnieks (1980) estudaram e determinaram a solução analítica para a situação em que as partículas são porosas e ocorre transporte de massa nestas por difusão. Wang e Stewart (1989) analisaram a situação em que existe mais do que uma espécie no meio poroso, podendo ocorrer uma reacção química complexa. As equações de balanço foram resolvidas por um método de colocação ortogonal, permitindo a obtenção de expressões para o coeficiente de dispersão longitudinal em função das características do escoamento e da reacção química. Sun *et al.* (1999a e 1999b) e Clement (2001) analisaram o caso em que ocorrem reacções químicas simultâneas de primeira ordem, tendo desenvolvido métodos analíticos que permitem determinar o perfil de concentrações à saída do meio poroso em função do tempo. Aral e Liao (1996) analisaram o caso em que D_L é função do tempo, tendo determinado soluções analíticas para alguns casos em que a expressão analítica do coeficiente de dispersão é conhecida. Logan (1996) analisou o caso em que D_L varia espacialmente, tendo sido tomados em conta a ocorrência de reacção química e de adsorção do soluto na interface entre as fases sólida e fluida. A equação de balanço material é resolvida analiticamente assumindo que o meio é espacialmente periódico, assumindo que D_L varia exponencialmente com a distância ao longo do meio poroso. Como o meio poroso é periódico, o perfil de concentrações possui um carácter periódico, caracterizado por uma amplitude e um desvio de fase, tendo sido analisada a influência da ocorrência de reacção e/ou adsorção nos parâmetros que caracterizam a resposta. Huang *et al.* (1996) resolveram analiticamente a situação em que D_L varia linearmente com a distância, até alcançar um valor assintótico limite. Estes autores mostraram que a solução geral incluía as situações em que D_L é constante ou D_L varia linearmente com a distância, tendo mostrado que o comportamento do meio era fortemente dependente dos parâmetros da função de variação de D_L . Liu *et al.* (2000) propõem resolver as equações de balanço material usando transformadas integrais generalizadas. Estes autores mostraram que este método é adequado desde que os termos de reacção química ou adsorção sejam lineares. Para a situação em que estes são não-lineares, estes autores mostraram que o método ainda pode ser utilizado mas o sistema de equações obtido deve ser resolvido numericamente.

Tsotsas e Schlunder (1988) tomaram em conta a estrutura do escoamento em leitos de enchimento para caracterizar o transporte de massa no seu interior. Diferentes tipos de irregularidades do campo de escoamento foram tomados em conta, com diferentes características de escoamento. Os resultados do modelo permitem caracterizar as diferenças observadas experimentalmente para líquidos e gases e concluir que os efeitos dos caminhos

preferenciais na parede do leito são pouco significativos (Oliveros e Smith, 1982). A análise efectuada por estes autores permite concluir que as características locais do escoamento são determinantes no transporte de massa, tendo determinado parâmetros para a sua caracterização baseados nas características do enchimento.

Gunn (2004) analisou a aplicação do modelo de dispersão axial na previsão do comportamento de reactores de leito fixo. Um novo método numérico desenvolvido para resolver as equações de balanço material foi desenvolvido, que converte o problema de fronteira num problema de valor inicial. Diferentes casos de reacções simples, complexas e não isotérmicas são analisadas em detalhe. Dommeti e Balakotaiah (2000) analisaram a validade do modelo de dispersão e a relação com outros modelos que descrevem o comportamento de reactores de leito fixo, como por exemplo modelos de tanques agitados. Os resultados mostram que para reacções rápidas as previsões dos diferentes modelos diferem apreciavelmente, tendo os autores determinado as condições em que os diferentes modelos são aplicáveis.

Uma questão importante na aplicação prática deste modelo diz respeito ao conjunto de condições fronteira que deve ser imposto, em particular na entrada do meio poroso. Wen e Fan (1975), recorrendo ao modelo de tanques em série, determinaram os conjuntos de condições fronteira adequadas para sistemas abertos e fechados na entrada e na saída. Apesar de ter sido Langmuir (1908) o primeiro autor a propô-lo, o conjunto de condições-fronteira mais utilizado na prática designa-se por Danckwerts (1953), sendo este representativo de um sistema fechado à difusão na entrada e na saída. Barber *et al.* (1998) analisaram em detalhe em que condições esse conjunto de condições fronteira é válido. Os resultados previstos pelos diferentes conjuntos de condições fronteira são significativamente diferentes quando as dimensões características do meio poroso são pequenas, em condições tais que o perfil assintótico de concentrações não foi alcançado (Wen e Fan, 1975). Aris e Rutherford (1957) mostraram experimentalmente que estas condições são adequadas para o transporte de massa através de um leito de enchimento, dentro do erro experimental. Apesar de quase sempre se usar o conjunto de condições fronteira proposto por Danckwerts, propostas de conjuntos diferentes são ainda propostas na literatura, com sucesso variável (Salmi e Romanainen, 1995).

O valor de D_L pode ser determinado ajustando a resposta, no domínio do tempo, à curva obtida experimentalmente. Diferentes técnicas de o efectuar e as vantagens e as desvantagens

destas são apresentadas por Froment e Bischoff (1990). Como a equação de balanço material é linear, uma forma mais simples para determinar D_L envolve o uso dos momentos da $E(t)$, em especial do segundo momento centrado na média (também designado por desvio padrão), definido pela expressão (Martin, 2000)

$$\sigma = \frac{2}{Pe} \left[1 - \frac{1}{Pe} (1 - e^{-Pe}) \right] \quad (2.115)$$

Estratégias para a determinação dos parâmetros estatísticos da resposta em função das características da perturbação, redução do erro experimental e modelo de dispersão considerado são discutidas em Bischoff e Levenspiel (1962a e 1962b) e Levenspiel e Bischoff (1972). Grattoni *et al.* (1993) e Kelly *et al.* (1994) analisaram a aplicação de técnicas de optimização na determinação do coeficiente de dispersão axial, entrando com a influência da adsorção na fase sólida, para vários tipos de perturbações. Numerosas correlações foram propostas na literatura para determinar D_L em função das características do meio poroso, em particular leitos de enchimento, e das características do escoamento e do fluido (Langer *et al.*, 1978; Gunn, 1987; Foumeny *et al.*, 1992).

Para entradas não uniformes, é necessário tomar em conta a influência da dispersão radial. A determinação experimental deste parâmetro pode ser efectuada usando uma perturbação pontual de *tracer* (Harleman e Rumer, 1963; Wen e Fan, 1975). De notar que no transporte de massa através de um meio poroso a dispersão radial vai ser significativa para entradas não uniformes de *tracer* ou se no meio se der uma reacção química rápida ou exotérmica. Mesmo para as situações em que os efeitos de parede num leito de enchimento podem ser significativos, os efeitos da mistura induzida pelas partículas é suficiente para uniformizar o perfil radial de concentrações (Oliveros e Smith, 1982).

Uma das questões mais importantes na aplicação deste modelo diz respeito à hipótese, implícita no modelo de dispersão, que o perfil de concentrações é uniforme na direcção normal ao escoamento. Apesar dos resultados de Oliveros e Smith (1982) mostrarem que a presença das partículas de um meio poroso aumentam a mistura do fluido, uniformizando o perfil radial de concentrações, para leitos experimentais com um comprimento pequeno, esta uniformização pode não ser válida (Johnson e Kapner, 1990; Hackert *et al.*, 1996). Os resultados experimentais de Han *et al.* (1985) permitem concluir que os valores do coeficiente de dispersão axial obtidos da resposta à saída de um leito de enchimento são independentes do comprimento desde que a seguinte condição seja verificada

$$\left(\frac{L_x}{D_p}\right) \frac{1}{Pe_p} \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon}\right) \geq 0.3 \quad (2.116)$$

em que a dimensão característica do número de Peclet, Pe_p , é o diâmetro equivalente médio das partículas que formam o leito de enchimento.

No caso mais geral, o transporte de massa dá-se nas três dimensões espaciais e as características geométricas do meio poroso não permitem assumir que o transporte de massa é importante apenas em uma ou duas dimensões espaciais. Este aspecto é importante em particular para a situação em que as perturbações de concentração impostas no meio poroso não são espacialmente uniformes. Sim e Chrysikopoulos (1999) determinaram soluções analíticas para o transporte de massa em três dimensões para diferentes geometrias e com ocorrência ou não de reacção química ou adsorção do soluto. Para a implementação no caso mais geral, situação que ocorre por exemplo no desenvolvimento de *software* para a análise do transporte de massa através de um meio poroso (Lucille *et al.*, 2000), torna-se necessário recorrer a métodos numéricos.

2.4.5 Modelos de Redes

2.4.5.1 Descrição Geral

Para aplicar um modelo de redes à descrição do transporte de massa através de um meio poroso é necessário determinar o campo de escoamento no seu interior. Como a presença de um *tracer* no interior do fluido não modifica as suas características, as estratégias apresentadas na Secção 2.3.5 para descrever o escoamento podem ser utilizadas sem alterações.

Em quase todos os trabalhos que recorrem a modelos de redes conhecidos pelo autor, foi assumido que o escoamento é laminar. Por outro lado, é comum também assumir que o volume dos nós da rede é desprezável, não tomando em conta a acumulação de *tracer* nas equações de balanço material desses elementos. Existem excepções a esta hipótese, como é o caso dos modelos de tanques agitados, mas quase sempre assume-se que apenas um tipo de elementos é que possui um volume não nulo.

Duas estratégias distintas são usadas para descrever o transporte de massa num modelo de redes. Uma delas baseia-se no seguimento da evolução, no tempo e no espaço, de uma nuvem de partículas neutras através dos elementos da rede. É comum designar este método por

particle tracking. Na outra estratégia, as equações de conservação de massa são resolvidas simultaneamente para se determinar as curvas de *breakthrough*. Os dois métodos vão ser analisados e comparados a seguir.

2.4.5.2 Particle Tracking

Nesta estratégia é comum assumir-se que as partículas se deslocam nos canais da rede com a mesma velocidade do fluido (Sahimi *et al.*, 1983 e 1986). Este fenómeno representa o transporte de massa por convecção, dominante na maior parte de condições num meio poroso. Os nós da rede actuam como pontos de mistura, sendo a acumulação de partículas desprezável. O transporte de massa por difusão é modelizado admitindo que as partículas podem saltar entre diferentes linhas de fluxo, num processo de *random walk*.

Saffman (1959a, 1959b e 1960) e Jong (1958) foram os primeiros autores a usar este método na análise da dispersão de massa em meios porosos. Os modelos são similares, sendo o de Saffman o mais completo dos dois. Este é baseado num modelo de redes tridimensional, em que os canais possuem o mesmo comprimento e diâmetro com orientação aleatória. A lei de Darcy é válida na modelização do escoamento. O trajecto das partículas através do meio é modelizado como um processo de *random walk*, em que a distância percorrida, direcção e duração dos passos são variáveis aleatórias. Apenas o percurso das partículas é função das características do escoamento nos canais.

Tomando em conta as características do escoamento e do transporte de massa, Saffman (1959a) definiu as seguintes três constantes de tempo: t_c , t_{rd} e t_{ad} , associados respectivamente ao transporte de massa por convecção, difusão radial e difusão axial, que permitem caracterizar o comportamento de um meio poroso

$$\begin{array}{ccc} t_c = \frac{l}{(3/\varepsilon)\cos(\theta)v_T} & t_{rd} = \frac{d^2}{8D_M} & t_{ad} = \frac{l_0^2}{2D_M} \\ \text{convecção} & \text{difusão radial} & \text{difusão axial} \end{array} \quad (2.117)$$

em que l_0 representa o comprimento dos canais da rede, θ é o ângulo que os poros da rede fazem com o sentido principal assumido para o escoamento e d é o diâmetro médio dos poros. O modelo assume que l_0 é constante. Consoante os valores relativos destas constantes de tempo, este autor definiu cinco situações distintas que determinam a duração dos passos do *random walk*.

$t_c \ll t_{rd}$	O tempo de passagem da partícula através do poro é suficientemente curto para permitir desprezar a influência da difusão radial. Desse modo, a duração dos passos de <i>random walk</i> é igual a t_c .
$t_c \approx t_{rd}$	A partícula pode-se encontrar numa linha de fluxo próximo da parede, pelo que se desloca a uma velocidade inferior à média, o que equivale a dizer que t_{rd} é da mesma ordem de grandeza de t_c . A difusão radial actua no sentido de deslocar a partícula para uma linha de fluxo mais rápida, sendo deste modo a duração do passo adequada igual a $t_c + t_{rd}$.
$t_{rd} < t \ll t_{ad}$	Nesta situação, a influência da difusão axial é desprezável, e a duração do passo é dada por $t = t_{rd} + l/v_T$.
$t_{rd} < t \leq t_{ad}$	Nesta situação, o tubo é pequeno sendo os que efeitos de difusão pouco significativos. A duração do passo é dada por $t = l/v_T$.
$t_{ad} \ll t$	Caso em que os tempos são longos. A duração do passo é dada por $t = t_{ad}$.

Analisando cada um dos casos, Saffman (1959a) mostrou que os coeficientes de dispersão transversal e longitudinal podiam ser determinados pelas expressões

$$D_T = \frac{3}{16} L_X v_T \quad (2.118)$$

$$\frac{D_L}{D_T} = f[Pe(\ln Pe)^n] \quad (2.119)$$

Os valores das constantes de proporcionalidade e da potência da última expressão dependem dos regimes de transporte de massa, sendo algumas destas apresentadas por Sahimi (1995).

O modelo de Saffman (1959a, 1959b e 1960) foi generalizado por Chaplain *et al.* (1998) para o transporte de massa através de um meio poroso em que ocorre o escoamento de um fluido não newtoniano. Os resultados obtidos mostram que a dependência funcional do coeficiente de dispersão axial é idêntica à observada para escoamento de um fluido newtoniano, devendo as características do fluido ser tomadas em conta tanto na modelização do escoamento como nas expressões de D_L em função de Pe .

Sahimi *et al.* (1983, 1986) utilizaram este método na descrição da dispersão em modelos de redes bidimensionais ou tridimensionais com estruturas regulares. Os nós possuem um volume desprezável e os diâmetros dos canais seguem uma distribuição aleatória definida. O campo de escoamento foi determinado admitindo fluxo laminar nos capilares e aplicando a analogia com um circuito eléctrico. Num dado instante, considerado o instante zero, as partículas de soluto são introduzidas à entrada da rede. A evolução das partículas é seguida usando um algoritmo de *time marching*, em que a posição das partículas é actualizada entre cada passo de tempo. Nos nós da rede existe mistura perfeita das correntes de entrada, sendo a probabilidade de saída num dado canal proporcional ao caudal. Os coeficientes de dispersão podem ser determinados a partir da distribuição do primeiro tempo de chegada das partículas, PTC, à saída da rede, para a dispersão longitudinal, ou a um plano paralelo ao sentido de escoamento, para a dispersão radial.

Esta estratégia permite a inclusão directa das características do campo de escoamento na modelização do transporte de massa. No entanto, apenas a influência da dispersão mecânica de massa é tomada em conta. A inclusão dos efeitos da difusão molecular e a simulação da dispersão de camada limite pode ser efectuada tomando em conta os efeitos do perfil de velocidades nos canais da rede. Se considerarmos que uma molécula segue uma determinada linha de fluxo, o tempo de passagem através de um capilar representa a constante de tempo do transporte de massa por acção convectiva, t_c , igual à razão entre o comprimento do canal sobre a velocidade da linha de fluxo em questão. Se apenas os efeitos da convecção forem tomados em conta, como na zona junto da parede a velocidade tende para zero, as partículas podem ficar tempo infinito no canal, o que não é fisicamente válido. Apenas através da difusão molecular no sentido normal do escoamento é que as partículas podem sair do canal. Os saltos entre linhas de fluxo são aleatórios e podem ser descritos por um processo de *random walk*. Com base neste modelo, Sahimi *et al.* (1983 e 1986) e Sahimi e Imdakm (1988), mostraram que é possível descrever todos os regimes de transporte de massa num meio poroso.

Sahimi *et al.* (1986) analisaram a influência das características geométricas da rede e das regras definidas para os movimentos das partículas no interior do meio poroso. Os resultados obtidos por estes autores mostram que D_L é proporcional a Pe^n , em que n é uma constante compreendida entre 1 e 2. Estes resultados encontram-se de acordo com os dados experimentais disponíveis para meios porosos com uma estrutura irregular, mas não para leitos com estrutura, em que se observa uma dependência em Pe^2 .

Sorbie e Clifford (1991) propuseram um algoritmo similar. A rede de elementos é bidimensional, regular e possui um número de coordenação médio de quatro. Os nós de mistura possuem volume desprezável e os canais possuem todos igual comprimento, com os diâmetros dos raios dos canais a seguirem uma distribuição de Haring-Greenkorn (1970). O escoamento nos canais é laminar e o fluido é newtoniano. O movimento das partículas é modelizado como sendo a soma de duas contribuições, uma difusiva e outra convectiva, sendo necessário saber a posição radial da partícula dentro do poro em cada instante. A contribuição convectiva é determinada a partir do perfil de velocidades nos capilares, sendo a velocidade da partícula igual à da linha de fluxo onde esta se encontra. A difusão molecular é descrita como sendo um movimento browniano, sendo o deslocamento provocado definido por uma função densidade de probabilidade. Sorbie e Clifford (1991) concluíram que apenas para tubos com uma razão entre o comprimento e o diâmetro elevada é que a expressão limite de Taylor é válida. Damion *et al.* (2000) estenderam o modelo de Sorbie e Clifford (1991) para a situação em que o escoamento através do meio poroso é bifásico usando redes tridimensionais com um número médio de coordenação igual a 6. Os resultados previstos pelo modelo descrevem bem o comportamento qualitativo observado experimentalmente, relevando a validade do modelo proposto. Uma estratégia similar foi considerada também por Weng *et al.* (2004) para caracterizar o transporte de massa em redes bidimensionais em que a influência da difusão tem de ser tida em conta. Estes autores estudaram a influência da mistura nos nós de mistura tendo mostrado que as características do perfil de concentrações a nível local depende fortemente das características geométricas da rede e dos seus elementos.

Os resultados obtidos estão de acordo com os resultados experimentais publicados, tendo em particular obtido um valor mínimo para D_L em função do número de Peclet (Fried e Coumbranous, 1971). Dois solutos com valores diferentes de difusividade molecular foram estudados. Para o soluto de menor difusividade, observou-se que a zona em que o transporte de massa se dá por convecção se alarga para valores mais baixos de velocidade. Este facto sugere que as características do soluto deverão ser tomadas em conta na modelização do transporte de massa num meio poroso.

Moreno e Neretnieks (1993) e Moreno e Tsang (1994) usaram o método de *particle tracking* para simular o transporte de massa através de um meio poroso. Moreno e Neretnieks (1993) procuraram analisar o comportamento de um meio poroso fracturado através de um modelo tridimensional com estrutura regular, em que os elementos da rede são canais paralelos. O escoamento foi simulado assumindo escoamento laminar, usando a analogia com um circuito

eléctrico. O coeficiente de dispersão axial é calculado a partir dos tempos de chegada das partículas ao fundo do meio poroso, representando essa distribuição de tempos de chegada a *RTD*. Moreno e Tsang (1994) usaram o mesmo modelo mas assumiram que o meio poroso poderia ser descrito por um conjunto de blocos de diferente permeabilidade, dispostos numa estrutura tridimensional regular. A analogia com um circuito eléctrico é válida desde que a cada bloco do modelo seja atribuída uma condutância e os nós representem os centros dos blocos. Uma distribuição log-normal de condutâncias foi usada, tendo-se analisado a influência das características no comportamento do meio. Dependendo da posição relativa dos blocos mais permeáveis, o fluxo através do meio pode ser mais ou menos tortuoso. Para distribuições apertadas de condutâncias, correspondentes a um meio homogéneo, os percursos das partículas são quase rectos. Aumentando o desvio padrão das distribuições de condutâncias, ocorre a formação de caminhos preferenciais no meio, que transportam a maior parte das partículas, com a ocorrência de mais do que um pico nas curvas de *breakthrough*. Os autores recomendam cuidado na análise de curvas de *breakthrough* de meios fortemente heterógeneos para a determinação de coeficientes de dispersão, pois os valores obtidos podem não ser significativos do verdadeiro comportamento do meio. A influência da mistura nos nós de uma rede de fracturas bidimensional espacialmente periódica foi analisada analiticamente por Grubert (2001). Os resultados obtidos relevam uma forte dependência da dispersão longitudinal na estrutura da rede, e no grau de mistura do fluido nos nós da fractura, sendo estas conclusões válidas também para redes não espacialmente periódicas.

Sugita *et al.* (1995) analisaram o transporte de massa através de um meio poroso tomando em conta a ocorrência de adsorção reversível nas paredes dos canais. Modelos de redes bidimensionais irregulares com tubos cilíndricos foram considerados por estes autores. A influência da adsorção foi modelizada impondo um factor de retardação, função da constante cinética de adsorção, ao movimento das partículas através dos canais. A influência da difusão molecular foi incluída através de um procedimento de *random walk*. Os resultados obtidos mostram que a resposta de um meio poroso é fortemente dependente das suas características locais.

Brekowitz e Scher (2001) analisam a aplicabilidade de extensões do modelo de *Particle Tracking* à descrição do transporte de massa através de um meio poroso, em particular em situações em que o modelo de transporte não é válido. Um modelo estocástico baseado num modelo de *Random Walk* contínuo, *CTRW*, no tempo foi desenvolvido, tendo os autores mostrado que o modelo de dispersão pode ser considerado como um caso limite do modelo

descrito. A comparação com dados experimentais mostra que o modelo permite caracterizar o comportamento de meios porosos com diferentes escalas espaciais e temporais.

2.4.5.3 Análise do Comportamento do Perfil de Concentrações

A outra estratégia para a descrição do transporte de massa em redes de elementos simples passa por analisar a evolução do perfil de concentrações local. Em relação ao método anterior, este permite obter directamente as curvas de *Breakthrough* da rede, e é mais simples a inclusão de reacção e da transferência entre a fase sólida e de fluido. No entanto, a inclusão do transporte de massa por difusão molecular não é tão simples e as equações a resolver são mais complexas.

Em qualquer dos modelos, as equações de balanço material são escritas para cada um dos elementos da rede, tomando em conta as características geométricas e de escoamento no seu interior. A partir da solução, quase sempre numérica, a resposta da rede a uma perturbação de soluto pode ser obtida. Esta serve quase sempre para a determinação do número de Peclet e do coeficiente de dispersão axial, através da comparação directa entre o segundo momento estatístico obtido por simulação e a expressão analítica obtida pelo modelo de dispersão axial.

Modelos de Redes Unidimensionais

Como já se considerou na Secção 2.2.4, os modelos de redes mais simples são aqueles formados por conjuntos de capilares dispostos de forma paralela entre si. Deste modo, o comportamento macroscópico previsto por estes modelos é unidimensional, segundo o sentido de escoamento, apesar de ao nível local, conforme a geometria dos elementos, poder ser necessário simular o comportamento dos elementos usando mais do que uma dimensão espacial.

Lenormand (1995) e Lenormand e Wang (1995) utilizaram uma rede de tubos paralelos para descrever o transporte de massa em meios porosos do tipo que são encontrados em lençóis freáticos ou reservatórios de petróleo. Os elementos são constituídos por zonas de diferentes permeabilidade, de modo a descrever a estrutura irregular de um meio poroso real. Em cada uma das partes do tubo, admite-se que o meio é homogéneo, e que o escoamento se encontra em regime laminar. Assumiu-se que não ocorre mistura de fluido entre os diferentes tubos, mas o soluto pode mudar de tubo por difusão molecular. O transporte de massa no interior dos tubos dá-se essencialmente por difusão molecular.

A existência de zonas com diferentes permeabilidades, implicando a existência de um perfil de velocidades no meio, vai resultar em dispersão de massa. Lenormand (1995) mostrou que o segundo momento estatístico da curva de *breakthrough*, relacionado com o coeficiente de dispersão axial, é função do segundo momento da distribuição de permeabilidades do meio. Conclusão idêntica foi obtida na determinação de uma equação de balanço material geral para a previsão do comportamento do modelo ao nível macroscópico.

Num artigo subsequente, Lenormand e Wang (1995) utilizaram o mesmo modelo para um meio em que existem correlações espaciais entre os elementos da rede, concluindo que, ao contrário do estudo anterior, os valores dos coeficientes de dispersão que caracterizam o transporte de massa do meio poroso dependem também dos momentos de ordem superior a 2 e da distribuição de permeabilidade do meio. A inclusão das correlações espaciais modifica também a forma da CDE.

Carbonell (1979) utilizou um modelo de redes unidimensionais formado por capilares paralelos sem intersecções com uma distribuição de diâmetros. Em cada um dos poros, o transporte de massa é descrito pela Equação 2.114. Visto que existe uma distribuição de diâmetros de tubos, vai existir no meio poroso uma distribuição de velocidades e de valores do coeficiente de dispersão longitudinal. Este autor estava interessado na determinação de uma equação similar à Equação 2.114 mas válida para descrever o comportamento do meio poroso ao nível macroscópico. Desse modo, valores médios para a velocidade, concentração e coeficiente de dispersão longitudinal médios foram definidos, tomando estes em conta a distribuição dos diâmetros dos canais. Assumindo escoamento laminar e que os valores de D_L para cada um dos tubos podem ser determinados usando as expressões obtidas por Taylor (1953) para tubos cilíndricos, Carbonell (1979) determinou expressões que permitem obter o coeficiente de dispersão axial efectivo, válido à escala macroscópica, em função dos momentos estatísticos da distribuição de diâmetros dos tubos do modelo. As expressões obtidas mostram uma forte influência dos momentos de ordem superior a 2 da distribuição de diâmetros. Por outro lado, observa-se também uma dependência em Pe^2 , característica de meios porosos com uma estrutura regular.

Carbonell (1979) analisou também a situação em que os tubos são rectangulares e o escoamento é turbulento, tendo-se obtido conclusões idênticas às do caso com tubos cilíndricos, variando apenas as expressões obtidas. Os valores previstos por este modelo foram comparados com dados experimentais publicados, tendo-se observado boa

concordância. Carbonell (1979) atribui a mudança no regime de transporte de massa à mudança de regime de escoamento nos capilares. Esta conclusão implica que em regime laminar o mecanismo de transporte de massa dominante é a difusão, e em regime turbulento é a mistura do fluido.

Modelos de Tanques Agitados

Modelos de elementos simples, como são os tanques agitados, têm como objectivo a descrição do transporte de massa num meio poroso sem necessitar da descrição do campo de escoamento. Na sua forma tradicional, este tipo de modelos consiste num conjunto de tanques agitados em série, possuindo todos igual volume. Um exemplo é apresentado na Figura 2.7. Admitindo que a influência dos elementos de interligação entre os tanques agitados é desprezável, que o escoamento apenas se dá num sentido e que não ocorre reacção química, a função de transferência do sistema é dada por

$$G(s) = \frac{1}{\left(1 + \frac{\tau_T}{N_T} s\right)^{N_T}} \quad (2.120)$$

em que τ_T é o tempo de residência referido a todos os tanques agitados e N_T representa o número de tanques em série. Admitindo uma perturbação em impulso, a inversão da função de transferência permite a obtenção da distribuição de tempos de residência, na forma

$$E(t) = \frac{N_T^{N_T}}{(N_T - 1)!} \left(\frac{t}{\tau_T}\right)^{N_T - 1} \exp\left(-N_T \frac{t}{\tau_T}\right) \quad (2.121)$$

As respostas deste modelo para outros tipos de perturbações são apresentados por Wen e Fan (1975). Para valores elevados de N_T , é possível mostrar que a resposta deste modelo é equivalente à resposta obtida pelo modelo de dispersão axial. Relacionando os segundos momentos obtidos pelos dois modelos, a seguinte relação pode ser obtida entre Pe e N_T (Froment e Bischoff, 1990)

$$\frac{1}{N_T} \approx \frac{2}{Pe} \left[1 - \frac{1}{Pe} (1 - e^{-Pe})\right] \quad (2.122)$$

Para valores elevados de Pe , a seguinte expressão limite é obtida

$$N_T \approx \frac{Pe}{2} + \frac{1}{2}, Pe > 2 \quad (2.123)$$

A inclusão de reacção química e de transferência de massa entre as várias fases é simples. Extensões deste modelo foram propostas na literatura de modo a torná-lo mais adequado na descrição do comportamento de meios porosos reais (Wen e Fan, 1975; Froment e Bischoff, 1990; Sardin *et al.*, 1991), sendo algumas apresentadas de seguida.

- Possibilidade do fluido se deslocar no sentido contrário ao imposto no modelo de tanques agitados. Deste modo, é possível simular o *backflow* que pode ocorrer num meio poroso.
- Existência de zonas com diferentes características de escoamento ou de mais do que uma fase. Estas são incluídas definindo zonas com diferentes características no modelo, sendo a selecção dos elementos mais adequados função das características do sistema.

Muitos dos modelos mais comuns são descritos e analisados em detalhe por Wen e Fan (1975). De um ponto de vista geral, estes modelos envolvem a definição de constantes empíricas, relacionadas com a estrutura do meio, sendo os seus valores determinados normalmente da distribuição de tempos de residência experimental. Quase sempre se admite que o comportamento do modelo é linear, o que permite o uso da transformada de Laplace e determinar os valores dos parâmetros do modelo ajustando os momentos estatísticos obtidos experimentalmente com as expressões teóricas (Sardin *et al.*, 1991).

Wen e Fan (1975) mostraram que o modelo de tanques agitados com *backmixing* era equivalente a uma aproximação de primeira ordem do modelo de dispersão axial cuja equação de balanço material é dada pela Equação 2.114. Comparando as expressões para os dois modelos é possível obter a relação entre o número de Peclet e o número de tanques, obtida atrás através da comparação entre os segundos momentos das respostas dos dois modelos. Wang *et al.* (1998 e 1999a) aplicaram a mesma estratégia de discretização da equação de balanço material do modelo de dispersão axial para o caso em que os coeficientes de dispersão são função da posição ou quando o balanço material deve tomar em conta mais do que uma coordenada espacial. Estes autores mostraram que era possível relacionar a dispersão numérica com a dispersão física, reduzindo os erros associados à discretização da equação de balanço material. Um método semi-analítico foi desenvolvido que permite variar o incremento espacial em função das características do meio, comparando-se este favoravelmente com a solução numérica. Bagagaoglu *et al.* (2002) propuseram também modelos baseados em tanques perfeitamente agitados e outros elementos simples de fluxo.

Usando transformadas de Laplace esses autores mostraram como é possível caracterizar o transporte de massa em leitos de enchimento através da adaptação dos modelos às diferentes situações particulares de escoamento.

Avilés e LeVan (1991) usaram redes bidimensionais e tridimensionais regulares de tanques agitados na modelização da dispersão e da adsorção de um leito de enchimento. O raio dos canais é descrito através de uma distribuição de Rayleigh, impondo-se comprimento igual para todos eles. Considerou-se que o escoamento é laminar nos canais da rede e que a adsorção do soluto apenas ocorre nos nós da rede. Assumiu-se que o comportamento do meio pode ser descrito a partir da variação, no tempo, da concentração de soluto nos nós da rede, e que o tempo de residência nos canais é desprezável em relação ao dos nós. Deste modo, basta resolver as equações de balanço material nos nós da rede para descrever o sistema. Adsorção irreversível ou descrita pela isotérmica de Langmuir foram consideradas. As simulações efectuadas permitiram concluir que a forma da isotérmica influencia fortemente a curva de *breakthrough*, sendo esta cada vez mais abrupta quanto mais favorável forem as isotérmicas. No entanto, como o campo de escoamento varia espacialmente e ocorre mistura nos nós da rede, este modelo nunca prevê o surgimento de choques no perfil de concentração no interior do meio poroso.

Avilés e LeVan (1991) analisaram a influência dos efeitos de parede no comportamento do meio poroso, tendo sido consideradas duas formas diferentes de implementação. No campo de velocidades, foram atribuídos valores superiores de condutância aos canais nas paredes da rede. Por outro lado, a capacidade de adsorção dos nós na parede é reduzida para metade. Os resultados das simulações mostraram que apenas quando os dois efeitos são usados simultaneamente é que se observam efeitos importantes nas curvas de *breakthrough*. Os resultados experimentais de Oliveros e Smith (1982) confirmam também a fraca influência do efeito de parede nas curvas de *breakthrough* em leitos de enchimento, facto atribuível à dispersão lateral de *tracer* provocada pelas partículas do leito de enchimento, que tende a uniformizar o perfil de concentração radial no interior de um meio poroso.

Villermoux e Schweich (1992) e Russel e LeVan (1997) utilizaram a mesma estratégia mas recorrendo a redes de elementos bidimensionais com características auto-similares, sendo um exemplo apresentado na Figura 2.7. A forma de recorrência é definida em torno de dois parâmetros, definidos de modo a controlar a importância relativa da dispersão dinâmica, originada pelas variações no campo de escoamento através do meio, e da dispersão cinemática, originada pelos diferentes graus de mistura entre as correntes nos nós do meio. O

volume de vazios da rede era apenas o das câmaras, permitindo tomar em conta apenas estas na análise do transporte de massa. O campo de escoamento não é determinado das características do escoamento mas sim impondo um valor total do caudal. Redes de diferentes características foram considerados, tendo os resultados obtidos mostrado a influência da estrutura da rede nas curvas de *breakthrough* obtidas, podendo em alguns casos ser possível obter curvas multimodais. Russel e Levan (1997) incluíram no modelo a ocorrência de adsorção nas câmaras, tendo usado uma isotérmica de Langmuir. Os resultados obtidos encontram-se de acordo com os resultados de Avilés e LeVan (1991) para a adsorção irreversível de um componente nas câmaras.

Como as redes são auto-similares e são geradas por recorrência, como se pode observar na Figura 2.7, observa-se uma dependência das respostas obtidas no número de câmaras existentes na rede. Nessas condições, a forma de recorrência influencia também o tipo de respostas obtidas pelo modelo. Quando o número de câmaras é elevado, as diferenças entre os diferentes tipos de redes auto-similares reduz-se, dependendo sempre dos parâmetros que controlam os diferentes tipos de transporte de massa. A comparação dos valores do coeficiente de dispersão longitudinal previstos pelo modelo com valores previstos pela correlação de Langer *et al.* (1978) não é satisfatória.

Deans e Lapidus (1960) propuseram modelos de redes bidimensionais para descrever o comportamento de reactores de leito fixo. Deans e Lapidus assumiram que a rede era formada por reactores perfeitamente agitados em que o comportamento transiente destes é tomado em conta explicitamente. Os efeitos térmicos são também tomados em conta, sendo possível caracterizar o comportamento do reactor resolvendo um sistema de equações diferenciais de primeira ordem. O modelo foi desenvolvido para ser aplicado em condições de escoamento turbulento num meio poroso, não se tendo feito qualquer tentativa de tomar em conta as características da estrutura e do campo de escoamento.

Küfner e Hofmann (1990) usaram um modelo de tanques agitados e canais bidimensional, apresentado na Figura 2.7, para descrever o comportamento de um leito de enchimento. Os canais são responsáveis pelo transporte de massa por convecção, enquanto só os tanques são responsáveis pela dispersão de massa. O campo de velocidades presente no meio poroso é caracterizado por duas constantes, que traduzem a distribuição do fluido na estrutura irregular de um leito de enchimento. Estas constantes são determinadas a partir da distribuições radial de valores de porosidade e não da resolução das equações de conservação de quantidade de movimento aos canais da rede. Estes autores aplicaram o modelo à previsão da temperatura

em função da coordenada radial num reactor em que se dá uma reacção exotérmica. A comparação dos resultados previstos com dados experimentais permitiu concluir que este modelo era mais adequado que os modelos em que a estrutura do meio poroso era considerada como sendo homogénea.

Bryntesson (2002) descreveu o transporte de massa usado em cromatografia usando modelos de redes tridimensionais com um número de coordenação médio igual a 6, com câmaras com um volume não nulo interligadas por canais de volume desprezável. As distribuições das dimensões características dos elementos da rede são obtidas a partir de dados de porosimetria de mercúrio. As equações de balanço material para as câmaras assumem mistura perfeita e tomam em conta a evolução do campo de concentrações no interior do meio poroso. O modelo foi usado para determinar a difusividade transiente e de estado estacionário, tendo-se mostrado que as duas dependem das características da estrutura da rede, em particular quando as dimensões do soluto e dos elementos da rede são da mesma ordem de grandeza.

Modelos Baseados no Uso de Transformadas de Laplace

Uma característica geral destes modelos é a hipótese do escoamento nos canais se encontrar em regime laminar. Nestas condições, muitos autores assumiram que o transporte de massa nos canais pode ser descrito por uma equação de balanço material da mesma forma que a Equação 2.114. Se não ocorrer reacção química no meio poroso ou esta puder ser representada através de expressões lineares, a rede comporta-se como um sistema linear. Por aplicação da transformada de Laplace é possível determinar a função de transferência, $G(s)$, da rede, e usando a Equação 2.90 que relaciona as derivadas desta e os momentos estatísticos da $E(t)$, é possível determinar os parâmetros que caracterizam o transporte de massa.

Roux (1986), Arcangelis *et al.* (1986) e Koplik *et al.* (1988) usaram redes bidimensionais de geometria regular com número de coordenação quatro, assumindo que os nós possuem volume desprezável e actuam apenas como nós de mistura. Em cada canal o transporte de massa é descrito por uma equação de balanço material na forma

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} + v_j \frac{\partial C_j}{\partial x} = D_M \frac{\partial^2 C_j}{\partial x^2} \quad (2.124)$$

em que x representa a coordenada axial para o escoamento ao longo do canal da rede. Para $t = 0$, os canais da rede não possuem *tracer*, ou seja, $C_j(x, 0) = 0$. Condições fronteira de

Danckwerts foram impostas nos canais e o perfil de concentrações deve ser uma função contínua, consequência das equações de balanço material nos nós.

Aplicando a transformada de Laplace na Equação 2.124, a seguinte expressão geral é obtida para o perfil de concentrações no canal

$$\overline{C}_j(x,s) = A_j \exp(\alpha_j x) + B_j \exp(\beta_j x) \quad (2.125)$$

$$\alpha_j, \beta_j = \frac{v_j \pm \sqrt{v_j^2 + 4D_M s}}{2D_M} \quad (2.126)$$

As constantes podem ser avaliadas das condições fronteira e das equações de balanço material nos nós da rede, tendo-se obtido as seguintes expressões (Koplik *et al.*, 1988)

$$A_j = \frac{\overline{C}_j^O - \overline{C}_j^E \exp(\beta_j l_j)}{\exp(-\beta_j l_j) - \exp(-\alpha_j l_j)} \quad (2.127)$$

$$B_j = \frac{\overline{C}_j^E \exp(\alpha_j) - \overline{C}_j^O}{\exp(-\beta_j l_j) - \exp(-\alpha_j l_j)} \quad (2.128)$$

em que os índices E e O se referem à entrada e saída dos canais respectivamente. As expressões mostram que nos nós interiores, os perfis de concentração são dependentes uns dos outros. Nos poros de entrada no meio poroso, a perturbação de concentração pode ser imposta através de $\overline{C}_j^E$, devendo a forma funcional da perturbação ser conhecida. Com base nas expressões anteriores, duas estratégias distintas foram propostas na literatura para a determinação dos momentos da resposta da rede a uma perturbação em impulso de tracer.

Arcangelis *et al.* (1986) tomaram em conta a existência de diferentes trajectos para o fluido através da rede e o facto dos canais se disporem sequencialmente para determinar a distribuição dos tempos de passagem das partículas da rede, $P(t)$. Esta distribuição está relacionada com a distribuição dos tempos de passagem das partículas nos canais, $P_j(t)$, pela relação válida no domínio de Laplace

$$\overline{P}(s) = \sum_{j \in \Gamma} \prod \overline{P}_j(s) \quad (2.129)$$

em que $\bar{P}(s)$ e $\bar{P}_j(s)$ são as transformadas das funções $P(t)$ e $P_j(t)$ respectivamente e Γ um dos trajectos possíveis que as partículas de *tracer* podem tomar entre a entrada e a saída da rede. A expressão anterior inclui então a influência de todos os trajectos possíveis do *tracer* na rede, tomando desta forma em conta a influência do campo de escoamento e da estrutura irregular da rede no percurso destas.

As funções $\bar{P}_j(s)$ podem ser obtidas calculando o fluxo de saída de *tracer* de um canal da rede, obtendo-se a seguinte expressão

$$\bar{P}_j(s) = \bar{C}_j A_j \frac{\alpha_j - \beta_j}{\exp(-\beta_j l_j) - \exp(-\alpha_j l_j)} \quad (2.130)$$

Para o cálculo eficiente do somatório definido pela Equação 2.129, Arcangelis *et al.* (1986) propuseram um algoritmo em que as características do campo de escoamento são tomadas em conta. Após se terem determinado os valores de pressão absoluta nos nós da rede, estes são ordenados em ordem decrescente de pressão absoluta. Em cada nó é definida uma soma parcial, $\bar{S}_j$, que representa a influência dos diferentes caminhos que o *tracer* pode tomar desde a entrada até esse nó. As somas parciais são calculadas partindo da pressão mais elevada, associada ao nó que recebe fluido do exterior, para a mais pequena, associada ao nó em que o fluido apenas sai da rede, propagando-se a quantidade $\bar{S}_j$ do nó k para os nós seguintes nos quais a pressão absoluta é mais baixa, pela expressão

$$\bar{S}_j = \bar{S}_j + \bar{S}_k \bar{P}_j(s) \quad (2.131)$$

Após a lista ordenada de nós ter sido percorrida, a soma parcial à saída da rede contém a influência de todos os caminhos possíveis através da rede. Invertendo numericamente a Equação 2.129 é possível determinar a resposta do meio poroso. Arcangelis *et al.* (1986) mostraram que este método permite analisar a influência das características da rede nos valores obtidos de D_L , estando estes em acordo qualitativo com dados experimentais disponíveis.

Roux *et al.* (1986) e Koplik *et al.* (1988) propuseram uma estratégia distinta da usada por Arcangelis *et al.* (1986) para descrever o transporte de massa em redes em que os nós possuem volume nulo. Nestas condições, ao escrever as equações de balanço material para os nós da rede obtém-se um sistema de equações lineares para as transformadas das

concentrações nos nós da rede. As relações entre as transformadas das concentrações entre dois nós ligados por um canal são tomadas em conta usando a função de transferência deste, idênticas às obtidas por Arcangelis *et al.* (1986). Na saída da rede, de modo a comparar os resultados obtidos com os valores previstos pelo modelo de dispersão axial, deve-se calcular o valor do fluxo médio de *tracer* que sai da rede, o que é efectuado somando os fluxos nos canais de saída da rede.

O sistema de equações lineares no domínio de Laplace pode ser resolvido de diferentes formas. Roux *et al.* (1986) aplicaram um algoritmo baseado na matriz de transferência da rede, tendo Koplik *et al.* (1988) resolvido directamente o sistema de equações. Koplik *et al.* (1988) mostraram que o método de propagação de probabilidade de Arcangelis *et al.* (1986) é essencialmente um método de resolução do sistema de equações de balanço material aos nós da rede, em que se utiliza um algoritmo recursivo. Qualquer dos métodos requer a inversão numérica da transformada de Laplace da resposta da rede a uma perturbação de *tracer*, sendo necessário resolver vários sistemas de equações lineares para diferentes valores de s para se obterem resultados válidos.

Para simplificar a determinação dos momentos estatísticos da resposta no domínio do tempo com base na Equação 2.90, Koplik *et al.* (1988) propuseram uma estratégia diferente. Partindo da forma geral do sistema de equações no domínio de Laplace, estes autores desenvolveram cada um dos termos que o constituem numa série de potências de s , variável usada na definição da transformação de Laplace. Relacionando as potências iguais de s nos dois lados do sistema de equações, Koplik *et al.* (1988) mostraram que os momentos da resposta da rede a uma perturbação impulsional de *tracer* podiam ser obtidos invertendo-se, no domínio de Laplace, a matriz de coeficientes do sistema de equações lineares obtido escrevendo as equações de balanço material nos nós da rede.

Andrade (1993) analisou a dispersão de massa num leito de enchimento formado por esferas possuindo uma distribuição de diâmetros. O modelo de Dodds e Lloyd (1971) foi utilizado para determinar as distribuições de tamanhos dos poros do meio poroso. O método de Koplik *et al.* (1988) foi usado para determinar os valores de D_L , tendo sido analisada a influência da distribuição de diâmetros das partículas do leito de enchimento. Os resultados previstos pelo modelo comparam-se favoravelmente com os dados experimentais disponíveis para leitos de enchimento de esferas, com diferentes características estruturais.

Alvarado *et al.* (1997) estenderam a análise de Koplik *et al.* (1988) para a situação em que ocorre reacção química de primeira ordem reversível na parede dos canais. A distribuição dos diâmetros dos canais segue uma distribuição normal, possuindo todos igual comprimento. Assumiu-se escoamento laminar em todos eles. A influência da distribuição dos diâmetros dos canais e da distribuição espacial dos valores das constantes de reacção foi analisada em detalhe, de modo a estudar a influência dos diferentes mecanismos de dispersão de massa. Os resultados obtidos permitiram concluir que a reacção química influencia significativamente o transporte de massa na rede. A utilização de um modelo macroscópico unidimensional baseado num coeficiente efectivo de dispersão é adequado, desde que o mesmo seja determinado com base no modelo local e a distribuição espacial dos valores das constantes cinéticas seja homogénea. Quando essa distribuição for heterogénea, a equação efectiva é válida apenas quando a reacção química for rápida.

Alvarado *et al.* (1998) aplicaram também transformadas de Laplace na descrição do transporte de massa num meio poroso formado por blocos dispostos sequencialmente, em que os valores das constantes cinéticas são distintos. Estes autores usaram também uma equação efectiva para descrever o transporte de massa à escala macroscópica, tendo usado técnicas perturbativas para incluir a distribuição espacial de constantes cinéticas. Comparando os resultados obtidos pelas duas estratégias, Alvarado *et al.* (1998) concluíram que a equação efectiva macroscópica era válida apenas quando a reacção química é lenta, sendo então o comportamento do meio menos dependente das características locais do meio.

Novakowski e Bogan (1999) utilizaram também transformadas de Laplace na análise do transporte de massa através de uma rede de fracturas tridimensional, possuindo os elementos da rede uma orientação aleatória. As dimensões características e a orientação das fracturas seguem distribuições do tipo exponencial truncada e normal, respectivamente. A influência da reacção química, adsorção do soluto na interface entre a fase sólida e fluida, mistura imperfeita nas intersecções entre as fracturas e acumulação nestas são tomadas em conta. Deste modo, obtém-se um sistema de equações diferenciais lineares de primeira ordem. As equações de balanço material nas fracturas são resolvidas analiticamente, sendo o sistema de equações diferenciais resolvido numericamente em conjunto com a descrição do comportamento das intersecções entre as fracturas. As curvas de *breakthrough* são obtidas invertendo-se a solução desse sistema de equações, tendo sido analisada a influência da fase sólida e do tipo de estrutura da rede nos resultados do modelo.

Mukhopadhyay e Cushman (1998) usam este método para simular o transporte de um contaminante numa rede de fracturas, assumindo que estas são de secção rectangular. A influência das características da rede no transporte de massa e nos seus momentos temporais foram obtidos, tendo-se mostrado que o comportamento do meio é fortemente dependente nas características da rede. Loh e Geng (2003) analisaram a dispersão de massa em cromatografia perfusiva tendo mostrado que a conectividade joga um papel fundamental no comportamento previsto para diferentes meios cromatográficos.

Modelos Baseados em Balanços Materiais aos Elementos da Rede

Os modelos apresentados na secção anterior requerem que o escoamento seja laminar e que os termos de reacção química, quando ocorre, sejam de primeira ordem, para assegurar que o sistema seja linear e seja possível aplicar a transformação de Laplace. Apesar de na descrição do transporte de massa através de um meio poroso ser comum o uso de *tracers* não reactivos, muitas vezes as condições de escoamento são não-lineares e ocorrem reacções químicas complexas, limitando a aplicabilidade das estratégias descritas na secção anterior. Além deste problema, a inversão da transformada da curva de *breakthrough* é eficiente apenas quando a perturbação imposta na rede é simples e este se encontra longe do limiar de percolação (Sahimi e Imdakm, 1988).

Uma estratégia similar será resolver as equações de balanço material nos canais no domínio do tempo. O único problema agora reside na forma como as equações, em particular as que se encontram associadas aos canais, podem ser resolvidas no domínio do tempo.

Inicialmente, este método foi utilizado para modelizar a difusão através de um meio poroso, em particular partículas de catalisador ou em cromatografia (Sharratt e Mann, 1987; McGreavy *et al.*, 1990 e 1992; Andrade *et al.*, 1991; Arbabi e Sahimi, 1991a e 1991b; Hollewand e Gladden, 1992; Keil, 1994 e 1999; Rieckmann e Keil, 1997 e 1999, Muhammad e Kam, 1997; Mann, 1997, El-Nafaty e Mann, 1999, Armatas *et al.*, 2005). Assumindo estado estacionário, as equações de balanço material nos canais podem ser resolvidas analiticamente, desde que não ocorra reacção química ou esta seja de primeira ordem, e o perfil no seu interior definido em termos das concentrações nos nós da rede. O sistema de equações obtido é linear e possui propriedades similares aos sistemas de equações obtidos na aplicação dos modelos na modelização do escoamento em meios porosos.

Arbabi e Sahimi (1991a e 1991b) e Keil e Rieckman (1994) modelizaram o transporte de massa por difusão com reacção química, em que os poros do catalisador são bloqueados por deposição de produtos de reacção. É admitido que duas reacções químicas ocorrem simultaneamente no catalisador, sendo estas de primeira ordem, obtendo-se então sistemas de equações lineares. Como a DTP é modificada pelo bloqueamento dos poros, o processo é transiente. No entanto, admite-se que as alterações na estrutura são muito lentas em relação à reacção química e ao transporte de massa, pelo que a aproximação de estado pseudo-estacionário é aplicável. Os resultados mostram a influência da estrutura do catalisador na forma como este é desactivado e como estes poderão ser optimizados para reduzir os efeitos da desactivação por deposição de coque. Rieckmann e Keil (1997) estenderam o modelo de Keil e Rieckmann (1994) para cinéticas de qualquer tipo, tendo analisado em detalhe as melhores estratégias para a resolução dos sistemas de equações não-lineares obtidas nessa situação. Keil (1999) e Rieckmann e Keil (1999) usaram o *dusty gas model* na descrição do transporte de massa através do meio poroso. Em relação aos modelos anteriores, este modelo permite incluir a difusão superficial e o fluxo viscoso de massa na determinação do perfil de concentrações na rede. A comparação com dados experimentais mostrou que a influência da difusão superficial pode ser significativa no comportamento de catalisadores.

Gladden (1991) estudou a influência da estrutura das partículas usadas em processos de separação por modulação de pressão, *PSA*. Foram consideradas redes bidimensionais com estrutura e conectividade aleatórias, assumindo que o volume dos nós é nulo. O transporte de massa por difusão no fluido e superficial são tomados em conta explicitamente na escrita das equações de balanço material nos nós. Os resultados do modelo para a separação de hidrogénio e metano mostram que a conectividade tem uma influência marcada na selectividade da separação. O autor mostrou também que a utilização do modelo usual em que se assume que as partículas são homogéneas com forma esférica é razoável desde que os valores da difusividade efectiva e da tortuosidade sejam adequados.

Muhammad e Kam (1997) analisaram a influência das características do modelo de redes na desactivação das partículas de catalisadores usados em reactores de FCC. Por comparação com dados experimentais estes autores concluíram que modelos que tomam em conta a conectividade do meio poroso descrevem o processo de desactivação de um modo mais correcto. Mann (1997) analisa a influência da estrutura do meio poroso e da rede equivalente tomando em conta os diferentes mecanismos de desactivação que podem ser observados. Os resultados mostram que redes aleatórias em que os elementos estão interligados têm um

comportamento mais próximo do real. Estratégias para melhorar o desempenho e reduzir a desactivação do catalisador são discutidas.

El-Nafaty e Mann (1999) analisaram a influência da estrutura geométrica da rede que representa a estrutura das partículas de catalisador de FCC na eficiência da sua regeneração, tendo concluído que a estrutura tem uma forte influência no tempo necessário e na forma como ocorre. Estes autores analisaram várias estruturas, tendo concluído que o desenvolvimento de partículas com estruturas pré-definidas era vantajosa. El-Nafaty e Mann (2001) usaram informação experimental da estrutura local das partículas de catalisadores obtida fazendo cortes bidimensionais para criar a rede equivalente. Observou-se boa concordância entre as previsões do modelo de redes com dados experimentais para a regeneração do catalisador.

McGreavy *et al.* (1990 e 1992) descreveram o transporte de massa num leito de enchimento em que as partículas são porosas com base numa estratégia similar. O transporte de massa nas partículas dá-se apenas por difusão sem reacção química e é modelizado por um modelo de redes similar ao proposto por Sharratt e Mann (1987). Ao nível macroscópico uma equação efectiva para a dispersão de massa é utilizada, incluindo um termo para a transferência de massa entre fases. A equação de balanço material foi resolvida usando técnicas de colocação ortogonal, sendo as concentrações na interface calculadas a partir dos resultados obtidos no modelo de redes. Os resultados mostram que a estrutura do meio poroso influencia fortemente o comportamento macroscópico deste. Andrade *et al.* (1995) analisaram o mesmo problema mas recorrendo a transformadas de Laplace, tendo as características locais do leito de enchimento, em particular a DTP, sido determinadas usando o modelo de Dodds e Lloyd (1971). Uma estratégia similar foi usada por McGreavy *et al.* (1991) para analisar o caso em que podem ocorrer limitações difusionais devido às dimensões das moléculas do soluto, como é caso de catalisadores baseados em zeólitos. As equações de balanço material escritas reflectem as diferenças entre as difusividades das várias espécies químicas presentes no meio poroso. Um esquema reaccional envolvendo dois produtos, tendo um deles limitações difusionais, duas reacções paralelas e uma reversível de primeira ordem, foi considerado. Os resultados revelam a influência da estrutura do catalisador na selectividade do produto sem limitações difusionais, em particular a forma como este se difunde no catalisador e a influência dos poros sem saída na selectividade global.

Dadvar *et al.* (2001) e Dadvar e Sahimi (2002 e 2003) analisaram o comportamento de reactores de enzimas imobilizadas, neste caso a isomerização da glucose. Foi considerado um

esquema reaccional complexo, com diferentes mecanismos de desactivação das enzimas. A estrutura das partículas é descrita usando um modelo de redes tridimensional, tendo-se mostrado que esta influencia de um modo decisivo a desactivação e eficiência das partículas de catalisadores. Davdar e Sahimi (2003) usam os resultados do modelo de redes ao nível das partículas na descrição do comportamento de um reactor de leito fixo. A estrutura deste é caracterizada por um modelo de redes baseado no enchimento de Finney. As previsões previstas foram comparados com dados experimentais, tendo-se observado boa concordância entre ambos.

Wood e Gladden (2002a) usaram redes de elementos tridimensionais com um número de coordenação fixado para simular a ocorrência de condensação capilar no interior de um meio poroso quando ocorre simultaneamente uma reacção química de primeira ordem. O modelo toma em conta a influência da estrutura local da rede, em particular as dimensões dos seus elementos. O transporte de massa dá-se por difusão, tendo sido analisada a influência da condensação capilar na eficiência do catalisador para regime cinético e difusional, assim como da estrutura da rede. Wood *et al.* (2002b) estenderam o modelo à situação em que a mistura reaccional é multicomponente e a lei de velocidades é não linear, tendo observado que o comportamento previsto pode ser bastante diferente do previsto assumindo comportamento linear da reacção e do transporte de massa por difusão.

Suchomel *et al.* (1998a) estudaram o transporte de massa em modelos de redes bidimensionais e tridimensionais regulares de capilares, sendo o diâmetro destes descrito por distribuição lognormal. Assumiu-se que o escoamento nos canais é laminar. Nos canais o transporte de massa pode-se dar por difusão e por convecção. As equações de balanço material nos canais são resolvidas por um método iterativo, partindo-se da solução em que só ocorre transporte de massa por difusão nos canais. Como numericamente o termo associado a D_L representa uma difusão numérica, a equação completa é resolvida introduzindo difusão numérica de tal modo que esta seja equivalente aos efeitos induzidos pela dispersão de massa no perfil de concentrações no interior do canal. Os resultados obtidos mostram a influência da distribuição de diâmetros dos canais, em particular o desvio padrão, no comportamento do meio. A análise da evolução do perfil de concentrações no interior da rede após a introdução de uma perturbação de concentração mostra que a existência de canais no sentido normal ao do escoamento origina a ocorrência de caudas nas curvas de *breakthrough*. Como nestes canais o fluido se escoar lentamente, eles vão reter mais tempo o *tracer*. Esta situação não é

observada experimentalmente, tendo os autores sugerido que outras geometrias da rede poderiam diminuir este problema.

Suchomel *et al.* (1998b) utilizaram o modelo microscópico de Suchomel *et al.* (1998a) para prever o comportamento de um meio poroso em que ocorre crescimento bacteriano na interface liquido-sólido. O crescimento dos microrganismos é modelizado como uma reacção química, tendo-se considerado a lei de velocidades de Monod para o crescimento destes e o crescimento do biofilme. Foram também incluídos termos de adsorção de soluto e de erosão do biofilme. Estas equações cinéticas são acopladas directamente com as equações de transporte de massa nos canais, tendo sido usada a mesma estratégia desenvolvida por Suchomel *et al.* (1998a). Cuidado especial foi tomado na modelização do escoamento com as variações do comportamento dos canais devido ao crescimento do biofilme nos canais. Diferenças significativas foram observadas entre redes de diferentes dimensões, o que pode ser atribuído à diferente forma como os processos de modificação da estrutura da rede actuam. Os comportamentos para vários conjuntos de parâmetros cinéticos foram estudados, tendo-se obtido concordância qualitativa com resultados experimentais publicados.

Schwarz *et al.* (2001) usaram também um modelo de redes para descrever o comportamento de filtros biológicos. A influência do crescimento da biomassa, com o possível bloqueio dos poros do meio, é tomada em conta explicitamente. A evolução temporal da biomassa e das características do escoamento é estudada em função das características da rede considerada, tendo-se mostrado que em algumas situações ocorre a formação de caminhos preferenciais, reduzindo a eficiência do filtro. Os resultados previstos usando redes bidimensionais e tridimensionais são comparados entre si, tendo-se mostrado que são essencialmente iguais.

Em todos os trabalhos referidos anteriormente, assume-se que a fase sólida do meio poroso não sofre modificações. Apenas são considerados os casos em que pode ocorrer deposição de materiais no interior dos poros e em que a área de secção recta disponível para o escoamento é reduzida. No entanto, quando ocorre por exemplo a dissolução da fase sólida, as dimensões características dos poros da rede vão-se modificar. A evolução da estrutura do meio poroso é função das características locais do escoamento e das características dos processos que estão a ocorrer no meio (Sahimi *et al.*, 1990). Daccord *et al.* (1987) e Daccord (1987) analisaram a dissolução de um meio poroso por uma solução numa rede bidimensional quadrada com canais cilíndricos, em que se assume escoamento em regime laminar. Quando a solução dissolvente é introduzida pontualmente, observa-se uma forte dependência na forma da frente de dissolução na distribuição de diâmetros dos canais da rede. Hoefner e Fogler (1988)

usaram uma rede bidimensional com uma estrutura triangular para analisar a dissolução de um meio poroso. A comparação dos resultados do modelo de redes com resultados experimentais mostra que a velocidade de formação e crescimento dos canais depende não só da estrutura do meio mas também da velocidade do fluido e de reacção ao nível local.

Meyers e Liapis (1998 e 1999), Liapis *et al.* (1999) e Meyers *et al.* (2001a) aplicaram modelos de redes tridimensionais na descrição do transporte de massa em colunas de cromatografia, em particular no interior das partículas porosas. Meyers e Liapis (1998) assumiram que a estrutura porosa no interior de uma coluna de cromatografia pode ser descrita através da definição de três tipos de elementos, representando os poros entre as partículas da coluna, os macroporos e os microporos existentes no interior das partículas. Estes autores assumiram distribuições de poros gaussianas, sendo a atribuição das dimensões características dos elementos aleatória à excepção dos poros entre as partículas. Foi considerado regime laminar em todos os elementos da rede. O transporte de massa através dos poros dá-se apenas por difusão, tomando em conta os possíveis efeitos das dimensões dos poros na difusão das moléculas de soluto. O perfil de concentrações no meio poroso é obtido resolvendo o sistema de equações lineares obtido a partir dos balanços materiais escritos nos nós da rede. Meyers e Liapis (1998) analisaram a influência da conectividade dos poros, tendo concluído que quanto maior era o número de coordenação maior era velocidade extraparticular e a difusividade nos poros. Por outro lado, os resultados mostram que a velocidade do fluido nos poros é muito superior à velocidade de difusão do soluto nestes, dependendo a razão das duas velocidades também da conectividade do meio.

Meyers e Liapis (1999a) incluíram no modelo de Meyers e Liapis (1998) os efeitos das dimensões dos poros e da saturação dos sítios activos onde se dá a adsorção do soluto. Dois tipos de sítios de adsorção foram considerados. Os resultados mostram que os efeitos das dimensões das moléculas do soluto e da saturação dos sítios activos são pouco significativos quando comparados com a influência da conectividade do meio. Meyers e Liapis (2001a) analisaram também o comportamento de uma coluna de cromatografia recorrendo ao modelo de Meyers e Liapis (1998), tendo determinado a evolução da difusividade do soluto ao longo do meio poroso. Os resultados mostram que a evolução destes perfis depende das condições de fluxo exteriores às partículas, nas dimensões das partículas e na conectividade do meio poroso. Liapis *et al.* (1999) aplicaram as expressões da difusividade do soluto nos poros do suporte cromatográfico deduzidas por Meyers e Liapis (1999a) para modelizar o comportamento dinâmico de colunas baseadas em estruturas monolíticas. A influência da

conectividade e da distribuição das dimensões características dos poros do monolito foram analisadas. Os resultados obtidos mostram que o desempenho de uma coluna cromatográfica com uma estrutura monolítica era superior ao de uma coluna com um enchimento aleatório. A partir dos resultados obtidos, Liapis *et al.* (1999) sugeriram modificações da estrutura dos monolitos que permitam a optimização do seu desempenho.

Grimes *et al.* (2000) utilizaram o modelo de redes desenvolvido por Liapis *et al.* (1999) para caracterizar o comportamento de capilares em electrocromatografia. A influência da estrutura da rede foi analisada em detalhe com o objectivo de determinar as condições em que a resistência à transferência de massa é minimizada e aumentada a transferência de massa, aumentando a eficiência da coluna cromatográfica. Meyers *et al.* (2001) estudaram a separação de proteínas em colunas cromatográficas, tendo concluído que o aumento da conectividade da rede usada aumentava a eficiência. Os resultados destes autores mostram que o uso de partículas de dimensões elevadas é válido, desde que a conectividade destas seja elevada e a sua resistência ao escoamento baixa.

2.5 Conclusões

Neste capítulo foram descritos e analisados alguns dos modelos propostos na literatura para a descrição da estrutura, escoamento e transporte de massa num meio poroso. De acordo com os objectivos deste trabalho, apenas os modelos relacionados com o escoamento unifásico e o transporte de massa em que modelos de redes de elementos são utilizados foram considerados em detalhe. Modelos baseados na definição de células fundamentais são bastante usados na análise dos fenómenos de transporte através de um meio poroso (Brinkman, 1947; Happel, 1958 e 1959; Kuwabara, 1959; Hasimoto, 1959; Whitaker, 1966, 1967, 1969, 1973, 1986 e 1996; Sangani e Acrivos, 1982a, 1982b e 1988; Zick e Homsy, 1982; Koch e Brady, 1985; Quintard e Whitaker, 1993). A rápida evolução das capacidades de cálculo e das técnicas disponíveis para a caracterização local da estrutura geométrica de um meio poroso permitem já a simulação directa do escoamento no interior de um meio poroso, embora ainda só sejam aplicáveis a escoamento laminar e para sistemas de reduzidas dimensões (Manz *et al.*, 1999; Zhu *et al.* 1999; Dwyer *et al.*, 1999; Zeiser *et al.*, 2001).

Do ponto de vista geral, é possível observar que quanto mais informação realacionada com a estrutura local do meio poroso se introduz nos modelos, mais complexo se torna este. Em muitos casos deixa de ser possível a determinação de soluções analíticas, passando os valores pretendidos a ser obtidos apenas por cálculo numérico. Na revisão bibliográfica procurou-se

apresentar os vários tipos de modelos, dos mais simples para os mais complexos, o que aproximadamente representa a sua evolução histórica.

A comparação dos vários modelos existentes permitiu a obtenção de algumas conclusões importantes. Em primeiro lugar, a utilização de informação experimental da estrutura de um meio poroso evita muitas vezes a determinação de constantes empíricas. Como estas devem ser determinadas a partir de dados experimentais, a aplicabilidade desses modelos é limitada apenas a meios porosos do tipo em que foram obtidas. No entanto, a obtenção de informação experimental da estrutura porosa pode ser bastante difícil ou mesmo impossível, limitando a aplicabilidade dos modelos mais rigorosos.

Deste modo, é necessário chegar a um compromisso entre o nível de precisão requerido para a modelização dos fenómenos de transporte num meio e as capacidades computacionais e de equipamento necessário na obtenção de informação da estrutura do meio poroso. Além deste aspecto, muitas vezes o tempo para a obtenção de uma resposta é importante, sobretudo em processos industriais.

Num futuro próximo, prevê-se que os métodos experimentais para a determinação das características locais de um meio poroso evoluam, em particular técnicas não intrusivas, como por exemplo RMN ou técnicas de tomografia. Por outro lado, o aumento das capacidades de cálculo, associadas à redução dos seus custos, vai permitir a análise de meios porosos reais com dimensões representativas das condições macroscópicas. A informação experimental será usada nos modelos teóricos numa forma mais pura que nos modelos actuais, com o objectivo final de se utilizar a estrutura real do meio poroso.

3. Modelo de Redes

3.1 Introdução

Foi efectuada no Capítulo 2 a revisão bibliográfica dos modelos existentes na literatura para a descrição geométrica de um meio poroso. Estes servem de base aos vários modelos de descrição dos fenómenos de transporte em meios porosos, tendo sido referenciados em detalhe aqueles relacionados com o transporte de quantidade de movimento e de massa. Existe a necessidade de utilizar uma representação simplificada da estrutura porosa, pois somente dessa forma se torna possível a descrição do comportamento fenomenológico do meio. A selecção de um modelo é função do nível de detalhe e adequação pretendida e das características do meio poroso, como sejam a porosidade, o tipo de partículas (forma, dimensões e estrutura interna) e o tipo de meio (consolidado ou não-consolidado).

É evidente que o preço a pagar por uma descrição muito detalhada do leito, é a necessidade de se dispor de uma grande quantidade de informação sobre a estrutura geométrica e topológica deste. Em particular, o comportamento macroscópico depende do comportamento local, ao nível das partículas que o constituem (Melli *et al.*, 1992). Assim, qualquer tentativa de modelização deverá ser capaz de descrever adequadamente as condições geométricas e de transporte ao nível local. A partir desta descrição local, uma estratégia de passagem para a escala macroscópica (ou de conjunto) do meio poroso deve ser definida de modo a permitir a

determinação dos valores dos parâmetros macroscópicos como sejam, a perda de carga através do leito, o coeficiente de dispersão axial, entre outros parâmetros.

No projecto de unidades ou processos envolvendo leitos de enchimento é vulgar o uso de correlações ou equações semi-empíricas (Perry *et al.*, 1984), constituindo a equação de Ergun a mais conhecida e utilizada (ver Secção 2.3.3.3). Esta equação utiliza apenas parâmetros macroscópicos do meio, em particular a sua porosidade e o diâmetro médio das partículas. A influência das restantes características do enchimento é incluída através de duas constantes cujos valores são determinados a partir de dados experimentais obtidos para cada leito. Como nem sempre é possível obter estes dados, torna-se por vezes necessário recorrer a valores médios propostos na literatura (Ergun, 1952; MacDonald *et al.*, 1979) determinados a partir de dados provenientes de enchimentos com características muito diferentes daqueles que se encontram a ser utilizados.

Por exemplo, Comiti e Renaud (1989) comparam a queda de pressão em enchimentos de esferas e de partículas de formato paralelepipedico (placas), determinando as constantes da equação de Ergun. Foi observado que quanto menor fosse a razão entre as dimensões características das placas maior era a diferença entre a constante B assim determinada e o valor recomendado de 1.8, tendo sido este o valor obtido no caso de partículas esféricas. Os autores atribuíram estas diferenças à influência da estrutura do leito no escoamento através do leito. Como é de se esperar uma tendência das partículas mais paralelepipedicas se alinharem no sentido normal ao escoamento, este alinhamento provoca a ocorrência de fluxo do tipo jacto entre camadas de partículas, com a ocorrência de maiores perdas de energia cinética, resultando no aumento do valor da constante B que se encontra associada a este tipo de perdas de energia.

Seguin *et al.* (1998a e 1998b) estudaram o mesmo tipo de enchimentos com o objectivo de analisar as transições entre regimes de escoamento. Os enchimentos de placas foram construídos com cuidado de modo a ser possível determinar a influência do sentido de escoamento em relação à orientação das placas. As duas situações analisadas são apresentadas na Figura 3.1. Seguin *et al.* (1998a) concluíram que a transição entre regime laminar e não-linear depende fortemente do sentido de escoamento para as placas com valores baixos da razão entre as dimensões características, sendo muito semelhante entre as partículas esféricas e as partículas com carácter mais cúbico (razão entre as dimensões características próxima da unidade). Os autores atribuíram esta diferença de comportamento à maior anisotropia do enchimento com partículas mais paralelepipedicas.

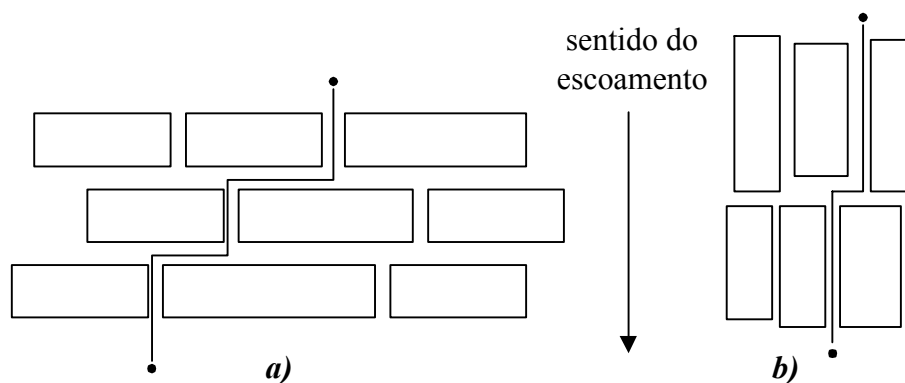


Figura 3.1 Trajecto de uma partícula de fluido através dos dois tipos de leitos de placas estudados por Seguin et al. (1998a e 1998b): a) orientação das placas perpendicular ao sentido de escoamento; b) orientação das placas paralela ao sentido de escoamento.

Estes exemplos tornam claro que a equação de Ergun ou qualquer outra baseada apenas em valores de parâmetros macroscópicos é incapaz de prever a ocorrência de situações como as que foram descritas. Apenas através da inclusão das características locais do enchimento será possível discriminar entre as duas situações apresentadas na Figura 3.1.

Assim o desenvolvimento de um modelo de descrição da estrutura de vazios de um meio poroso deverá apresentar as características seguintes.

- Fornecer uma descrição idealizada mas ao mesmo tempo razoável, que inclua todos os aspectos essenciais da estrutura do meio poroso em estudo. A descrição dos fenómenos de transporte é simplificada, mas deve ser adequada do ponto de vista matemático e físico.
- Permitir o cálculo e a previsão dos coeficientes de transporte e outras propriedades dinâmicas importantes num leito de enchimento, a partir das características morfológicas e físico-químicas dos componentes da matriz porosa.

Maior rigor a nível local implica maior complexidade na modelização matemática, tornando-se impossível a obtenção de soluções analíticas mesmo em situações limites, sendo necessário recorrer a soluções numéricas na determinação dos valores dos parâmetros pretendidos. No entanto, o uso de modelos mais rigorosos a nível local apresenta diversas vantagens.

- Permite a optimização e um controle efectivo de operação das unidades em que está inserido o meio poroso. Problemas de operação podem ser identificados rapidamente e corrigidos de uma forma eficiente, possibilitando a manutenção preventiva do processo, detectando e corrigindo problemas antes dos mesmos serem significativos.

- Permite projectar a unidade directamente sem ter de construir unidades piloto para assegurar *scale-up* adequado, com evidentes ganhos económicos e de tempo. Além disso, novas estruturas do enchimento, podem ser estudadas e analisadas com um bom grau de certeza, reduzindo a necessidade de dados experimentais específicos e de determinação demorada.

Por outro lado, algumas condições limitam o desenvolvimento de um modelo. Este deve ser coerente e consistente, assim como fisicamente válido e adequado à situação em estudo. Os seus parâmetros devem ser determináveis a partir das características do meio e devem possuir um significado físico rigoroso. Deve-se ainda tomar em atenção as limitações computacionais inerentes ao uso de modelos muito complexos e rigorosos, mas proibitivos em termos de complexidade de implementação, ou do volume excessivo de cálculos que se torna necessário efectuar. O tempo necessário para a obtenção dos valores dos parâmetros pode ser também determinante, em particular na análise de condições operatórias de unidades deste tipo. É de se esperar no futuro a redução destas restrições devido à progressiva diminuição dos custos e ao aumento da capacidade de cálculo.

Actualmente, é ainda necessário recorrer a modelos simplificados da estrutura da matriz porosa, sendo possível definir duas situações limites. Numa delas, o meio pode ser considerado como um *continuum*, ou seja, pode ser visto como sendo constituído por uma só fase com características homogéneas. As características da matriz porosa são incluídas nestes modelos através de parâmetros médios (ao nível macroscópico). Esta forma de modelização revela-se muito útil, devido à grande quantidade de estudos e resultados disponíveis na literatura, sendo a forma mais comum de modelizar reactores de leito fixo (Froment e Bischoff, 1992). Apesar destas vantagens, este tipo de modelos não permite uma descrição adequada de meios anisotrópicos. A outra situação limite utiliza a estrutura real do meio poroso, obtida por exemplo através de métodos de tomografia seriada, análise de imagem, e reconstrução tri-dimensional (Mata, 1998). Esta é a solução óptima pois não há perda de informação na passagem para o modelo. No entanto, as dificuldades experimentais na determinação dos vazios do meio e na descrição da fronteira sólido-fluido, de modo a ser possível a definição das condições fronteira para as equações de balanço, tornam este método de aplicação difícil.

Então torna-se necessário seleccionar um modelo intermédio aos dois casos limites. O modelo deve tomar em atenção a estrutura local do meio, o que pode ser efectuado através da

combinação de elementos simples mas geometricamente análogos aos que são encontrados na prática, permitindo a descrição adequada dos fenómenos de transporte que ocorrem neles.

3.2 Escolha do Modelo

Dos vários modelos de descrição de um meio poroso descritos no Capítulo 2, foi seleccionado um modelo de redes. Como foi já referido, os meios porosos podem ser descritos como sendo constituídos por uma matriz sólida que rodeia espaço vazio. Este, por sua vez, é geralmente composto por poros grandes ligados entre si por poros de tamanho inferior. Por exemplo, o leito usado por Spicka *et al.* (1999) possui uma estrutura bidimensional e insere-se neste tipo de representação, como se pode observar no esquema da Figura 3.2a., onde é possível distinguir a existência de poros de dois tamanhos. Na Figura 3.2b mostra-se uma representação esquemática simplificada representativa da estrutura porosa. Os poros de maior tamanho, denominados por *câmaras*, tomam uma forma esférica e os poros de menor tamanho, denominados por *canais*, uma forma cilíndrica, resultando no modelo de redes representado na Figura 3.2c.

O mesmo tipo de analogia pode ser aplicado para a grande maioria dos enchimentos usados na prática (Van Brakel, 1975) nomeadamente leitos tridimensionais de partículas esféricas ou cuja razão entre as respectivas dimensões características seja próxima da unidade.

Por outro lado, a estrutura do leito pode ser tal que este tipo de modelo não seja o adequado. Por exemplo, no caso de leitos de fibras, torna-se difícil definir os elementos da rede, sendo mais adequado o uso de modelos de células que consideram explicitamente a estrutura das fibras. É também reconhecido (Mauret e Renaud, 1997) que os modelos de redes não são válidos para valores de porosidade elevados. Existem ainda alguns casos em que a estrutura porosa é muito regular, permitindo o uso de modelos próprios. São exemplo disto as estruturas monolíticas, como as usadas nos conversores catalíticos dos automóveis, em que a estrutura porosa é constituída por canais paralelos que praticamente não se cruzam entre si, não justificando portanto um modelo deste tipo (Irlandoust e Anderson, 1988).

Em geral a estrutura dos leitos de enchimento é periódica e regular, permitindo a descrição dos fenómenos de transporte no leito, recorrendo apenas a uma célula representativa do enchimento, que por repetição, forma o leito de enchimento com as características pretendidas (Coulaud *et al.*, 1988; Edwards *et al.*, 1990; Adler, 1994; Lee e Yang., 1997; Martin *et al.*, 1998). A simetria desta célula permite simplificar a descrição dos fenómenos de transporte na

mesma, em particular o seu comportamento hidrodinâmico, tornando-se mesmo possível obter soluções analíticas se os termos viscosos forem dominantes, caso em que é possível desprezar os efeitos inerciais do escoamento, reduzindo-se a equação de Navier-Stokes à equação de Stokes (Koplik, 1982; Sangani e Acrivos, 1982a e 1982b; Zick e Homsy, 1982). Quando esta hipótese deixa de ser válida, o que é particularmente importante em regime turbulento, é necessário recorrer a soluções numéricas.

Outro aspecto que ressalta do esquema da Figura 3.2 é que é possível admitir que a queda de pressão associada à mistura do fluido em cada câmara é desprezável relativamente à queda de pressão associada a cada canal, estando os efeitos de entrada e saída do fluido nos canais associados a estes.

Torna-se assim claro que o meio poroso pode ser representado através de redes de objectos de geometria simples que possibilitem a caracterização adequada da estrutura porosa e cujo comportamento fenomenológico se possa representar de forma simples, ou se possível com recurso a soluções analíticas, nomeadamente:

- as câmaras são representadas por esferas caracterizadas pelo diâmetro D_i ;
- os canais são representados por cilindros caracterizados pelo comprimento l_j e o diâmetro d_j ;
- as câmaras e canais são associados em *células fundamentais*, que por repetição formam uma parte representativa ou a totalidade do leito;
- leitos com enchimentos de partículas de tamanho não uniforme, isto é com uma distribuição de tamanhos de partículas, dão origem a redes com distribuições de tamanhos dos elementos característicos de cada rede, nomeadamente: $f_D(D_i)$, $f_d(d_j)$ e $f_l(l_j)$.

Em geral a estrutura do espaço poroso de leitos de enchimento pode ser dividida em duas partes sendo cada um delas análoga a um dos tipos de elementos seleccionados. A escolha destes elementos simples permite simular diferentes tipos de estruturas alterando a forma como os elementos se interligam entre si, ou ainda a forma como são calculados os valores dos parâmetros que os descrevem, recorrendo a soluções analíticas simples para a descrição do comportamento dos elementos da rede.

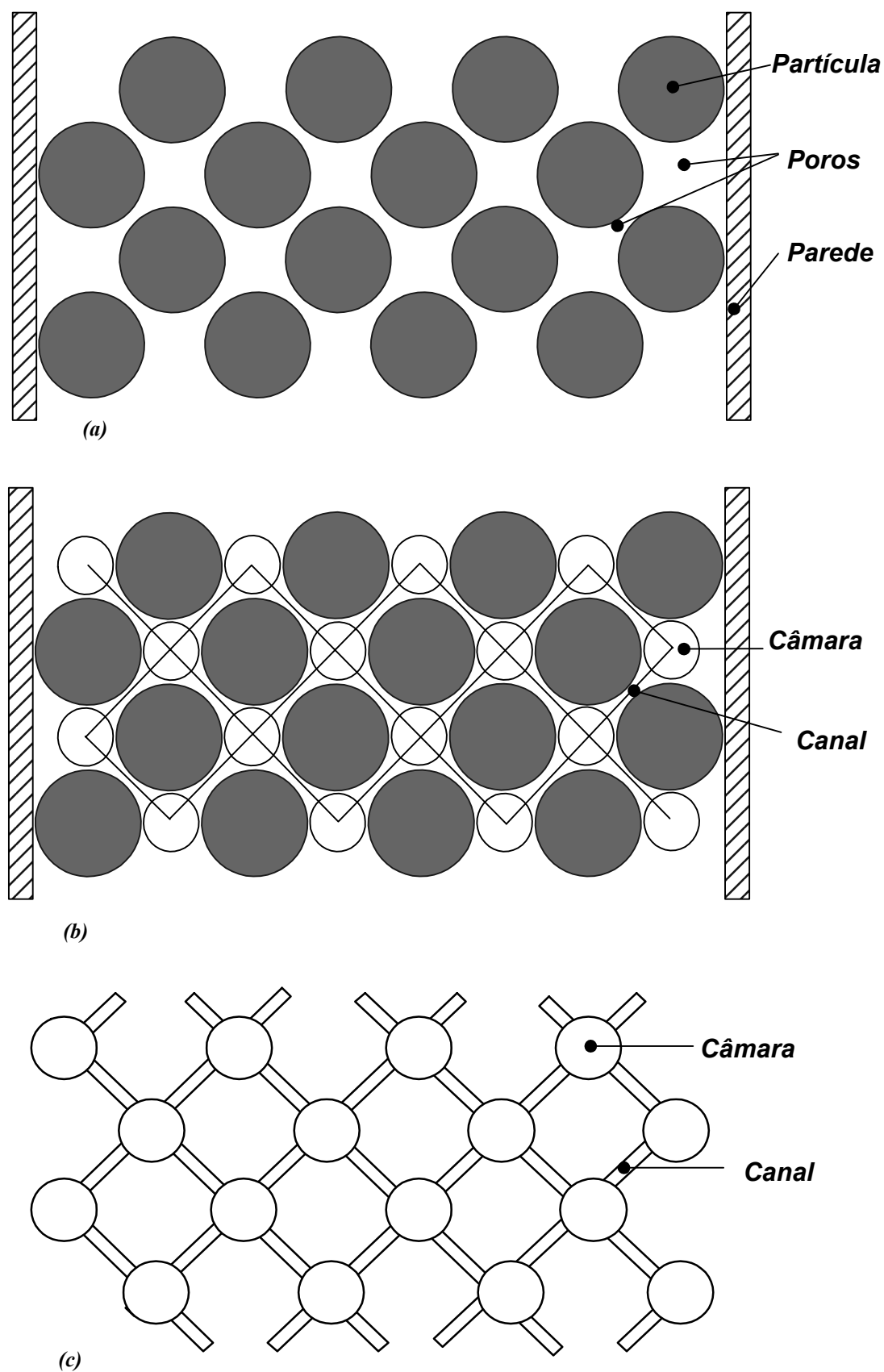


Figura 3.2 Leito bidimensional: a) esquema; b) esquema mostrando a rede de câmaras e canais; c) modelo de rede de poros.

Como as características da rede são descritas por funções densidade de probabilidade, torna-se necessário o uso de métodos de Monte-Carlo no cálculo dos valores dos parâmetros macroscópicos importantes. Isto implica a realização de várias simulações de forma a determinar um valor médio significativo. Por outro lado, as dimensões da rede devem ser tais que os resultados representem uma amostra significativa do meio poroso equivalente, dependendo as dimensões desta das características do meio e dos fenómenos de transporte descritos. No entanto, com o aumento actual das capacidades de cálculo, estes problemas têm tendência a ser cada vez menos significativos.

De seguida é feita a descrição do modelo de redes. A estrutura da rede é determinada a partir de funções distribuição para os elementos da rede, sendo impostas algumas condições na determinação da estrutura final.

3.3 Descrição do Modelo de Redes

O modelo de redes utilizado neste trabalho foi implementado num *package* de *software* que pretende modelizar e descrever os fenómenos de transporte num leito de enchimento. Apesar do gerador da rede ser independente dos restantes blocos, a interligação entre os vários blocos influenciou a implementação do mesmo.

Os dados necessários para a geração da rede são descritos a seguir.

- Características do leito de enchimento do qual vamos criar o análogo. São requeridos em particular os valores da porosidade total e da distribuição de tamanhos das partículas, sendo estes dados usados na determinação dos parâmetros de descrição dos elementos da rede, a descrever na Secção 3.4.9.
- Condições de geração da rede, que vão permitir a obtenção de redes com diferentes características. Com a imposição das mesmas pretende-se simplificar os procedimentos de geração da rede e de passagem da informação entre os vários blocos do programa que descrevem diferentes fenómenos de transporte no leito.

Todos os dados referidos atrás são interdependentes entre si e dependentes, em última análise, da informação disponível sobre o leito de enchimento que se pretende estudar.

A rede é gerada por repetição nas duas direcções cartesianas do espaço de uma célula fundamental, formada por uma câmara e três canais como se mostra na Figura 3.3. Deste

modo, seis é o número máximo de canais que podem estar associados a uma câmara, equivalente a um número de coordenação da câmara máximo $C_i = 6$.

A definição desta célula fundamental permite simplificar a atribuição e armazenagem dos valores dos vários elementos durante a geração da rede, possibilitando a descrição de diferentes tipos de leitos através da imposição de diferentes condições de geração. A atribuição dos valores dos parâmetros dos elementos da rede depende apenas das células contíguas, apesar de o processo de determinação dos parâmetros da rede se basear em parâmetros macroscópicos, como por exemplo a porosidade.

Durante o processo de atribuição de valores, são tomadas em consideração as características morfológicas dos elementos em redor dessa célula, mas apenas das células contíguas, ou seja, interligadas entre si por um canal da célula fundamental. Dessa forma, a geração da rede é um processo local, apesar de o processo de determinação dos parâmetros da rede necessitar de dados macroscópicos de modo a obter-se um análogo adequado do enchimento em estudo.

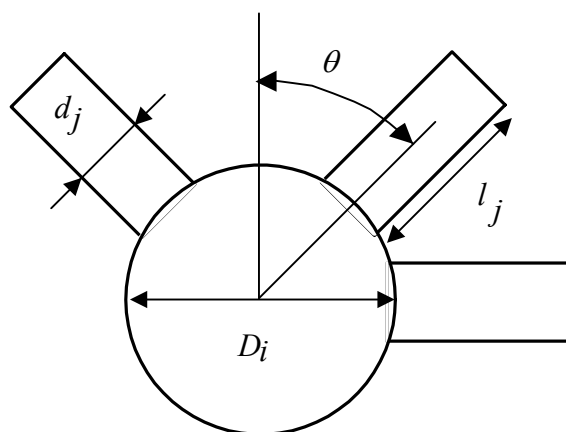


Figura 3.3 Célula fundamental do modelo de redes.

A ligação de um conjunto de células fundamentais nas duas direcções cartesianas, xx e yy , pode gerar redes de câmaras e canais bidimensionais com diferentes características como se mostra na Figura 3.4.

De modo a se definir o sentido no qual se exerce o gradiente de pressões, tanto o imposto como o resultante da influência da gravidade, importante na descrição do escoamento através da rede, consideramos que o sentido principal de escoamento é segundo o eixo dos xx , de acordo com a Figura 3.4. Deste modo, os canais que se encontram alinhados perpendicularmente a este eixo são designados por canais horizontais, sendo os outros

designados por canais oblíquos, podendo a rede incluir (Figura 3.4a e Figura 3.4b) ou não incluir (Figura 3.4c e Figura 3.4d) canais horizontais.

Nos lados da rede, duas situações diferentes podem ser definidas. O primeiro caso (Figura 3.4a e Figura 3.4c) simula a existência de fronteiras periódicas, isto é, o caso em que a rede é considerada como uma parte representativa de uma estrutura infinita. Aqui os canais fronteiros de um lado da rede encontram-se associados à câmara no outro lado da rede, isto é o caudal que sai de um dos lados da rede por um canal é o caudal de entrada na câmara do outro lado da rede, segundo a direcção do eixo dos yy . O segundo caso (Figura 3.4b e Figura 3.4d) simula a existência das paredes do leito, sendo os canais fronteiros dos lados da rede removidos ou não.

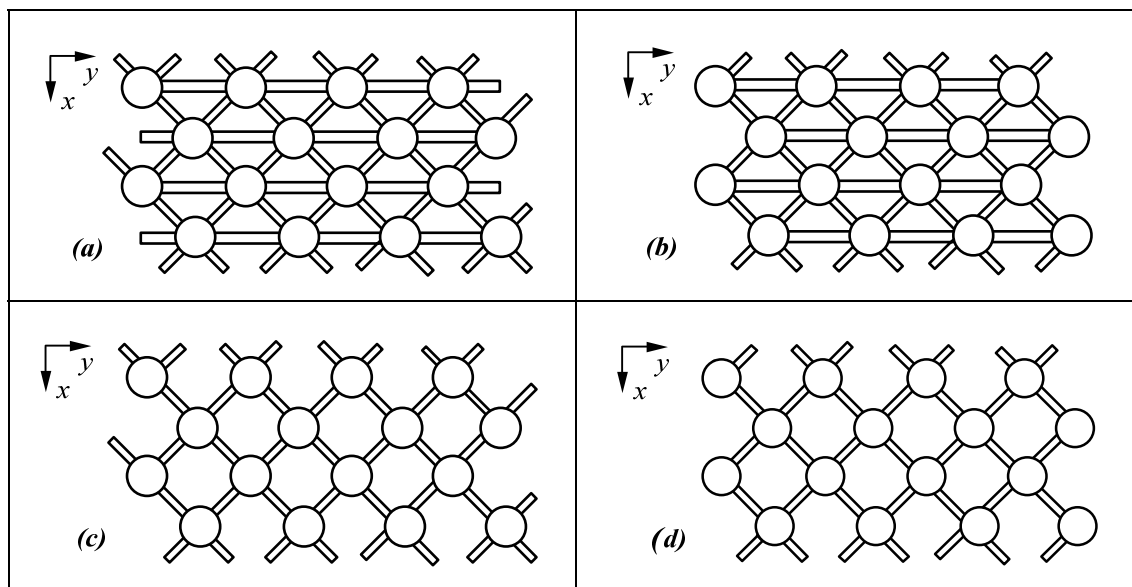


Figura 3.4 Tipos de redes fundamentais que podem ser gerados: a) com canais horizontais e com fronteiras periódicas; b) com canais horizontais e sem fronteiras periódicas; c) sem canais horizontais e com fronteiras periódicas; d) sem canais horizontais e sem fronteiras periódicas.

Na Tabela 3.1 é apresentada a nomenclatura usada pelo gerador de rede para descrever cada uma das redes fundamentais. O primeiro índice refere-se ao tipo de fronteiras da rede, 1 se são periódicas ou 0 se não são periódicas, e o segundo índice refere-se aos canais horizontais, 1 se são definidos em cada uma das câmaras da rede e 0 se estes não são definidos.

Algumas diferenças importantes podem ser observadas quando se comparam as quatro redes fundamentais apresentadas na Figura 3.4. Comparando a estrutura das linhas dos canais oblíquos no topo da rede (de entrada de fluido nesta), como por exemplo entre as rede tipo 11 e 01, observa-se que para redes sem fronteiras periódicas no lado esquerdo um dos canais não é considerado. Se os dois canais oblíquos fossem definidos, iria existir uma zona da rede em

que não existem canais, resultando em condições geométricas diferentes para a entrada do fluido. Como não é de se esperar que esta situação ocorra num meio poroso real, removeu-se esse canal oblíquo para redes sem fronteiras periódicas.

Tabela 3.1 Nomenclatura usada para descrever as redes fundamentais geradas

Tipo de rede	Fronteiras periódicas	Canais Horizontais
11	Existem	Existem
10	Existem	Não existem
01	Não existem	Existem
00	Não existem	Não existem

Para a linha do fundo o mesmo procedimento deverá ser seguido. No entanto, devido ao posicionamento relativo entre as linhas de câmaras, a posição onde o canal não é considerado depende de N_x ser par ou ímpar. Nos exemplos apresentados na Figura 3.4, como N_x é par, a remoção foi efectuada no canto inferior direito. Se N_x for ímpar, a remoção é efectuada no canto inferior esquerdo.

É necessário definir para todos os canais e câmaras da rede o valor do diâmetro da câmara, do diâmetro e comprimento dos canais, assim como os ângulos que os canais fazem com a vertical. O gerador deverá ser flexível de modo a permitir a criação de redes com diferentes características, existindo no entanto um conjunto de condições que devem ser respeitadas, sendo as mesmas apresentadas de seguida.

- Os diâmetros das câmaras, D_i , e dos canais, d_j , são descritos por funções densidade de probabilidade, $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$, respectivamente, que dependem das características do meio poroso em estudo. As funções densidade de probabilidade $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ são descritas por funções do mesmo tipo, com valores dos parâmetros estatísticos diferentes, podendo esta hipótese ser relaxada no futuro.
- O diâmetro de cada canal deve ser menor que os diâmetros das câmaras associadas, isto é, das câmaras ligadas a esse canal.

- O ângulo, θ , que os canais oblíquos fazem com o eixo dos xx é fixo como se mostra na Figura 3.3, podendo variar no intervalo entre 0 e $\pi/2$. Esta hipótese implica uma rede regular, sendo possível obter uma malha rectangular regular, ligando os centros das câmaras da rede. A variação de θ permite alterar a razão entre as duas dimensões principais do leito e alterar a tortuosidade da rede, permitindo descrever diferentes estruturas de enchimento.
- A distância entre os centros de duas câmaras é constante tanto na direcção vertical como horizontal. Este facto é uma consequência do uso de um valor constante de θ . Esta característica simplifica a geração da rede, em particular a obtenção da função de distribuição dos comprimentos dos canais, $f_l(l_j)$, pois se θ e a função de distribuição de diâmetros das câmaras, $f_D(D_i)$, forem conhecidos, basta apenas saber a distância entre centros de câmaras para se poder determinar $f_l(l_j)$.
- A junção de uma câmara (esfera) com um canal (cilindro) provoca o aparecimento de uma calote como se mostra na Figura 3.5. No cálculo do volume total de vazios da rede, o volume destas calotes deve ser contabilizado apenas uma vez, de forma a que seja obtido o volume total dos vazios da rede. A correcção de volume pode ser efectuada tanto nas câmaras como nos canais, tendo no caso presente sido o volume respectivo associado às câmaras, ou seja, subtraído ao volume dos canais. A espessura da calote, h_{ij} , é dada por (ver apêndice A.5)

$$h_{ij} = \frac{D_i}{2} \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{d_j}{D_i} \right)^2} \right] \quad (3.1)$$

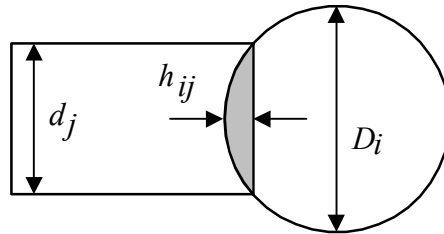


Figura 3.5 Esquema da calote formada na junção entre uma câmara e um canal.

Outras condições opcionais podem ser impostas ao modelo de modo a estender a sua gama de aplicabilidade, das quais se descrevem algumas a seguir.

- Como foi definido o número de coordenação, C_i , representa o número de canais ligados a uma câmara. O valor deste parâmetro é controlado primariamente pela existência ou não de canais horizontais e de fronteiras periódicas ou não. Nos casos em que existem fronteiras periódicas, C_i toma os valores de 6 ou 4, conforme existem ou não canais horizontais. Nos casos em que não há fronteiras periódicas, C_i toma valores semelhantes no interior da rede, tomando valores inferiores, entre 3 e 2, nas câmaras fronteiras. O número de coordenação médio da rede, C , pode ser variado de modo a permitir uma modelização mais adequada dos fenómenos de transporte radiais, isto é, no sentido perpendicular ao sentido principal de escoamento. Isto pode ser feito através da remoção aleatória de câmaras e canais, obtendo-se assim uma distribuição de números de coordenação na rede, passando C a representar um valor médio do número de coordenação, sendo este valor definido *à priori*. A única condição imposta ao gerador do modelo de redes é que cada câmara deve ter pelo menos um canal de entrada e um de saída, de forma a evitar a formação de uma linha de câmaras sem canais de entrada ou saída, o que implicaria um fluxo nulo através da rede. Esta extensão permite analisar de uma forma mais detalhada a influência do número de coordenação no comportamento da rede, que pode ser significativo para sistemas próximos do limiar de percolação (Sahimi, 1995).
- Por vezes é necessário determinar o valor da permeabilidade da rede, por exemplo para efeitos de comparação com o valor experimental do meio poroso em estudo. Para fazer este cálculo torna-se necessário conhecer um valor para a espessura da rede, o qual não é usado directamente no modelo de redes, por esta ser bidimensional. Dado que não é possível definir um valor da espessura para uma estrutura bidimensional e não ser necessário conhecer um valor para descrevermos os fenómenos de transporte através da rede, a determinação da espessura da rede deve ser efectuada em conjunto com a determinação da distribuição de comprimentos dos canais, sendo necessário impor duas condições. Uma condição a impor é a da igualdade entre a porosidade do leito e a porosidade da rede. Para a outra condição necessária é possível usar uma gama mais alargada de opções, tendo sido analisadas duas possibilidades. A forma mais simples e conveniente de o fazer é definir um valor médio constante para o comprimento dos canais, baseado nas características do enchimento. Por exemplo, de acordo com Payatakes *et al.* (1973a) se a distribuição de tamanhos de partículas tiver um valor baixo do desvio padrão, é válido admitir que o comprimento médio dos canais é aproximadamente igual ao

diâmetro médio das partículas. Outra possibilidade é impor a igualdade dos valores da área interfacial entre o leito e a rede.

- Uma das condições já impostas no modelo é a de o diâmetro de cada canal ser menor do que os diâmetros das câmaras a ele associadas. No entanto, se as funções de distribuição dos diâmetros de câmaras e canais se sobrepõem, os canais podem-se intercruzar na ligação à câmara e então este efeito deve ser tomado em conta no cálculo do volume. Alternativamente, pode ser imposta a condição de que os canais não se podem intercruzar à entrada da câmara. A aplicação desta condição pode ser muito restritiva para situações em que existam canais horizontais na rede ou em que as distribuições de diâmetros possuam valores médios muito próximos ou valores do desvio padrão muito elevados. A aplicação destas condições para o tamanho dos canais implica que a geração da rede nunca é completamente aleatória, podendo ocorrer uma tendência para as câmaras de diâmetro pequeno, quando comparadas com o valor médio D , estarem associadas a canais com diâmetros menores.

Por outro lado, algumas condições impostas ao modelo podem ser relaxadas de modo a simplificar a geração da rede.

- O volume das calotes esféricas provocadas pela entrada dos canais nas câmaras da rede pode ser desprezado, nos casos em que as distribuições de diâmetros de câmaras e canais forem suficientemente afastadas, isto é, o diâmetro médio das câmaras seja muito maior que o diâmetro médio dos canais.
- Na maioria dos modelos de redes apresentados na literatura o volume das câmaras é desprezado, considerando que estas actuam apenas como nós de mistura (Sahimi, 1992). Esta hipótese implica definir $D_i = 0$ para todas as câmaras, deixando de ser necessário aplicar algumas das condições apresentadas atrás e simplificando desse modo toda a sequência de cálculos, visto que a rede passa a ter somente canais.
- Outra forma de simplificar o processo de criação da rede passa por considerar que os diâmetros das câmaras e canais tomam um valor constante, dizendo-se então que possuem uma *distribuição pontual*. Não são então aplicados os critérios de não intersecção entre as câmaras e os canais, e quando as fronteiras são periódicas, a rede é designada por *rede uniforme*, pois não há diferenças na estrutura local da mesma.

Estas duas últimas simplificações dão origem a dois casos limites para a estrutura da rede, que podem servir para verificar os resultados da modelização dos fenómenos de transporte em meios porosos, por comparação com resultados teóricos conhecidos.

3.4 Descrição do Algoritmo de Geração da Rede

No início do processo de geração da rede é necessário fornecer os dados e a informação a seguir detalhada.

- O número de linhas, N_x , e o número de colunas, N_y , da rede.
- A função densidade de probabilidade dos diâmetros das câmaras, $f_D(D_i)$, e dos canais, $f_d(d_j)$. Esta pode ser definida como sendo uma distribuição pontual, onde apenas o valor médio de cada uma das distribuições é necessário. Alternativamente, podem ser usadas funções não-pontuais, através da geração automática de funções de distribuição do tipo Normal ou ULLN, descritas no Apêndice A.4. O gerador inclui ainda o caso em que $D_i = 0$. Na Secção 3.5 é descrito um modelo geométrico baseado em enchimentos regulares de esferas que permite a determinação dos parâmetros de $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ para um leito de enchimento partindo da distribuição de diâmetros característicos das partículas e da porosidade do meio poroso.
- O valor da porosidade da rede, ε , que deve ser igual à do enchimento.
- Existência ou não de canais horizontais.
- Tipo de fronteiras a usar, periódicas ou não periódicas.
- Valor do ângulo que os canais oblíquos fazem com a vertical, θ .
- Indicação de se os volumes das calotes vão ser ou não incluídos no cálculo do volume de vazios total da rede.
- Estratégia de determinação da espessura da rede e da distribuição de comprimentos dos canais. Os dados necessários para cada um dos casos deverão ser também fornecidos ao gerador.

- Se vai ocorrer ou não a remoção dos canais e/ou câmaras da rede, de modo a variar o número de coordenação médio da rede. Em caso afirmativo, é definido nos dados iniciais do gerador a percentagem de canais a remover ou o valor final de C conforme a estratégia de remoção pretendida.

O processo de geração da rede é sequencial, descrevendo-se de seguida cada um dos passos em detalhe. O diagrama de fluxo do gerador da rede, em que é possível encontrar as relações entre os diferentes blocos da rede, é apresentado na Secção 3.4.9.

3.4.1 Cálculo do Número de Câmaras e Canais

O tamanho da rede é fixado através do número de linhas, N_x , e do número de colunas, N_y . O número de câmaras, N_{Cam} , e o número de canais, N_{Can} , dependem do tipo de rede pretendido, assim como o número de coordenação médio, C , e o número de calotes esféricas, N_{Cal} .

No caso em que não se procede à remoção de câmaras para ajustar o número de coordenação, o número de câmaras da rede é dado por

$$N_{Cam} = N_x N_y \quad (3.2)$$

As expressões necessárias para determinar os valores de N_{Can} , N_{Cal} e C para cada tipo de rede — com ou sem fronteiras periódicas, com ou sem canais horizontais — são apresentadas na Tabela 3.2. No apêndice A.3 é descrito em detalhe como é que estas são determinadas com base nas dimensões da rede e nas hipóteses consideradas para a sua estrutura. Para facilitar a implementação do gerador, os canais são divididos em dois tipos, canais oblíquos e canais horizontais, sendo as expressões para a determinação do respectivo número, N_{Can}^O e N_{Can}^H , apresentadas em separado, sendo $N_{Can} = N_{Can}^O + N_{Can}^H$.

Tabela 3.2 Expressões para o cálculo do número de canais, $N_{Can} = N_{Can}^O + N_{Can}^H$, do número de calotes, N_{Cal} , e do número de coordenação médio, C .

Fronteiras Periódicas	Canais Horizontais	N_{Can}^O	N_{Can}^H	N_{Cal}	C
Sim	Sim	$2N_x N_y + 2N_y$	$N_x N_y$	$6N_x N_y - 2N_x + 1$	6
Sim	Não	$2N_x N_y + 2N_y$	0	$4N_x N_y - N_x + 1$	4
Não	Sim	$(2N_y - 1)(N_x + 1)$	$N_x(N_y - 1)$	$6N_x N_y - 4N_x$	$6 - \frac{4}{N_y}$
Não	Não	$(2N_y - 1)(N_x + 1)$	0	$4N_x N_y - 2N_x$	$4 - \frac{2}{N_y}$

Os valores de C apresentados na Tabela 3.2 são a média pesada dos valores de C_i , números de coordenação das câmaras da rede. Para determinar o valor desta média, as câmaras são separadas em classes, conforme o valor de C_i associado a cada uma delas. Na determinação dos valores de C_i consideram-se todos os canais associados a uma câmara, independentemente do comportamento físico destes, em particular o sentido de escoamento. O valor de C é determinado com base na expressão

$$C = \frac{\sum_{k=1}^6 N_{Ck} C_k}{N_{Cam}} \quad (3.3)$$

em que N_{Ck} representa o número de canais com o número de coordenação C_k que existem na rede.

A determinação de N_{Cal} toma em atenção a possível estrutura da rede, de acordo com a Figura 3.4. Os canais que possuem apenas uma câmara associada, em particular os canais oblíquos associados às linhas de topo e do fundo da rede, definem apenas uma calote. Esta situação ocorre também quando se definem fronteiras periódicas. Apesar destes canais se encontrarem associados às câmaras do outro lado da rede, assume-se que essa relação apenas se sente ao nível da descrição do escoamento e do transporte de massa através desses canais, e não em termos geométricos.

Os valores apresentados anteriormente são válidos desde que não ocorra remoção de câmaras nem de canais na rede, o que implica que a distribuição espacial dos números de coordenação na rede não é modificada. A estratégia para a determinação de N_{Can} , N_{Can} e N_{Cal} nessas condições é discutida em detalhe no Apêndice A.3.

3.4.2 Atribuição dos Diâmetros das Câmaras

A geração da rede inicia-se pela atribuição aleatória dos diâmetros das câmaras, $D_i, i=1, \dots, N_{Cam}$, a partir da função distribuição de tamanho de câmaras, $f_D(D_i)$, sem qualquer tipo de restrição. Exceptua-se o caso em que $D_i = 0$ ou o caso de uma rede uniforme em que as câmaras têm todas o mesmo diâmetro.

3.4.3 Atribuição dos Diâmetros dos Canais

De seguida, é efectuada a atribuição dos valores dos diâmetros dos canais, d_j , $j = 1, \dots, N_{Can}$, usando os valores dos diâmetros das câmaras já determinados, na aplicação dos critérios que restringem os valores d_j associados a uma câmara.

O tipo de condições impostas e a distribuição dos D_i vai influenciar a forma como a atribuição dos d_j é efectuada. Novamente, nos casos em que $D_i = 0$ ou a rede é uniforme não se aplica nenhuma destas condições.

O processo de atribuição de valores aos diâmetros dos canais começa pela condição de que o diâmetro do canal não pode ser maior que o diâmetro das câmaras a que está associado. O critério deve ser verificado nos dois extremos dos canais da rede. Nas situações em que não existe câmara num dos extremos, o que ocorre sempre na linha de topo e fundo da rede e nos lados desta quando se consideram fronteiras não periódicas, são definidas câmaras fictícias nos extremos abertos de modo a poder aplicar este critérios nos dois extremos dos canais, sendo o diâmetro destas determinado da mesma forma que os das câmaras existentes no centro da rede. Se esta condição não for verificada, um novo d_j é determinado a partir de f_d e o processo repetido até que a condição seja verificada. Caso um dado número limite de valores de d_j seja determinado, o gerador assume que d_j é igual a um múltiplo menor que um, do menor D_i associado ao canal, permitindo desse modo a verificação do critério. Apenas os valores de d_j que são corrigidos. Deste modo, é possível evitar um número excessivo de determinações de valores de d_j , o que pode ser importante quando os valores médios das distribuições de diâmetros das câmaras e dos canais forem próximos.

De seguida é aplicada a condição de não intersecção, se tal for pedido ao gerador. Como por vezes pode ser difícil verificar a condição de não intersecção calculando somente novos diâmetros dos canais, pode ser necessário para a verificação desta condição calcular também novos valores de diâmetros de câmaras e substituir estes valores, sendo neste caso calculado um valor maior de D_i .

A determinação da condição de não intersecção é efectuada câmara a câmara, usando directamente os critérios que vão ser definidos de seguida e vai depender da posição e do tipo

de canais associados a uma câmara. São agora comparados três valores entre si: o diâmetro da câmara, D_i , e os diâmetros dos canais, d_j , que estão lado a lado na entrada da câmara.

Dependendo da existência ou não de canais horizontais é possível definir dois tipos de associação de células fundamentais, tal como é apresentado na Figura 3.6, e definir três critérios de não intersecção.

- **Critério A1:** Este critério é definido para os pares de canais oblíquos que pertencem à célula fundamental definida pela câmara em questão (par de canais 1-2, Figura 3.6) ou pertençam a células contíguas (par de canais 4-5, Figura 3.6). Este critério é usado em qualquer tipo de rede, com ou sem canais horizontais.

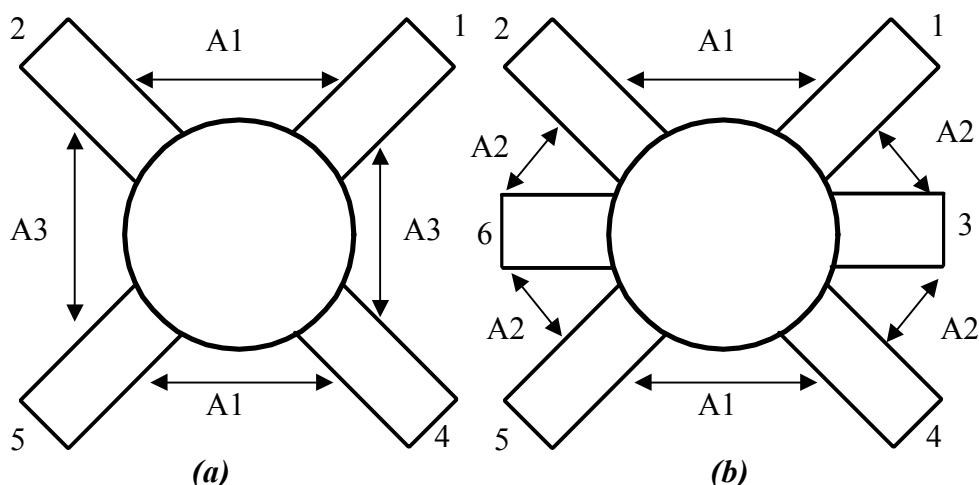


Figura 3.6 Diferentes pares de canais que devem ser verificados para a não intersecção de canais para redes: a) sem canais horizontais; b) com canais horizontais.

- **Critério A2:** Critério definido entre qualquer par contendo um canal oblíquo e um canal horizontal. São os casos dos pares de canais 1-3, 3-4, 2-6 e 5-6 apresentados na Figura 3.6b. Este critério só deve ser usado para redes com canais horizontais.
- **Critério A3:** Critério equivalente ao A1 mas aplicado entre canais oblíquos pertencentes a diferentes células fundamentais ligadas verticalmente e onde não existirem células horizontais. São os casos dos pares de canais 1-4 e 2-5 apresentados na Figura 3.6a.

Na Tabela 3.3 são apresentados os critérios de não intersecção de canais à entrada de cada câmara, sendo as respectivas deduções apresentadas no Apêndice A.6.

A sequência de verificação destes critérios de não intersecção deve ser efectuada de tal forma que se for necessário alterar o diâmetro de um canal ou da câmara, não seja necessário voltar

a verificar todos os critérios para as câmaras nas quais as duas condições já se verificam. Assim algumas condições são impostas no gerador.

- A verificação dos critérios em cada câmara é feita sequencialmente, partindo-se do extremo inferior da rede, percorrendo-se a linha da esquerda para a direita. O mesmo processo repete-se linha a linha até ao topo da rede, partindo-se sempre da câmara no lado esquerdo em direcção ao outro lado.

Tabela 3.3 Critérios de não intersecção de canais à entrada de uma câmara.

Critério	Par de Canais	Condição a verificar
A1	1-2; 4-5	$2\theta \geq \sum_k \arcsin\left(\frac{d_j^k}{D_i}\right)$
A2	2-6; 5-6; 1-3; 3-4	$\frac{\pi}{2} - \theta \geq \sum_k \arcsin\left(\frac{d_j^k}{D_i}\right)$
A3	1-4; 2-5	$\pi - 2\theta \geq \sum_k \arcsin\left(\frac{d_j^k}{D_i}\right)$
<i>k</i> refere-se ao par de canais considerados em cada um dos critérios		

- Cada par de canais contíguos à entrada de uma câmara é verificado independentemente dos outros, sendo no entanto verificados primeiro os pares que envolvem canais que entram por baixo da câmara, como é o caso 4-5 da Figura 3.6.
- Em caso de não verificação do critério é calculado um novo d_j inferior ao anterior usando a função f_d , até que o critério seja verificado. Por vezes é necessário voltar a calcular os diâmetros dos dois canais associados à câmara em análise. Para distribuições de diâmetros de canais e câmaras com valores médios próximos e/ou valores de desvio padrão elevados, pode ser muito difícil de se verificarem as condições do critério recorrendo apenas a este processo. Nesta situação, procura-se numa primeira fase determinar um novo D_i , usando a função densidade de probabilidade imposta ao gerador da rede, superior ao anterior, que facilite a determinação de um conjunto de valores de d_j que verifique o critério. Deste modo, é a distribuição de valores de d_j que é preferencialmente modificada. Se mesmo assim não for possível verificar as condições de não intersecção, o valor mínimo de D_i que verifica o critério é determinado resolvendo a respectiva equação não linear em função do diâmetro da câmara, utilizando os valores dos diâmetros dos canais já alterados até esse ponto. Deste modo, foram definidos três níveis de alteração

dos valores dos diâmetros das câmaras e dos canais associados entre si, sendo o número de valores de D_i e de d_j determinados definido pelo utilizador do gerador da rede.

- Para os canais que apenas possuem uma câmara associada a um dos extremos, as condições de não intersecção são verificadas apenas nas câmaras associadas a esta e não nas câmaras fictícias, que serviram anteriormente para a verificação do critério $d_j < D_i$.

A aplicação da condição dos diâmetros dos canais serem inferiores aos diâmetros das câmaras associadas e da condição de não intersecção de canais à entrada de uma câmara pode provocar a alteração das distribuições de diâmetros de elementos de rede, em especial para os canais. A amplitude das alterações é função dos parâmetros das funções densidade de probabilidade, sendo mais provável se os valores médios forem próximos ou os valores do desvio padrão elevados, sendo analisados estes aspectos na Secção 3.8 e 3.8.2.

3.4.4 Caso Especial - Alteração do Número de Coordenação

O número de coordenação médio entre câmaras e canais pode ser alterado por remoção aleatória de câmaras e/ou canais. De notar que por remoção se deve entender que D_i e/ou d_j passam a zero. Em termos da estrutura da rede, a câmara e/ou o canal removido continuam a existir, mas deixam de ser tomados em conta na caracterização do comportamento da rede. Quatro variantes foram implementadas neste trabalho: remoção somente de câmaras, remoção somente de canais independentemente destes serem oblíquos ou horizontais, remoção somente de canais horizontais, e remoção de câmaras e canais.

Em qualquer das possibilidades a remoção de câmaras e/ou canais é feita pondo a zero os valores dos respectivos diâmetros até que o valor pretendido de C seja alcançado, devendo esse valor ser definido no conjunto de dados a definir ao gerador da rede. No procedimento de remoção de câmaras, todos os canais associados a esta são também removidos. No caso de ocorrer remoção simultânea de câmaras e canais, a remoção de canais é efectuada a seguir ao das câmaras, e apenas no caso em que o valor pretendido de C não tenha sido alcançado apenas com a remoção das câmaras.

A selecção da câmara e/ou canal cujo diâmetro vai passar a zero é efectuada aleatoriamente. Como todos os elementos da rede possuem a mesma probabilidade de serem removidos, foi usada uma distribuição uniforme na sua selecção, independentemente do tipo de distribuição considerada para as distribuições das dimensões características dos elementos da rede. Os

únicos parâmetros considerados na determinação destes são as dimensões da rede, N_x e N_y , que definem a gama dos valores que podem ser determinados.

Durante este processo é necessário evitar a formação de uma linha da rede em que todos os diâmetros das câmaras ou todos os canais oblíquos de entrada e/ou de saída da linha sejam nulos, pois nestas condições, não é possível haver escoamento através da rede. Na remoção de câmaras esta condição é assegurada verificando se na linha em que se encontra a câmara ainda existem valores de D_i maiores que zero. Em relação aos canais, deve-se assegurar que cada câmara possui pelo menos um canal de entrada e de saída. Apenas quando se removem apenas canais horizontais é que esta condição não é verificada visto que como não há remoção de canais oblíquos está assegurado que todas as câmaras da rede possuem sempre pelo menos um canal de entrada e saída.

Por outro lado, dependendo da estrutura local da rede o número de câmaras e/ou canais a remover pode variar, podendo em muitas situações ser impossível determinar previamente o número de elementos da rede que é necessário remover. Na prática, para se evitar calcular C sempre que se remove uma câmara e/ou um canal, estima-se antes o número de câmaras e/ou canais a remover usando as expressões apresentadas na Tabela 3.2. Após se terem removido uma certa percentagem do valor total é que se começa a calcular C até este verificar o valor pretendido. De notar que como C varia de forma não contínua, considera-se que o procedimento de remoção se encontra concluído mal C ultrapasse o valor final pretendido. Para redes com um número elevado de elementos a diferença entre o valor real e o valor pretendido é muito pequena e pode ser desprezada.

Para redes em que todas câmaras possuem diâmetros nulos, só a remoção de canais é que é efectuada. A condição imposta para as câmaras mantém a sua validade mas aplica-se agora aos nós de mistura que interligam os canais entre si, que se assume nesta situação terem o volume nulo.

O procedimento de remoção de câmaras e/ou canais implica o cálculo de C ao longo deste. Como a estrutura local da rede é irregular, as expressões apresentadas na Tabela 3.2 não podem ser usadas. A Equação 3.3 continua a ser válida, mas agora existe a necessidade de se determinar o número de canais associados a cada uma das câmaras da rede. Para redes de grandes dimensões este procedimento é bastante pesado e demorado. Como o número de câmaras e/ou canais a remover pode ser estimado usando as expressões apresentadas na

Tabela 3.2, C é determinado apenas quando o número de elementos removido é próximo do valor estimado. Considerando como valor limite 90%, observou-se em todas as simulações efectuadas que o valor pretendido de C nunca era ultrapassado. Como os elementos a remover são calculados aleatoriamente, existe sempre a possibilidade do processo considerar um elemento já removido. A probabilidade desta situação ocorrer aumenta ao longo do procedimento de remoção e depende do número de elementos a remover. Neste caso, deve-se determinar um novo elemento a remover até que se seleccione um com o valor do diâmetro superior a zero.

Como o algoritmo implementado no gerador requer a geração de uma rede antes de se efectuar a remoção de câmaras e/ou canais, coloca-se a questão de saber quais são as características que a rede original deverá ter. Nenhuma restrição foi imposta ao gerador da rede em relação à características que esta deve ter, nem é efectuada nenhuma verificação de dados. É claro que a rede original deverá ter um valor superior de C , de modo a ser possível reduzir o valor desse parâmetro pela remoção de câmaras e ou canais. Com o objectivo de reduzir o volume de cálculos necessários, recomenda-se sempre partir da rede regular (como as que são apresentadas na Figura 3.4) com C mais próximo do valor pretendido. Para a situação em que apenas são removidos canais horizontais, parte-se sempre de uma rede com $C = 6$ para assegurar que existem canais horizontais na rede. Apenas neste caso é que o número de coordenação médio está limitado entre 4 e 6, visto que valores mais baixos de C apenas podem ser alcançados pela remoção de câmaras e/ou canais.

3.4.5 Atribuição dos Comprimentos dos Canais

Após determinar valores dos diâmetros das câmaras e canais da rede, é necessário determinar a distribuição de comprimentos dos canais, $f_l(l_j)$. Como já foi referido atrás, existem várias formas de determinar esta função, tendo aqui sido implementado o caso em que se usa o comprimento médio dos canais. Considera-se que o valor médio do comprimento dos canais oblíquos l é um valor conhecido e constante, devendo o mesmo ser obtido a partir das características do enchimento. Impondo ainda que a distância, L_o , entre o centro de duas câmaras interligadas por um canal oblíquo é constante, esta pode ser calculada a partir da expressão

$$L_o = l + D - 2h \quad (3.4)$$

em que h representa a espessura das calotes esféricas provocada pela entrada dos canais nas câmaras no caso de uma rede uniforme com diâmetros de câmaras iguais ao diâmetro médio das câmaras, D , e com diâmetros de canais iguais ao diâmetro médio dos canais, d . Neste caso h é expresso na forma (ver Equação 3.1 e Figura 3.1)

$$h = \frac{D}{2} \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{d}{D} \right)^2} \right] \quad (3.5)$$

Uma vez determinado L_o , o comprimento, $l_j|_o$ (equivalente a l), dos canais oblíquos pode ser determinado através da relação

$$l_j|_o = L_o - \frac{1}{2} (D_i^1 + D_i^2) + (h_{ij}^1 + h_{ij}^2) \quad (3.6)$$

em que os expoentes 1 e 2 se referem às câmaras em cada extremo do canal em consideração.

As expressões anteriores são válidas apenas para os canais oblíquos. No caso de existirem canais horizontais, o seu comprimento vai ser calculado a partir do valor da distância, L_h , entre os centros de duas câmaras contíguas na mesma linha da rede. Este valor está relacionado com L_o através da relação

$$L_h = 2L_o \sin \theta \quad (3.7)$$

e o comprimento, $l_j|_h$, de cada canal horizontal é dado por

$$l_j|_h = L_h - \frac{1}{2} (D_i^1 + D_i^2) + (h_{ij}^1 + h_{ij}^2) \quad (3.8)$$

Da Figura 3.4 pode-se observar que alguns canais da rede possuem apenas uma câmara associada, em particular, os canais oblíquos da primeira e última linhas e os canais oblíquos e horizontais que ocorrem nos lados da rede, se a mesma tiver fronteiras periódicas. Se for apenas usada esta câmara para o cálculo dos respectivos comprimentos, estes canais vão ter tendência a apresentar valores de comprimentos em média superiores aos dos restantes canais. Para evitar este problema, o comprimento destes canais é obtido assumindo que existe uma câmara fictícia no extremo aberto do canal. Os valores usados na determinação dos comprimentos dos canais são os mesmos já considerados na verificação do critério $d_j < D_i$,

para os canais nas mesmas conclusões. Estas câmaras não fazem parte da rede final mas servem apenas para evitar a ocorrência de uma zona com características geométricas distintas do resto da rede.

Na determinação da distribuição dos comprimentos dos canais, tanto horizontais como oblíquos, deve-se tomar em atenção a possibilidade de ocorrência de valores menores que zero, fisicamente impossíveis. Esta situação pode ocorrer quando L_o é muito menor que D , podendo a dispersão da distribuição de valores de D_i ser um factor importante, ou para θ baixos em que $L_h < L_o$, podendo ser menor que D . Como a ocorrência de um comprimento de um canal menor que zero depende dos dados fornecidos ao gerador da rede, e este não dispõe de informação suficiente para efectuar as correcções necessárias, a ocorrência de uma situação como a descrita é um erro terminal. A definição de um conjunto diferente de dados de entrada, em particular com o aumento de L_o , é a única forma de evitar a ocorrência de comprimentos dos canais negativos. Na Secção 3.4.8 este aspecto é analisado em detalhe.

3.4.6 Determinação da Espessura da Rede

O cálculo da espessura da rede pode ser feito fazendo um balanço ao volume dos espaço vazios da rede. Por definição, a porosidade é dada por

$$\varepsilon = \frac{V_v}{V_T} \quad (3.9)$$

em que V_v é o volume total de vazios e V_T representa o volume total da rede, definidos por

$$V_T = L_X L_Y E_R \quad (3.10)$$

$$V_v = V_{Cam} + V_{Can} - V_{Cal} \quad (3.11)$$

em que: L_X e L_Y representam o comprimento da rede segundo a direcção xx e na direcção yy respectivamente; V_{Cam} , V_{Can} e V_{Cal} são os volumes totais ocupados pelas câmaras, canais e calotes respectivamente; e E_R representa a espessura equivalente da rede.

Combinando as três últimas equações e resolvendo em ordem a E_R , obtém-se a expressão para o cálculo da espessura da rede

$$E_R = \frac{V_{Cam} + V_{Can} - V_{Cal}}{\varepsilon L_X L_Y} \quad (3.12)$$

Sendo as funções de distribuição dos elementos da rede conhecidas, os respectivos volumes podem ser calculados facilmente a partir das relações

$$V_{Cam} = \frac{\pi}{6} \sum_{i=1}^{N_{Cam}} D_i^3 \quad (3.13)$$

$$V_{Can} = \frac{\pi}{4} \sum_{j=1}^{N_{Can}} d_j^2 l_j \quad (3.14)$$

$$V_{Cal} = \frac{\pi}{3} \sum_{j=1}^{N_{Cal}} \sum_{k=1}^2 (h_{ij}^k)^2 (1.5 D_i^k + h_{ij}^k) \quad (3.15)$$

em que o expoente $k = 1, 2$ se refere às câmaras em cada extremo do canal em consideração. O valor de L_X é obtido recorrendo a considerações geométricas, dependendo o seu valor da distribuição dos diâmetros das câmaras extra definidas para evitar a ocorrência na entrada e saída de fluido da rede de canais com características distintas. Para redes com um valor elevado de N_X , a seguinte expressão é uma boa aproximação do valor real

$$L_X \approx (N_X + 1) L_O \cos \theta \quad (3.16)$$

O valor de L_Y depende do tipo de fronteira, como se pode observar na Figura 3.4 sendo definido por

$$L_Y = (N_Y - 0.5) L_H + 0.5 (D_{esq}^{Max} + D_{dir}^{Max}) \text{ sem fronteiras periódicas} \quad (3.17)$$

$$L_Y = (N_Y + 0.5) L_H \text{ com fronteiras periódicas} \quad (3.18)$$

em que D_{esq}^{Max} e D_{dir}^{Max} representam os diâmetros máximos das câmaras, do lado esquerdo e do lado direito da rede respectivamente.

No caso geral, os valores de L_X e L_Y são determinados calculando as coordenadas dos centros das câmaras da rede e dos canais nos extremos e fronteiras da rede. As expressões anteriores são convenientes para usar na análise do comportamento de redes com características espaciais, como se irá ver mais à frente.

3.4.7 Redes Especiais

Como tem sido referido, o gerador de redes permite a geração de redes simplificadas que permitem uma melhor descrição de leitos de enchimento com estruturas ou características especiais.

3.4.7.1 Rede com distribuições pontuais de tamanhos dos elementos

Quando as câmaras e os canais de uma rede possuem todos o mesmo diâmetro, $D_i = D, i = 1, \dots, N_{Cam}$; e $d_j = d, j = 1, \dots, N_{Can}$, diz-se que as distribuições dos diâmetros das câmaras e dos canais são pontuais, para diferenciar da situação geral. Nesta situação, os valores de D e d podem ser obtidos a partir das características do meio poroso em estudo (ver Secção 3.5) ou ser iguais aos valores médios das respectivas distribuições. Na geração deste tipo de rede, dado os valores de D e d serem fixos, é necessário impor *à priori* (directamente nos dados iniciais do problema) a condição de o diâmetro do canal ser menor que o diâmetro de qualquer das câmaras a ele associadas, isto é, $d < D$, e também o critério de não intersecção, caso também este tenha sido imposto. O gerador da rede para distribuições pontuais não faz a verificação de nenhuma restrição entre os diâmetros das câmaras e dos canais associadas entre si. O objectivo na utilização de distribuições pontuais é a geração de redes em que as dimensões características dos elementos não variam no espaço. Dependendo da estrutura da rede, em particular em redes sem fronteiras não periódicas com a restrição de não intersecção, o gerador poderia ter de alterar localmente os valores dos elementos da rede, contrário aos objectivos da utilização de distribuições pontuais.

O comprimento dos canais pode ser obtido de um modo semelhante ao descrito na Secção 3.4.5, isto é,

$$l = L_o - D + 2h \quad (3.19)$$

$$l_h = 2L_o \sin \theta - D + 2h \quad (3.20)$$

em que L_o é a distância entre os centros de duas câmaras ligadas por um canal oblíquo e h representa a espessura da calote formada pela entrada dos canais nas câmaras, dada por

$$h = \frac{D}{2} \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{d}{D} \right)^2} \right] \quad (3.21)$$

Comparando as Equações 3.19 e 3.20, conclui-se que quando $\theta = \pi/6$ os canais oblíquos e horizontais têm o mesmo comprimento. O problema da possibilidade de ocorrerem comprimentos de canais menores que zero continua a ser possível, sendo este aspecto analisado em detalhe na Secção 3.4.8.

3.4.7.2 Redes sem câmaras

Outra extensão ao modelo de rede de câmaras ou canais consiste em impor que $D_i = 0, i = 1, \dots, N_{Cam}$. Esta situação é equivalente a uma rede em que só existem canais e em que as câmaras funcionam como simples nós de mistura com volume nulo. Esta hipótese é encontrada com frequência na literatura (Sahimi, 1995). Neste tipo de rede nenhum dos critérios descritos atrás entre câmaras e canais é aplicável, sendo no entanto aplicáveis todas as restantes equações de determinação da espessura e da distribuição de comprimentos dos canais da rede, sendo os termos de volume associados com as calotes e as câmaras nulos. As restantes hipóteses de geração da rede podem ser impostas da mesma forma, com excepção da remoção de câmaras. Como todos os valores de D_i são nulos, o anulamento aleatório do diâmetro das câmaras deixa de ser possível. É no entanto válido remover todos os canais associados a um nó de mistura, tal como se efectua durante a remoção de câmaras, sendo deste modo válido considerar que ainda é possível remover as câmaras da rede.

3.4.8 Análise dos Parâmetros de Entrada do Gerador da Rede

Na formulação do gerador não são impostas restrições aos valores dos parâmetros das distribuições e dos valores médios dos elementos que descrevem a rede de câmaras e canais, para além daquelas consideradas durante o processo de criação da rede. Por exemplo, foi imposta a condição de que um canal com diâmetro superior às câmaras nos seus extremos não pode existir. Esta condição não impõe nenhuma restrição aos valores médios dos diâmetros, D e d , pois como o processo de atribuição de diâmetros é local, dependendo dos valores dos parâmetros das distribuições de tamanhos, pode ser construída uma rede em que $d < D$.

Para além da restrição óbvia de que só podem ser usados valores maiores que zero para os valores médios dos parâmetros geométricos e das distribuições, para redes uniformes é possível determinar condições entre os valores médios dos parâmetros geométricos. No caso geral em que as redes são não uniformes, estas condições servem apenas como critérios gerais, que, ao ser verificados, asseguram que o processo de geração não terá necessidade de efectuar muitas correcções, sendo portanto mais rápido e eficiente.

Os critérios apresentados de seguida são estritamente válidos para redes uniformes mas podem ser aplicados sem problemas se as distribuições possuírem valores baixos de desvio padrão.

3.4.8.1 Dependência entre o comprimento médio dos canais e θ

Como é claro da Figura 3.7, em que se encontram representados alguns canais e as câmaras contíguas associadas, só é possível construir uma rede para uma gama restrita de valores de θ , sendo possível distinguir duas situações limite.

O limite superior, $\theta_{\max}$, é obtido no caso em que duas câmaras contíguas verticalmente se tocam (ver Figura 3.7b)

$$\theta_{\max} = \frac{\pi}{2} - \arcsin\left(\frac{D}{2L_o}\right) \quad (3.22)$$

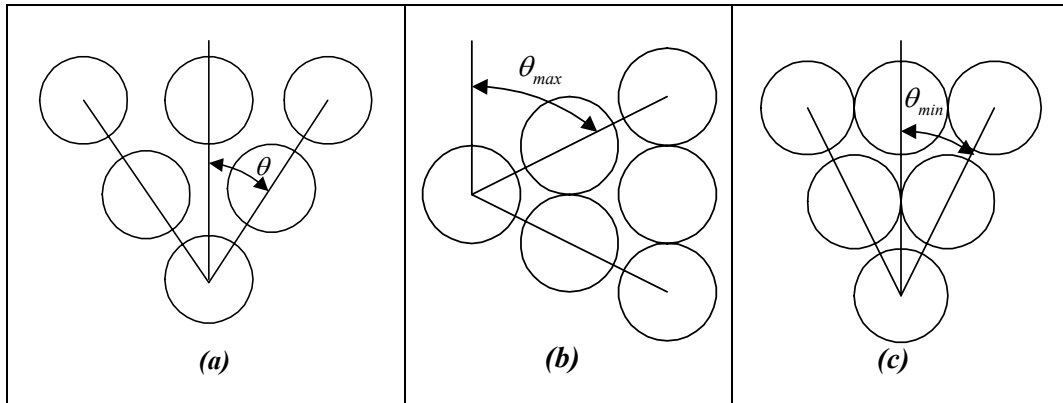


Figura 3.7 Estrutura local da rede de câmaras e canais: a) caso geral; b) limite superior, $\theta_{\max}$; c) limite inferior, $\theta_{\min}$.

O limite inferior, $\theta_{\min}$, obtém-se no caso em que duas câmaras contíguas na horizontal se tocam como se mostra na Figura 3.7c

$$\theta_{\min} = \arcsin\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{D}{L_o}}\right) \quad (3.23)$$

Na Figura 3.8 são apresentados os valores de $\theta_{\max}$ e de $\theta_{\min}$ em função da razão L_o/D . Observa-se que para o valor mínimo de $L_o/D = 1$, os valores limites de $\theta_{\max}$ e de $\theta_{\min}$ são respectivamente $\pi/3$ e $\pi/6$.

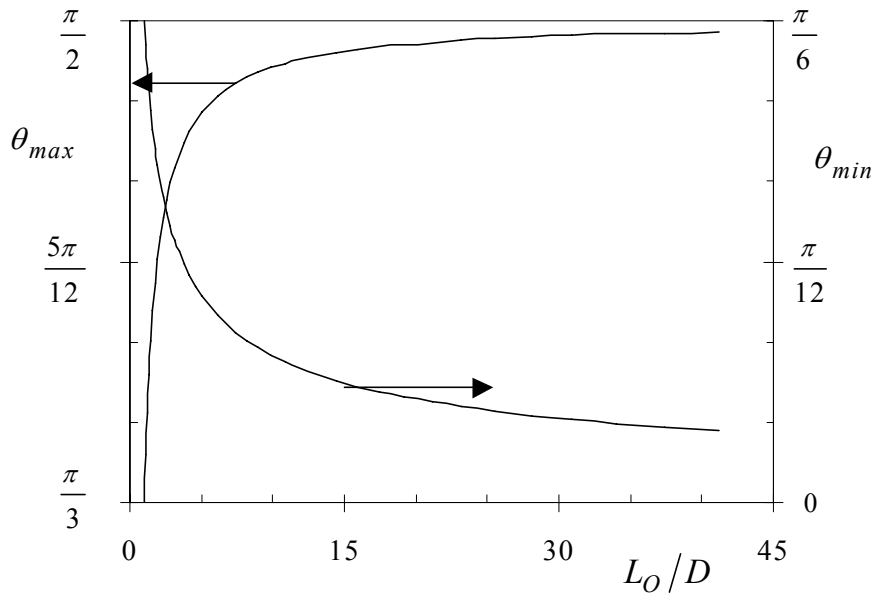


Figura 3.8 Valor mínimo e máximo de θ em função da razão L_O/D .

Estes dois limites correspondem ao caso em que $l = 2h$, ou seja o comprimento dos canais oblíquos resume-se à contribuição das calotes esféricas, sendo os mesmos representados esquematicamente na Figura 3.9.

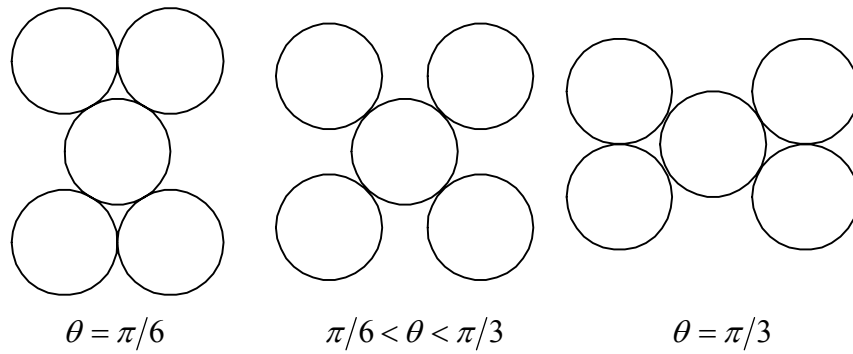


Figura 3.9 Representação esquemática dos casos limites de redes em função de θ para $L_O/D = 1$.

A partir das Equações 3.19 e 3.20 é possível obter uma relação limite entre os valores médios das dimensões características dos elementos da rede, ou seja

$$\frac{l_h}{l} = 2 \sin \theta + \left(\frac{D-2h}{l} \right) (2 \sin \theta - 1) \quad (3.24)$$

Na Figura 3.10 representa-se a razão l_h/l em função de θ , para vários valores da razão $(D-2h)/l$, podendo-se observar que $l_h/l = 1$ quando $\theta = \pi/6$, independentemente do valor

de $(D-2h)/l$, o que está de acordo com a conclusão já apresentada atrás e que corresponde ao caso $\theta = \pi/6$ representado na Figura 3.9.

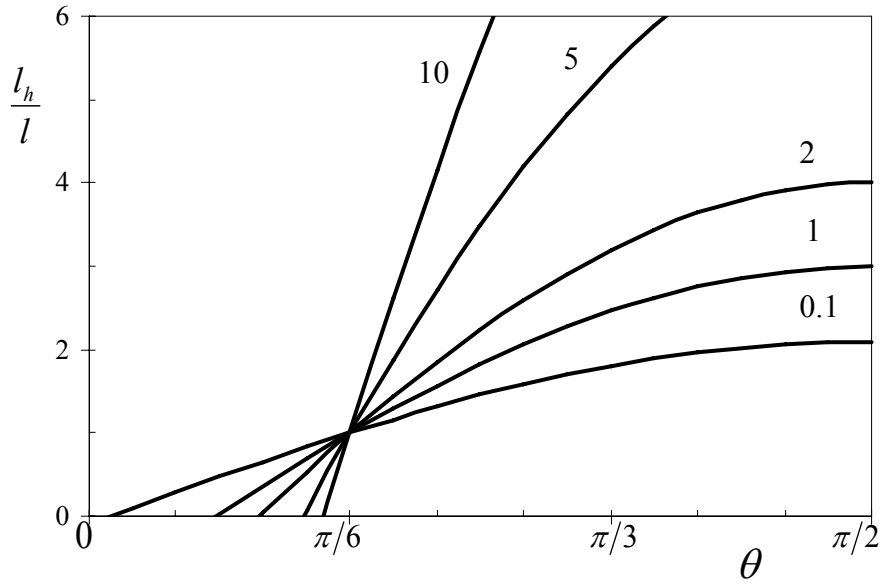


Figura 3.10 Razão l_h/l em função da razão $(D-2h)/l$.

Pode ainda observar-se que existe um valor mínimo θ para o qual $l_h/l > 0$, pelo que se pode estabelecer um novo valor limite para θ

$$\theta > \theta_{lim} = \arcsin \left[\frac{(D-2h)/l}{2[(D-2h)/l + 1]} \right] \quad (3.25)$$

Esta expressão está representada graficamente na Figura 3.11 podendo-se observar que à medida que $(D-2h)/l$ aumenta o valor mínimo de θ aumenta, aproximando um patamar para $\theta = \pi/6$.

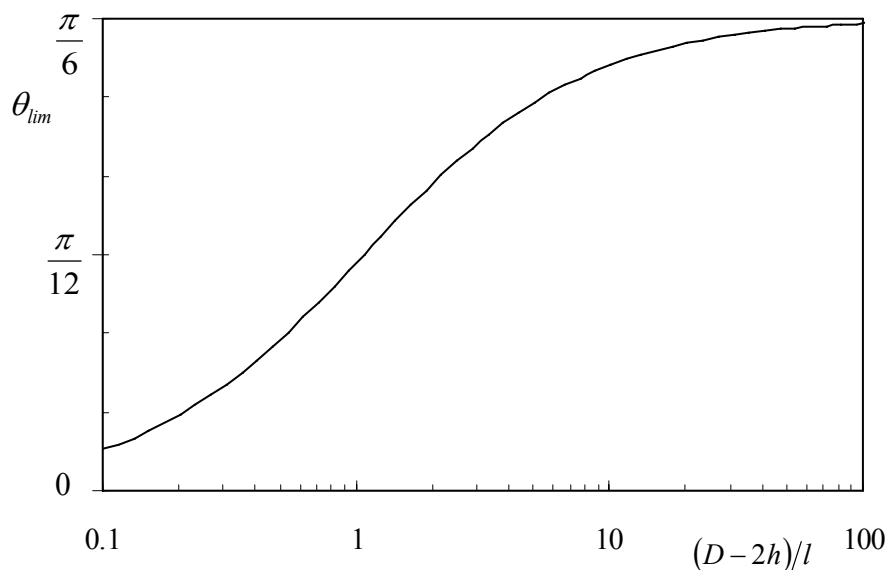


Figura 3.11 Valor limite mínimo de θ para que $l_H/l_O > 0$ em função da razão $(D-2h)/l$.

3.4.8.2 Valores limites do Diâmetro Médio das Câmaras e Canais

A partir dos critérios de não intersecção apresentados atrás, é possível determinar para leitos uniformes as relações limites entre D e d que tornam possível a geração de uma rede uniforme. Neste tipo de critério, não é necessário entrar em consideração com o comprimento dos canais.

Por análise das expressões apresentadas na Tabela 3.3 para cada um dos casos possíveis, é possível determinar a condição limite de verificação de cada um dos critérios, sendo as mesmas apresentadas na Tabela 3.4.

Tabela 3.4 Relações limite da razão d/D para redes uniformes.

Critério	Relação Limite
A1	$\frac{d}{D} \leq \sin \theta$
A2	$\frac{d}{D} \leq \frac{1}{2} \sqrt{2(1 - \sin \theta)}$
A3	$\frac{d}{D} \leq \cos \theta$

É possível ainda definir duas situações, consoante a rede possui ou não canais horizontais. Se não existirem canais horizontais, os critérios A1 e A3 são os únicos aplicáveis, permitindo definir a seguinte relação limite

$$\frac{d}{D} \leq \min(\sin \theta, \cos \theta) \quad (3.26)$$

Para a situação em que a rede possui canais horizontais, o critério A3 é substituído pelo critério A2, obtendo-se

$$\frac{d}{D} \leq \min(\sin \theta, 0.5\sqrt{2(1 - \sin \theta)}) \quad (3.27)$$

Na Figura 3.12 são apresentadas as curvas limites de d/D em função de θ para os dois tipos de redes. Para valores baixos de θ ambos os critérios se comportam da mesma forma, dado que o critério A1 é o controlante. Para $\theta \leq \pi/6$ ambos os critérios são equivalentes, passando a partir daí os critérios A2 ou A3 a dominar.

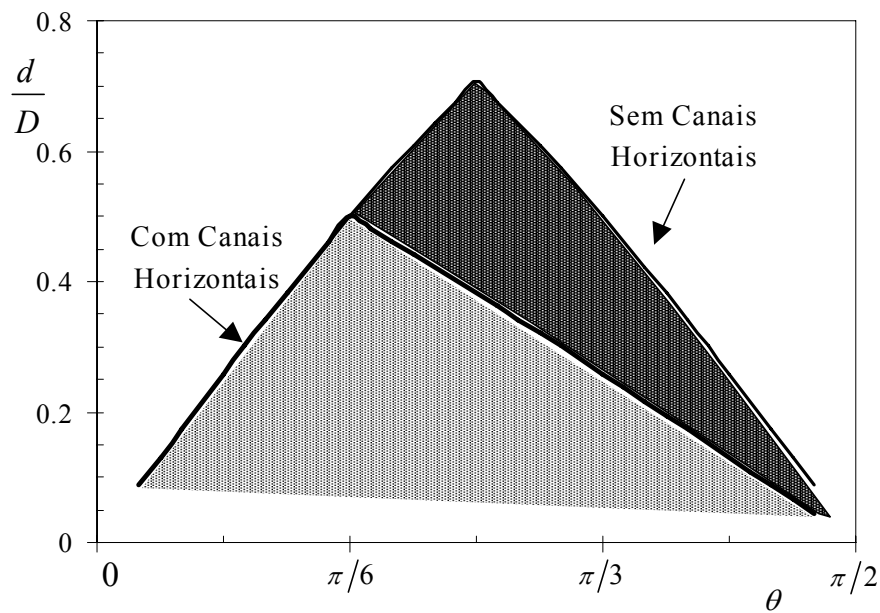


Figura 3.12 Valores limites da razão d/D em função de θ .

A inclusão de canais horizontais origina critérios mais restritivos entre D e d para valores elevados de θ , dado que o par de canais oblíquo e horizontal do critério A2 encontram-se mais próximos que o par de canais oblíquos do critério A1.

3.4.8.3 Influência da inclusão ou não das calotes

Como foi descrito anteriormente, a junção de uma câmara com um canal provoca o aparecimento de uma calote esférica comum aos dois elementos cujo volume é associado à câmara respectiva e subtraído ao canal. Nesta secção pretende-se analisar a importância

relativa desta correcção no volume relativo de cada elemento e no comprimento dos canais. Como se mostra na Figura 3.13 a espessura da calote h_{ij} e a razão entre o volume da calote, V_{Cal} , e o volume da câmara, V_{Cam} , são funções de d_j/D_i , tomando o seu valor máximo para $d_j/D_i = 1$, caso em que não é possível distinguir entre a câmara e o canal. A razão d_j/D_i depende das características do enchimento, em particular da forma das partículas e do valor da porosidade global, e de acordo com Payatakes *et al.* (1973) toma geralmente valores entre 0.3 e 0.6, embora dependa do modelo usado na sua determinação. Nestas condições, o erro no volume ao desprezar a influência das calotes é menor que 3%, enquanto que o erro no comprimento dos canais é menor que 10% do diâmetro das câmaras.

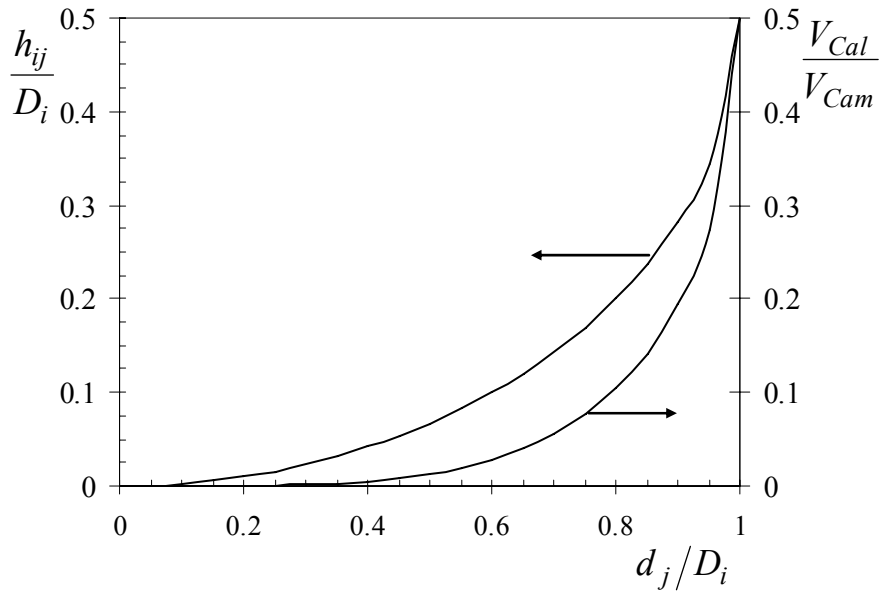


Figura 3.13 Valores normalizados do comprimento e do volume das calotes esféricas.

Assim, é possível desprezar este efeito, sem prejuízo para o cálculo dos outros parâmetros da rede (porosidade, espessura da rede) ou para a descrição do escoamento de um fluido através da rede pois a queda de pressão nos canais depende mais do valor do diâmetro do canal, d_j , do que do seu comprimento, l_j . Por outro lado, a não inclusão deste efeito, torna o algoritmo de geração mais simples e rápido. Na Secção 3.7 serão analisados os efeitos deste parâmetro nos valores previstos pelo gerador da rede da espessura equivalente da rede.

3.4.9 Diagrama de Fluxo do Gerador da Rede

Na secções anteriores, em particular da Secção 3.4.1 à 3.4.6, foi descrita a estrutura básica que foi implementada para o gerador da rede. De modo a simplificar a correcção e a inclusão

de mais possibilidades no gerador, uma estrutura modular foi desenvolvida, seguindo muito de perto a sequência de cálculos descrita anteriormente.

Na Figura 3.14 é apresentado o diagrama de fluxo do gerador da rede, em função das condições mais importantes impostas ao gerador da rede, descritas em detalhe na Secção 3.3.

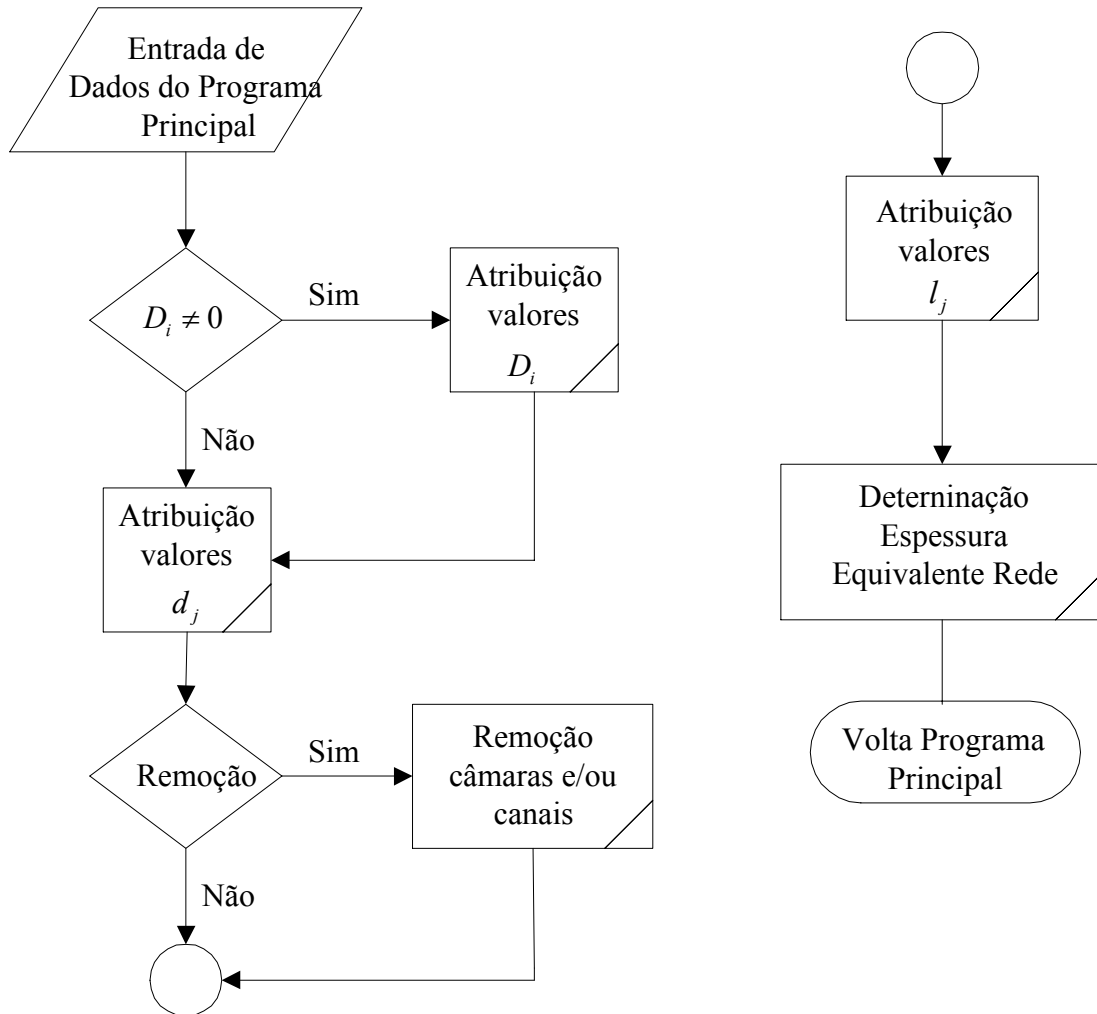


Figura 3.14 Diagrama de fluxo implementado no gerador da rede.

No conjunto de dados encontram-se as características dos elementos da rede, a forma como estes se distribuem espacialmente e as restrições que são impostas entre os elementos da rede. Dependendo dos dados e das condições impostas ao gerador da rede, a sequência de cálculos implementada no gerador da rede pode mudar. Este aspecto é bem visível no bloco de atribuição dos valores dos D_i , efectuado apenas quando a função $f_D(D_i)$ é não nula.

Alguns aspectos importantes da estrutura do gerador não são apresentados na Figura 3.14. Em particular, não são apresentados os módulos associados com os geradores de números aleatórios visto estes serem comuns a todos os blocos do gerador. Deste modo, é possível seleccionar o tipo das funções densidade de probabilidade que se pretende usar e impor com

maior facilidade restrições ao tipo de função (se é nula, pontual ou contínua) a usar. Outros blocos comuns, como por exemplo a determinação do número de coordenação médio, também não são considerados na Figura 3.14.

Muitos módulos são formados por vários blocos aplicando cada um deles apenas um dado conjunto restrito de restrições. Um exemplo típico que pode ser observado na Figura 3.14 é o módulo de determinação dos valores dos diâmetros dos canais, d_j , em que diferentes blocos determinam os valores de acordo com o critério $d_j < D_i$, sendo de seguida os resultados usados num outro bloco para se verificar as condições de não intersecção à entrada de uma câmara.

3.5 Determinação dos Parâmetros das Distribuições de Tamanhos

Como já se referiu em secções anteriores a descrição adequada dos fenómenos de transporte num leito de enchimento exige informação detalhada com respeito à sua estrutura real. Caso contrário, a validade dos modelos desenvolvidos é limitada, pois passam a depender de parâmetros empíricos obtidos a partir de dados experimentais. Um exemplo disto é dado na Figura 3.1 para os dois leitos de enchimento formados por partículas rectangulares, em que é possível obter comportamentos distintos mesmo quando os enchimentos foram criados com partículas com distribuições de tamanhos similares, consoante a estrutura do enchimento implementada. Esta situação verifica-se mesmo se as distribuições de tamanhos dos elementos da rede equivalente forem idênticas, sendo de esperar uma menor influência da estrutura do leito quanto maior for o carácter aleatório desta. Apesar de ser possível a existência de estruturas regulares ao nível local, ao nível macroscópico observa-se uma estrutura desordenada, o que torna difícil, senão mesmo impossível decidir qual a melhor forma de modelizar correctamente a estrutura real do meio.

A dificuldade principal está na forma como a informação experimental é obtida e como esta deve ser integrada no modelo. Tal como é descrito em detalhe no Capítulo 2, a estrutura local dos espaços vazios pode ser determinada directamente recorrendo à análise de imagem de secções do meio, previamente impregnada com uma resina termoendurecível (Dullien, 1992; Mata, 1998) ou por técnicas de RMN (Gallegos e Smith, 1988). Existem ainda outras técnicas indirectas, sendo um exemplo a porosimetria de mercúrio, em que é necessário admitir um modelo da estrutura do meio poroso à partida (Mata *et al.*, 2001a e 2001b).

É possível também simular directamente a estrutura do leito de enchimento através da deposição de partículas num contentor (descrita na Secção 2.2.5). Analisando o posicionamento final das partículas, a geometria dos espaços vazios pode ser conhecida com rigor. Recorrendo a essa informação é possível determinar a forma geométrica simplificada mais representativa da realidade, aspecto importante para modelizar o escoamento de uma forma mais simples. Por outro lado, é possível determinar também a rede equivalente contendo os elementos fundamentais do leito de enchimento (Thompson e Fogler, 1997). Estes métodos não permitem a obtenção da estrutura porosa exacta, mas sim de uma estrutura análoga baseada nos valores reais. Se o enchimento real for aleatório e o empilhamento simulado com um número suficientemente grande de partículas de modo a ser representativo, espera-se que o comportamento da rede equivalente seja equivalente ao do enchimento real. Este método é no entanto computacionalmente intensivo, sendo possível ocorrerem problemas na determinação das dimensões representativas do enchimento e das condições mais adequadas para gerar empilhamentos realistas (Chan e Ng, 1986).

Neste trabalho está-se interessado num modelo simples e de aplicação rápida, válido para os leitos de enchimento normalmente utilizados na prática. Estas características motivam o desenvolvimento de um modelo baseado em informação macroscópica do meio ou de determinação simples, como por exemplo a porosidade média global e a distribuição de diâmetros das partículas, determinável facilmente com recurso a peneiros calibrados.

3.5.1 Enchimentos de Esferas Ideais

Os leitos de enchimento formados empilhando numa estrutura regular esferas regulares com o mesmo diâmetro são os de descrição mais simples. Em particular, as suas características geométricas podem ser descritas a partir de uma célula fundamental representativa. Como a modelização dos fenómenos de transporte para meios porosos deste tipo pode ser efectuada analisando apenas o comportamento das células fundamentais, tem sido comum na literatura o recurso a leitos de enchimento regulares (Hasimoto, 1959; Zick e Homsy, 1982, Sangani e Acrivos, 1982a e 1982b, Edwards *et al.*, 1990).

Existem seis tipos diferentes de enchimentos de esferas regulares, com diferentes características geométricas (Graton e Frasier, 1935; Martin *et al.*, 1951; Pietsch, 1996). É possível definir uma analogia entre cristais regulares e este tipo de enchimentos, embora esta só seja estritamente válida para elementos químicos, devido à imposição de diâmetro constante para os elementos do enchimento (Borges, 1982). Como a estrutura de um cristal

depende não só das dimensões do átomo ou do ião mas também da sua estrutura electrónica, é possível a existência de mais estruturas regulares cristalinas, impossíveis de ocorrerem quando todos os elementos possuem as mesmas características. Na Figura 3.15 e Figura 3.16 são apresentadas as estruturas tridimensionais com as respectivas vistas de cima para cada uma das estruturas regulares, sendo no último caso apresentadas apenas a estrutura de planos da estrutura regular.

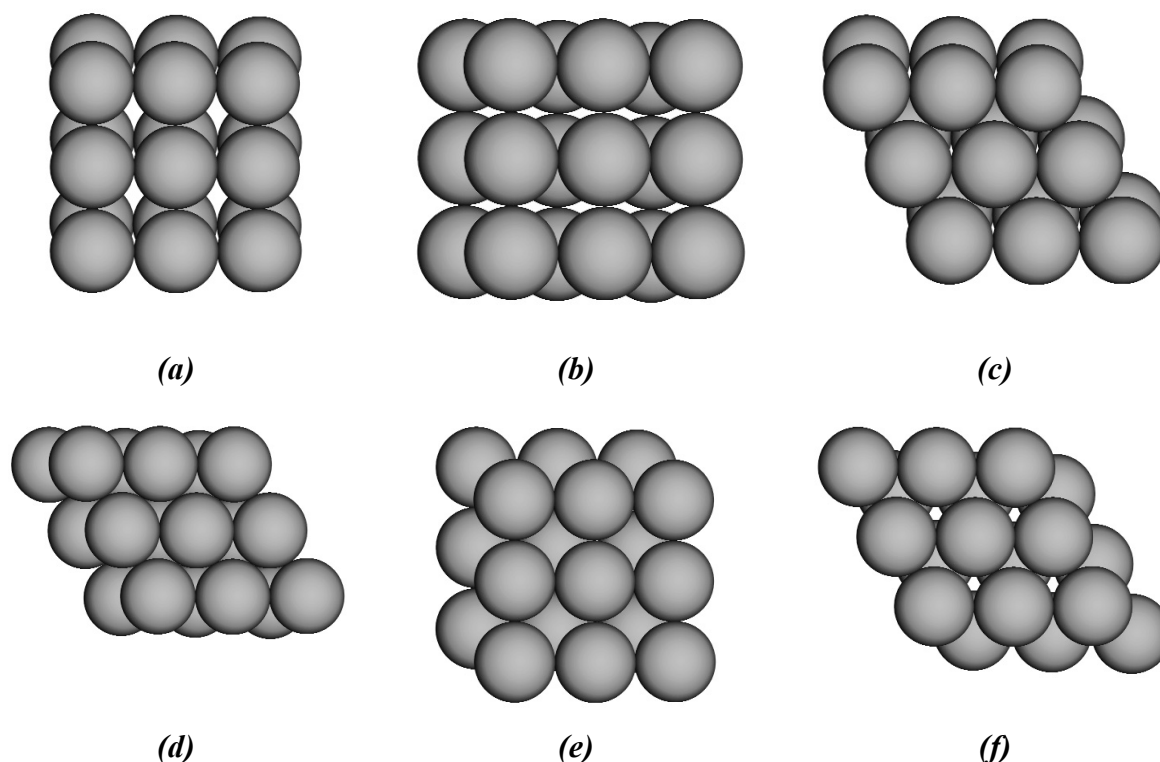


Figura 3.15 Enchimentos regulares de esferas: a) CUB; b) ORT; c) HEX; d) TET; e) RBP; f) RBH.

De acordo com a nomenclatura usual (Pietsch, 1996) os seis tipos de enchimento vão ser designados pela sua forma geométrica e de modo a facilitar a escrita vão ser utilizadas siglas de três caracteres para cada geometria, como se mostra na Tabela 3.5, onde se apresentam também os respectivos valores da porosidade.

Os valores tabelados permitem concluir que a gama de valores de porosidade abrangida pelos seis enchimentos é larga e engloba os valores normalmente encontrados em leitos reais de enchimento não regulares. Comparando os valores tabelados, observa-se que existem dois pares de enchimentos com a mesma porosidade: ortorrômbico/hexagonal e romboédrico-piramidal/romboédrico-hexagonal.

Tabela 3.5 Valores de ε para cada um dos enchimentos regulares.

Tipo de Enchimento	Sigla	Porosidade
Cúbico	CUB	0.476
Ortorrômico	ORT	0.395
Hexagonal	HEX	0.395
Tetragonal	TET	0.302
Romboédrico-Piramidal	RBP	0.260
Romboédrico-Hexagonal	RBH	0.260

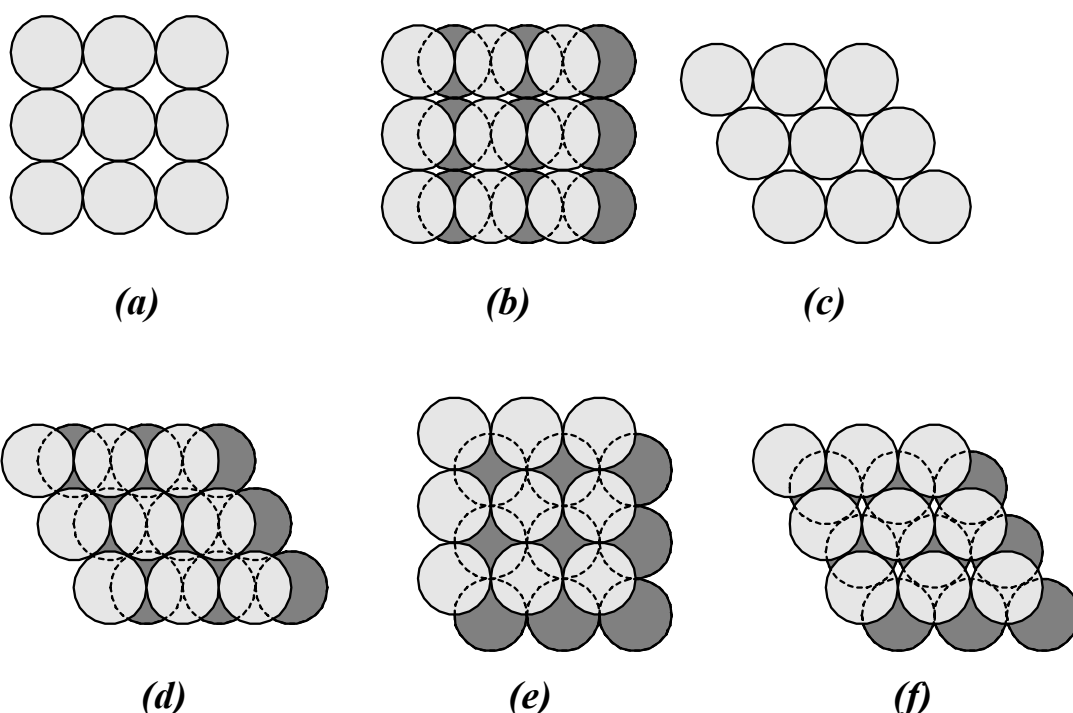


Figura 3.16 Estrutura dos seis enchimentos regulares de esferas: a) CUB; b) ORT; c) HEX; d) TET; e) RBP; f) RBH.

Para o par ortorrômico/hexagonal observa-se ainda que ambos possuem a mesma estrutura, variando apenas a forma como são observados. Apesar da similaridade geométrica, o comportamento hidrodinâmico é distinto nas duas estruturas. Assumindo que o sentido principal de escoamento é segundo o plano normal à página, dependendo da estrutura do leito o fluido vai atravessar constrições definidas por quatro esferas, para o ortorrômico, e por três esferas, para o hexagonal. Assim, as duas estruturas possuem comportamento hidrodinâmico distinto, tendo este aspecto sido confirmado experimentalmente por Martin *et al.* (1951). A mesma situação ocorre com o par romboédrico-piramidal/romboédrico-hexagonal.

Implícita na estrutura geométrica dos enchimentos regulares encontra-se a hipótese de que uma esfera se encontra em contacto com pelo menos outras seis, ocorrendo esta situação limite para o enchimento cúbico. O número médio de contactos aumenta com a diminuição do valor da porosidade, como se pode depreender da estrutura tridimensional dos enchimentos regulares e é confirmada em estudos em que leitos de partículas são gerados computacionalmente (Finney, 1971). Ao nível local é possível existirem esferas com um número de contactos menores que seis conforme a estrutura do leito de enchimento, mas, estas representam uma pequena fracção do número total de partículas (Finney, 1970).

Pretende-se agora desenvolver um modelo tal que a partir das propriedades de cada um dos seis tipos de enchimento de esferas regulares seja possível obter os valores dos parâmetros geométricos para o modelo de redes. O modelo baseia-se nas seguintes hipóteses.

- Como a estrutura dos enchimentos é regular, os valores das dimensões características dos elementos da rede equivalente são constantes e independentes da posição no leito de enchimento, podendo-se admitir que a análise geométrica apenas dá origem aos valores médios dos parâmetros, nomeadamente D , d e l .
- Se for conhecida a distribuição de tamanhos das partículas que formam o leito de enchimento, é possível determinar os restantes parâmetros das distribuições de tamanhos dos elementos da rede a partir dos valores dos parâmetros da primeira.
- No momento em que é seleccionado o tipo de enchimento regular, ε é fixado, o que significa que D , d e l calculados, são válidos apenas para as condições de porosidade desse enchimento. Se um leito de enchimento tiver um valor de porosidade diferente dos valores apresentados na Tabela 3.5, considera-se que D , d e l podem ser determinados por interpolação dos valores obtidos na análise geométrica dos enchimentos regulares. Subjacente a esta hipótese encontra-se a observação de que, em leitos de enchimento, os parâmetros do escoamento como por exemplo a permeabilidade, são essencialmente funções da porosidade e das características do meio.

No caso de enchimentos de partículas não esféricas é possível recorrer a conceitos como o factor de esfericidade e o diâmetro equivalente (ver Secção 2.2.2.3) de modo a determinar as características médias das esferas equivalentes que permitem a criação de um enchimento com as mesmas características fenomenológicas. Apesar desta aproximação ser válida desde que as partículas não possuam uma forma muito diferente da esférica, se for possível definir

uma estratégia de determinação dos parâmetros médios a partir das características geométricas de enchimentos regulares, esta poderá ser utilizada para estimar o comportamento de leitos de partículas não esféricas.

3.5.2 Descrição e Caracterização dos Enchimentos

As hipóteses acima especificadas, reduzem o problema de determinação dos valores de D , d e l à caracterização geométrica dos enchimentos regulares. Analisando a estrutura de cada um dos enchimentos apresentados na Figura 3.15 e na Figura 3.16, observa-se que estes enchimentos são espacialmente periódicos, sendo então possível definir em cada um deles uma célula fundamental que, por repetição, permite gerar um leito de enchimento regular com quaisquer dimensões.

A selecção da célula fundamental para cada enchimento deve verificar certas condições, nomeadamente a célula deve ter uma porosidade igual à do enchimento e a geometria local do enchimento tem de estar incluída na definição da célula. Por outro lado, a célula deve ter uma formulação simples de modo a permitir a fácil determinação dos parâmetros pretendidos.

Observando a estrutura de esferas contíguas em cada tipo de enchimento é possível definir dois tipos de faces distintas, como se mostra na Figura 3.17:

- face quadrada, em que 4 esferas do enchimento são tangentes entre si no mesmo plano, sendo possível definir um quadrado ligando os centros das esferas;
- face triangular, em que 3 esferas do enchimento são tangentes entre si no mesmo plano, sendo possível definir um triângulo equilátero ligando os centros das esferas.

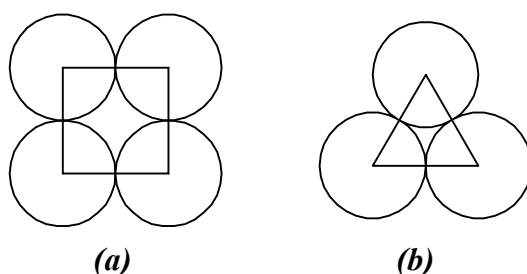


Figura 3.17 Tipos de faces existentes nos enchimentos regulares: a) face quadrada; b) face triangular.

O problema resume-se agora à determinação das células fundamentais para cada um dos enchimentos regulares e ao cálculo do número de faces de cada uma delas. Na Figura 3.18 são

apresentadas as células fundamentais para cada um dos enchimentos regulares, sendo de seguida descrita a forma como estas são determinadas.

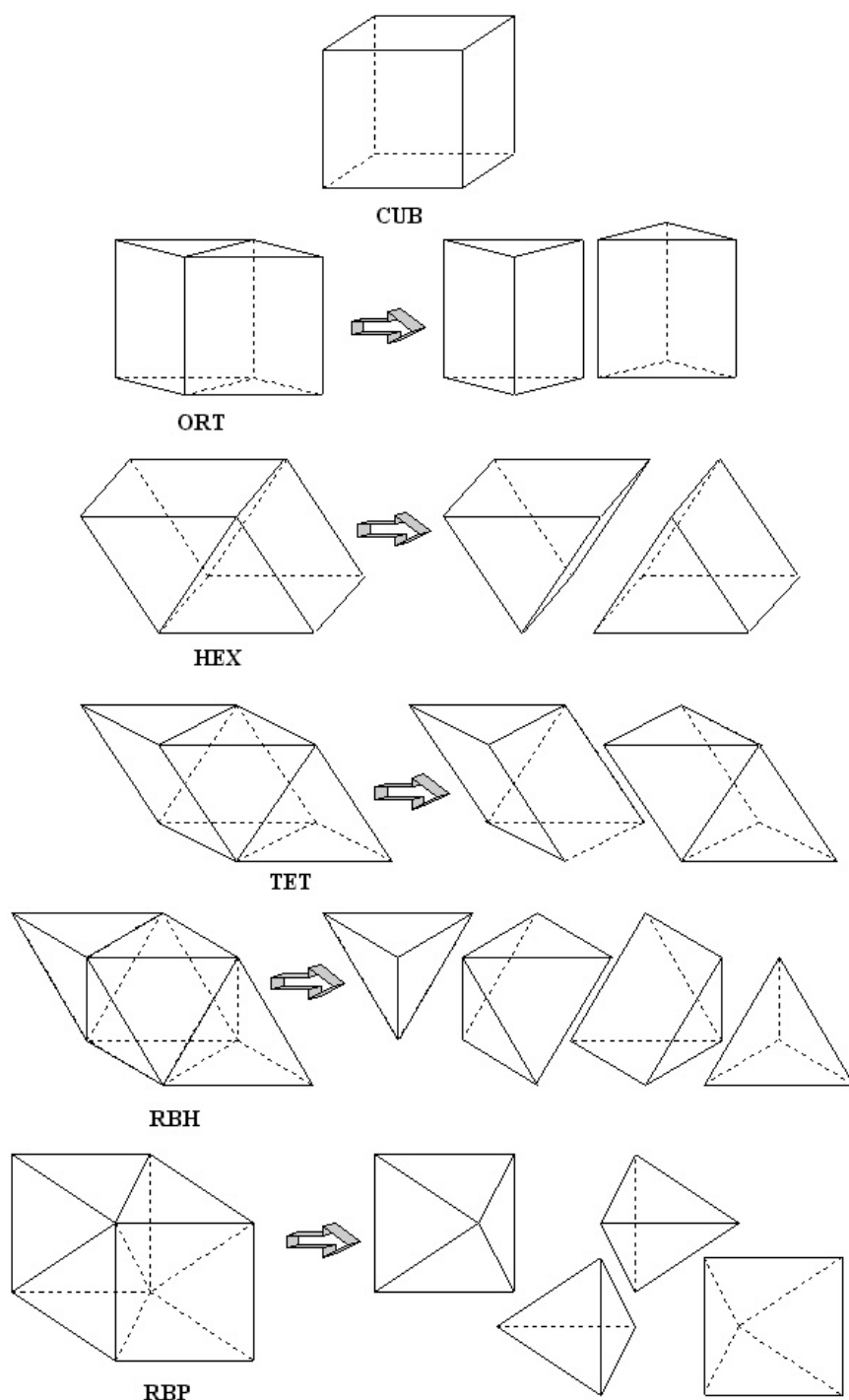


Figura 3.18 Células fundamentais para cada um dos enchimentos regulares.

No caso do enchimento cúbico, a estrutura mais simples, a célula fundamental é um cubo com vértices nos centros de quatro esferas tangentes entre si. Nesta célula apenas é possível definir faces quadradas, seis no total. A partir do enchimento cúbico é possível obter o enchimento ortorrômbo, bastando para tal deslocar cada linha de esferas de uma distância igual a meia

partícula, de modo a estas se encaixarem no espaço formado entre as partículas, tal como se representa esquematicamente na Figura 3.19. Aplicando a mesma transformação na célula do enchimento cúbico obtém-se um romboedro, podendo este ser dividido em duas partes, representando cada uma delas a célula fundamental do enchimento ortorrômbico, que possui três faces quadradas e duas faces triangulares.

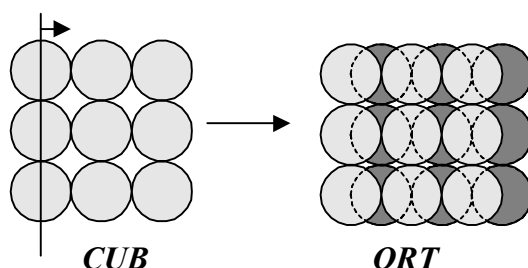


Figura 3.19 Obtenção da estrutura do enchimento ortorrômbico a partir da estrutura do enchimento cúbico.

O enchimento hexagonal é equivalente ao ortorrômbico, obtido se um sentido de observação diferente for usado, como se mostra na Figura 3.20. Assim, ambos os enchimentos são descritos pela mesma célula fundamental.

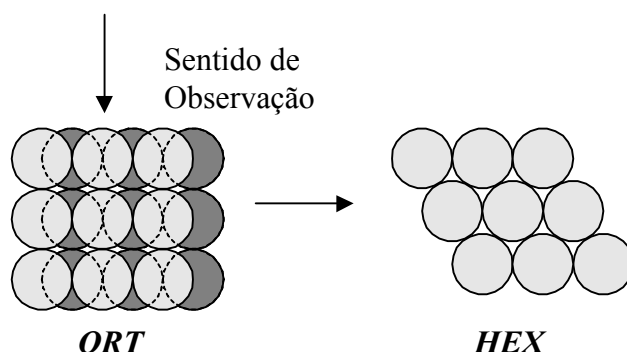


Figura 3.20 Equivalência entre os enchimentos ortorrômbico e hexagonal.

O enchimento tetragonal pode ser obtido a partir do enchimento hexagonal de uma forma semelhante à utilizada para a obtenção da estrutura ortorrômbica a partir da cúbica, como é representado na Figura 3.21. No entanto, esta deslocação é efectuada num plano distinto do considerado na conversão do enchimento cúbico no enchimento ortorrômbico. Tomando em consideração este aspecto, a partir do romboedro que representa a célula fundamental do enchimento hexagonal, a aplicação da mesma transformação no plano apropriado permite a obtenção da célula fundamental deste tipo de estrutura. Novamente, a célula obtida por este processo pode-se subdividir em duas mais simples, possuindo ambas a mesma porosidade do enchimento, com 5 faces, sendo 3 triangulares e 2 quadradas.

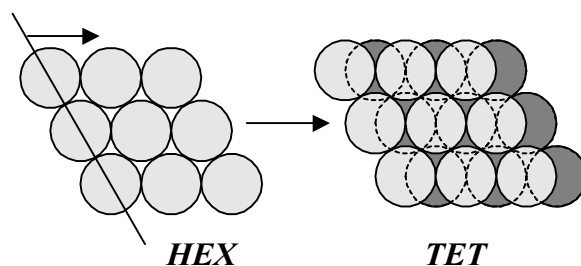


Figura 3.21 Obtenção do enchimento tetragonal por modificação da estrutura do enchimento hexagonal.

As estruturas dos dois enchimentos mais compactos, o romboédrico-piramidal e o romboédrico-hexagonal, podem ser obtidas pelo mesmo processo de deslocação recorrendo aos enchimentos ortorrômbo e hexagonal respectivamente. Na Figura 3.22 são apresentadas as translações de planos requeridas para cada uma das conversões.

Aplicando esta transformação à célula fundamental dos enchimentos ortorrômbo e hexagonal, obtemos uma célula similar à do enchimento tetragonal, mas em que duas faces quadradas se transformam em duas faces triangulares. A célula pode ser dividida em partes mais simples, neste caso pirâmides triangulares e quadrangulares. O problema da existência de dois tipos de elementos é resolvido observando-se que a junção das duas pirâmides triangulares resulta numa pirâmide quadrangular igual às outras duas.

A mesma conclusão poder ser obtida de forma independente, a partir da estrutura do enchimento romboédrico piramidal, sendo possível observar (ver Figura 3.16) que cada conjunto de quatro esferas no mesmo plano e tangentes entre si tem associada uma esfera no plano tangente imediatamente acima ou abaixo. A figura geométrica definida pelos segmentos de recta que ligam os centros das esferas é uma pirâmide quadrangular cujos vértices são os centros das esferas, e possui 5 faces, 4 triangulares e 1 quadrada.

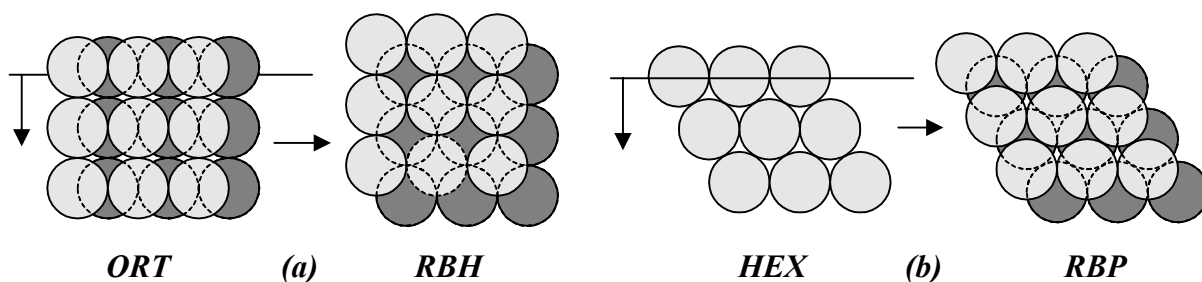


Figura 3.22 Obtenção de: a) enchimento romboédrico-hexagonal a partir do ortorrômbo; b) enchimento romboédrico-piramidal a partir do hexagonal.

Da análise geométrica pode-se concluir que para enchimentos regulares com a mesma estrutura correspondem células fundamentais iguais. Desta forma, dos seis enchimentos

regulares de esferas, é necessário tomar em consideração apenas quatro deles, sendo usado o enchimento ortorrômbico para descrever o par rombédrico/hexagonal e o enchimento romboédrico-piramidal para representar o par romboédrico-piramidal/romboédrico-hexagonal.

Na Tabela 3.6 apresenta-se o número de faces para cada uma das células fundamentais dos seis leitos de enchimento com estrutura regular considerados no modelo geométrico.

Tabela 3.6 Número de faces para cada um dos enchimentos regulares de esferas.

Tipo de Enchimento	Número total faces	Número faces quadradas	Número faces triangulares
Cúbico	6	6	-
Ortorrômbico	5	3	2
Tetragonal	5	2	3
Romboédrico-Piramidal	5	1	4

Os valores tabelados são usados na determinação dos valores de D , d e l efectuada nas secções seguintes, onde se fazem as hipóteses seguintes.

- O diâmetro médio das câmaras é igual ao diâmetro da maior esfera que pode ser incluída no interior do enchimento sem alterar a sua estrutura.
- O diâmetro médio dos canais é determinado de modo que o valor da porosidade de cada célula fundamental e do respectivo leito de enchimento sejam iguais. Como não é possível definir uma rede regular tridimensional para todos os enchimentos regulares, foi preterida a hipótese análoga à considerada para as câmaras, que d seria o diâmetro da maior esfera que pode percolar através do leito sem modificar a sua estrutura. No Apêndice A.2 mostra-se que as duas hipóteses produzem resultados concordantes nos extremos dos valores de porosidade nos quais o modelo geométrico é definido.
- O número de canais e câmaras associados a uma célula fundamental de um enchimento regular é igual ao número de faces triangulares e faces quadrangulares existentes na mesma respectivamente.

3.5.3 Determinação do Diâmetro Médio das Câmaras

Por hipótese o diâmetro da câmara é igual ao diâmetro da maior esfera que pode ser incluída no enchimento sem o alterar. Dependendo da estrutura dos enchimentos regulares, é possível ter uma de duas situações, representadas na Figura 3.23.

Para o enchimento cúbico, a câmara encontra-se no centro da célula, onde se encontra o espaço vazio com maior volume. O valor de D é igual à distância entre dois vértices opostos da célula ao qual foi subtraído o diâmetro das esferas, D_p , dado por

$$D = (\sqrt{3} - 1)D_p \quad (3.28)$$

Para os restantes enchimentos, o maior espaço vazio encontra-se associado às faces quadradas (como se mostra no Apêndice A.2.2). Admite-se então que o diâmetro das câmaras é igual ao diâmetro da maior esfera que pode atravessar uma face deste tipo. O diâmetro da câmara, D , é igual ao valor da diagonal do quadrado definido na Figura 3.23 ao qual foi subtraído D_p , ou seja

$$D = (\sqrt{2} - 1)D_p \quad (3.29)$$

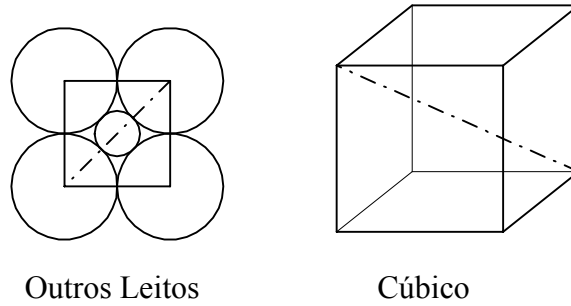


Figura 3.23 Situações possíveis para o cálculo de D .

Para leitos de enchimento com valores de porosidade diferentes dos regulares, D pode ser obtido interpolando entre os valores conhecidos. Para simplificar a utilização do modelo no gerador, é conveniente dispor de uma função contínua, evitando ter de se efectuar a interpolação sempre que se efectua a geração de uma rede. Assim, seguindo a forma das Equações 3.28 e 3.29, as expressões pretendidas podem ser escritas na forma

$$D = K_D(\varepsilon)D_p \quad (3.30)$$

em que K_D é uma função somente da porosidade do meio. Visto não existir nenhuma razão teórica para o uso de formas específicas para a função $K_D(\varepsilon)$, um polinómio foi seleccionado como função de interpolação devido à sua simplicidade. Apenas dois valores K_D estão definidos para toda a gama de valores de porosidade. O valor é constante e igual a $(\sqrt{2} - 1)$ na zona de porosidade entre 0.260 e 0.395, variando depois até $(\sqrt{3} - 1)$, o qual corresponde a uma porosidade de 0.476. Este comportamento é descrito dividindo toda a gama de valores em duas zonas. Para a zona em que a porosidade é menor que 0.395, o valor é constante. Na restante gama de valores, o polinómio de interpolação deverá verificar os valores de K_D nos pontos conhecidos e a primeira derivada no ponto comum a ambas as zonas deverá ser zero, devido ao valor constante de K_D na gama de porosidade baixa. Aplicando estas condições de interpolação, a seguinte função de interpolação é obtida, sendo representada na Figura 3.24.

$$K_D(\varepsilon) = (\sqrt{2} - 1) + 48.44(\varepsilon - 0.395)^2 \quad \varepsilon > 0.395 \quad (3.31)$$

$$K_D(\varepsilon) = (\sqrt{2} - 1) \quad \varepsilon \leq 0.395 \quad (3.32)$$

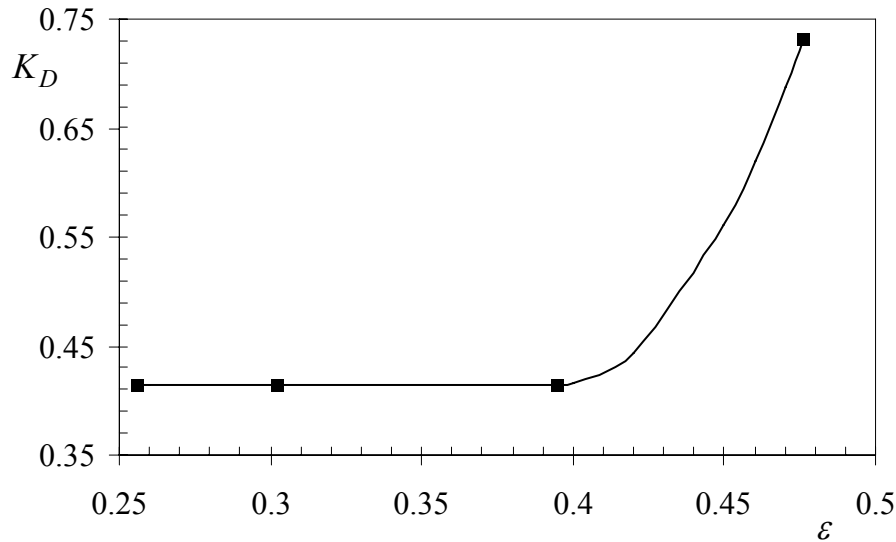


Figura 3.24 Valores (pontos) e correlação (linha) de K_D em função de ε .

3.5.4 Determinação do Diâmetro Médio e Comprimento dos Canais

Nesta secção são descritas as estratégias de determinação do valor do comprimento dos canais oblíquos, l , e do diâmetro dos canais, d . Dependendo das hipóteses impostas aos valores dos parâmetros e de como os balanços volúnicos são efectuados, é possível definir várias formas de determinar estes valores médios. Seguindo a metodologia da secção anterior, duas funções,

K_d e K_l , representando relações de proporcionalidade entre o valor médio e D_p , são introduzidas

$$l = K_l(\varepsilon, \theta) D_p \quad (3.33)$$

$$d = K_d(\varepsilon, \theta) D_p \quad (3.34)$$

Duas hipóteses fundamentais foram consideradas no modelo proposto, sendo uma relacionada com a forma da função $K_l(\varepsilon, \theta)$ e a outra com a inclusão ou não do volume das calotes polares originadas pela entrada dos canais nas câmaras. É possível usar qualquer uma delas de forma independente, permitindo deste modo a definição de quatro situações distintas.

Duas estratégias distintas foram estudadas na determinação de $K_l(\varepsilon, \theta)$. A mais simples consiste em admitir que l é igual a D_p , ou seja $K_l(\varepsilon, \theta) = 1$, forma sugerida inicialmente por Payatakes *et al.* (1973a). Geometricamente, as paredes dos canais são formadas pelas partículas do enchimento, pelo que o seu comprimento depende da distribuição de tamanhos e da forma das partículas. Desde que a distribuição das partículas não seja muito larga e não elas não possuam uma forma muito diferente da esférica, condições verificadas pelos enchimentos regulares, é válido supor que o comprimento médio dos canais é igual ao diâmetro médio das partículas. Payatakes *et al.* (1973a) utilizaram esta estratégia na descrição do escoamento através de um leito de enchimento, tendo observado boa concordância com os dados experimentais.

No entanto, admitir um valor *à priori* para a função $K_l(\varepsilon, \theta)$ limita a aplicabilidade do modelo, visto reduzir a possibilidade de inclusão de características geométricas e estruturais importantes do meio poroso em análise.

- Com excepção dos enchimentos cúbico e tetragonal, o comportamento hidrodinâmico de cada um dos enchimentos regulares depende do sentido principal de escoamento seleccionado. Este facto é devido às diferentes estruturas entre as linhas de partículas que são possíveis de definir e que são dependentes da direcção admitida, como se observa na Figura 3.16. O cálculo de D e de d é independente da orientação pois as células fundamentais definidas não tomam em consideração este aspecto, sendo a estratégia de determinação de l a única forma de o fazer.

- Não é possível determinar θ directamente a partir da análise geométrica das células fundamentais de cada um dos enchimentos regulares. No gerador desenvolvido, apenas a distribuição de comprimentos dos canais necessita deste valor, sendo conveniente então que a estratégia de determinação de l também permita determinar θ para se usar no gerador da rede.

De modo a incluir estes dois aspectos, foi implementada uma segunda estratégia, que permite determinar os valores de θ e l simultaneamente. Como hipótese principal do modelo, é imposto que a distância percorrida pelo fluido segundo a direcção principal de escoamento é igual tanto no enchimento regular como na rede. Esta condição assegura também que o gradiente de pressão hidrostática é igual nos dois sistemas, o que pode ser importante em situações em que a influência da gravidade não pode ser desprezada na descrição do escoamento. Por outro lado, esta estratégia permite a inclusão da tortuosidade do meio poroso, permitindo deste modo a inclusão de mais características do mesmo na rede e o cálculo de valores mais representativos.

Com respeito à inclusão do volume das calotes polares, foram analisados os casos em que este volume é considerado ou desprezado nos balanços volúmicos que é necessário efectuar nas células fundamentais de cada um dos enchimentos regulares. Os resultados obtidos com as duas hipóteses serão comparados de modo a determinar se a sua inclusão é significativa ou não. A aplicação da Equação 3.4 para o cálculo de K_l com a inclusão do volume das calotes impede a determinação independente deste valor e de K_d , pelo que os valores das duas constantes devem ser determinadas simultaneamente. O comprimento das calotes é também considerado como proporcional a D_p , sendo definido pela expressão seguinte

$$h = K_h D_p \quad (3.35)$$

A expressão da constante de proporcionalidade K_h pode ser obtida substituindo na Equação 3.5 as definições de K_D e de K_d , resultando na seguinte expressão

$$K_h = 0.5K_D \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{K_d}{K_D} \right)^2} \right] \quad (3.36)$$

Estas hipóteses permitem classificar os vários modelos, sendo as características de cada um deles apresentadas na Tabela 3.7. Incluídas nas características de cada um dos modelos

encontra-se também a estratégia geral que deve ser usada na determinação dos valores de K_d e de K_l e a dependência destes valores em função do valor do ângulo θ .

Para a determinação de d pode ser primeiro tentada a hipótese que o valor do diâmetro médio dos canais é igual ao diâmetro da maior esfera que pode percolar pelo enchimento sem alterar a sua estrutura. Esta definição é válida se for possível definir no leito de enchimento regular uma rede de câmaras e canais, o que é possível fazer-lo apenas para os leitos cúbico e romboédrico-piramidal, como se pode ver a partir das células fundamentais definidas para cada um deles. No leito cúbico, d é igual ao diâmetro da maior esfera que pode atravessar uma face quadrangular, correspondente à expressão

$$d = (\sqrt{2} - 1)D_p \quad (3.37)$$

Tabela 3.7 Classificação dos modelos propostos para a determinação dos valores médios dos parâmetros da rede.

Modelo	Hipóteses		Determinação de l_o e d	Dependência de θ
	K_l	K_h		
T1	Depende do enchimento	$= 0$	Independente	Sim
T2	Depende do enchimento	> 0	Simultânea	Sim
T3	1	$= 0$	Independente	Não
T4	1	> 0	Independente	Não

Para o leito romboédrico-piramidal, d corresponde à maior esfera que pode atravessar uma face triangular, podendo ser expresso na forma

$$d = \frac{2\sqrt{3} - 3}{3} D_p \quad (3.38)$$

Para os dois leitos regulares restantes não é possível definir uma rede regular, sendo necessário impor que a porosidade da célula fundamental deve ser igual à do leito.

Um problema surge da necessidade de se terem de usar duas formas diferentes para a determinação de d . Um modelo envolvendo um só método de determinação do diâmetro médio dos canais é claramente superior a um modelo misto pois a coerência do mesmo é assegurada e é possível comparar os valores obtidos para diferentes leitos regulares. A única

forma possível de esta situação ocorrer é através da imposição da condição de igualdade de porosidade entre a célula fundamental e o leito, sendo este o método de determinação de d usado neste trabalho e que será descrito em seguida. Os valores de d determinados através a partir da definição de canal servem de referência aos valores determinados pela estratégia completa e representam os valores limites entre os quais d se deverá encontrar.

3.5.4.1 Modelo T1

Impondo que a distância percorrida pelo fluido segundo a direcção principal de escoamento é igual tanto no enchimento regular como na rede implica que a distância entre duas camadas de partículas do enchimento é igual à distância entre duas filas de câmaras da rede. Na Figura 3.25 é apresentada a situação observada para um enchimento regular cúbico.

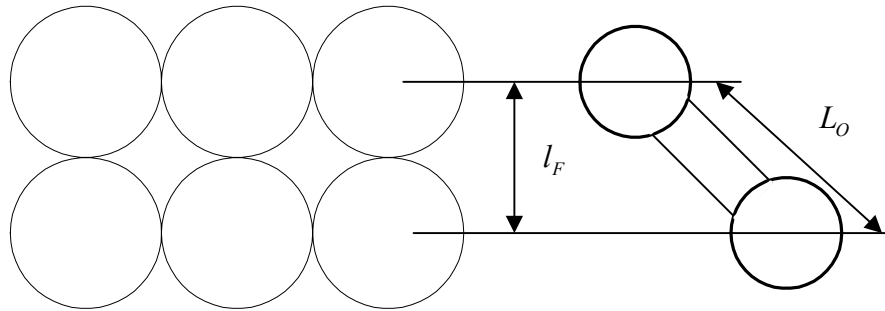


Figura 3.25 Relação entre as distâncias entre filas de esferas e câmaras de uma rede para um enchimento cúbico.

Se l_F representar a distância entre duas camadas contíguas de esferas do enchimento e de câmaras da rede, é possível determinar L_O a partir da expressão

$$l_F = L_O \cos \theta \quad (3.39)$$

A partir deste valor, de acordo com o algoritmo de determinação da distribuição de comprimentos dos canais, é possível determinar l usando a Equação 3.19, desprezando o comprimento das calotes

$$l = L_O - D \quad (3.40)$$

A Equação 3.39 inclui explicitamente a influência de θ . O valor deste parâmetro não pode ser determinado apenas da análise geométrica das células dos enchimentos regulares de esferas. Por exemplo, para o enchimento cúbico, é possível definir uma rede tridimensional de câmaras e canais, em que os canais atravessam as faces quadrangulares das células fundamentais, e as câmaras se encontram no centro das mesmas. Os canais fazem ângulos

com a vertical de 0 ou de $\pi/2$, valores que não podem ser usados no gerador da rede da forma como este foi implementado.

Com base na estrutura da rede considerada neste trabalho e na definição da tortuosidade, T , de um meio poroso, é possível relacionar θ e T . Na Secção 3.5.5 é descrito como é possível usar correlações da tortuosidade em função da porosidade para se determinar θ . De acordo com a definição de tortuosidade apresentada na Secção 2.3.2.2, ambos os parâmetros estão relacionados com a distância média percorrida pelas partículas de fluido através da rede de câmaras e canais. Em particular, o aumento de θ implica um aumento da distância percorrida pelas partículas e uma redução da tortuosidade, pelo que os dois parâmetros estão inversamente relacionados. Na descrição que se segue assume-se que θ é conhecido, permitindo então determinar K_l apenas em função de ε e das características geométricas dos leitos de enchimento de esferas.

Para cada um dos leitos de enchimento regulares é possível definir a distância entre duas camadas de esferas com base nas estruturas tridimensionais apresentadas na Figura 3.16. Observa-se que existem quatro possibilidades distintas para o posicionamento relativo entre as partículas de duas camadas contíguas. A estrutura de cada uma delas assim como a nomenclatura utilizada na descrição do modelo são apresentadas na Figura 3.26.

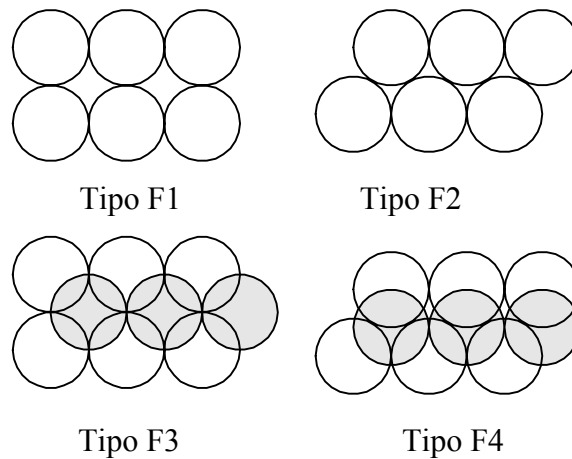


Figura 3.26 Diferentes estruturas geométricas existentes nos enchimentos regulares entre duas linhas de esferas contíguas.

O valor de l_F é diferente para qualquer uma das estruturas apresentadas na Figura 3.26, sendo em qualquer dos casos função apenas de D_p . A influência da porosidade deve ser tomada portanto em conta na definição de l_F , tendo-se considerado válida a seguinte expressão

$$l_F = K_F(\varepsilon)D_p \quad (3.41)$$

em que $K_F(\varepsilon)$ é uma função da porosidade que representa a variação da distância entre duas camadas de esferas com a porosidade. Substituindo as Equações 3.39 e 3.41 na Equação 3.33, após simplificação obtém-se a seguinte expressão

$$K_l(\varepsilon, \theta) = K_F(\varepsilon)\sec(\theta) - K_D(\varepsilon) \quad (3.42)$$

em que $K_D(\varepsilon)$ foi determinado na Secção 3.5.3. Na determinação de $K_F(\varepsilon)$ foram analisadas as estruturas geométricas que é possível definir entre duas camadas contíguas de esferas, tendo-se obtido os resultados apresentados na Tabela 3.8.

Tabela 3.8 Valores de K_F para os vários tipos de estrutura geométrica entre linhas.

Tipo de estrutura	F1	F2	F3	F4
K_F	1	$\sqrt{3}/2$	$\sqrt{2}/2$	$\sqrt{6}/3$

No entanto, aos valores calculados não podem ser usados directamente na determinação da função $K_F(\varepsilon)$, visto que a correspondência entre os tipos de estrutura e os leitos de enchimento regulares não é unívoca. Em particular, com excepção dos leitos cúbico e tetragonal, diferentes tipos de estruturas coexistem, mesmo para leitos com o mesmo valor de porosidade, como é o caso dos leitos ortorrômbico e hexagonal. Estas diferenças de estrutura implicam diferenças no comportamento hidrodinâmico dos leitos, devido à diferente orientação das partículas em relação ao sentido principal de escoamento do fluido. Os resultados experimentais de Martin *et al.* (1951) confirmam estas conclusões mas mostram também que o factor controlante é a porosidade dos leitos regulares e não a sua estrutura interna. Deste modo, assume-se no modelo geométrico que leitos com igual ε são descritos pelo mesmo conjunto de valores médios, implicando comportamento hidrodinâmico idêntico.

Na Tabela 3.9 é apresentado o tipo e o número dos diferentes tipos de estruturas existentes entre as linhas de esferas para cada um dos leitos regulares. Para determinar o número de estruturas, analisou-se como é que as esferas encaixam segundo cada um dos eixos cartesianos. Para leitos em que existe mais do que um tipo de estrutura, K_F é a média pesada dos valores de K_F das estruturas existentes neste, permitindo assim correlacionar os valores obtidos com a porosidade.

Os resultados obtidos mostram que para o par ortorrômico/hexagonal K_F é igual, de acordo com o facto de ser possível obter um a partir do outro e vice-versa mudando o sentido de observação da estrutura (ver Figura 3.20). Para o par romboédrico-piramidal/romboédrico-hexagonal, apesar de possuírem o mesmo valor de porosidade, a estrutura geométrica é diferente, resultando em valores de K_F diferentes.

Tabela 3.9 Número de casos diferentes e valor da média pesada de K_F para cada um dos enchimentos regulares.

Tipo de Enchimento	Número de Filas				Valor médio de K_F
	Tipo F1	Tipo F2	Tipo F3	Tipo F4	
CUB	3	0	0	0	1
ORT	2	1	0	0	$\frac{4 + \sqrt{3}}{6}$
HEX	2	1	0	0	$\frac{4 + \sqrt{3}}{6}$
TET	0	3	0	0	$\frac{\sqrt{3}}{2}$
RBP	2	0	1	0	$\frac{4 + \sqrt{2}}{6}$
RBH	0	2	0	1	$\frac{3\sqrt{3} + \sqrt{6}}{9}$

De acordo com a hipótese de que leitos de enchimento com igual ε são descritos pelo mesmo conjunto de valores médios das distribuições das dimensões características dos elementos da rede, neste caso é usado o valor médio de K_F obtido para os dois leitos regulares. Os valores de K_F determinados para cada um dos leitos de enchimento regulares são apresentados na Tabela 3.10.

Os dados apresentados na tabela anterior permitem exprimir K_F em função da porosidade, ou seja determinar a função $K_F(\varepsilon)$. Alguns aspectos importantes foram tomados em conta na sua determinação.

- De acordo com a estrutura das filas de esferas apresentadas na Figura 3.26, é impossível a existência de filas de esferas com uma distância entre centros superior a D_p , se admitirmos que os leitos de enchimento são estáveis. É possível construir leitos de enchimentos com distâncias entre filas superior, usualmente designados por leitos

distendidos, mas, têm de ser construídos e mantidos com a estrutura pretendida de forma artificial (Wentz e Thodos, 1963, Susskind e Becker, 1967). Deste modo, é imposto que $K_F(\varepsilon) = 1$ se $\varepsilon = 0.476$.

- Apesar do modelo não permitir a descrição de leitos de enchimento com porosidade superior a 0.476, é admitido que para casos em que a porosidade possua um valor superior, a distância entre filas é sempre constante e igual a D_p , pelo que a função $K_F(\varepsilon)$ deverá ter a primeira derivada nula para $\varepsilon = 0.476$.

Tabela 3.10 Valores de K_F para os quatro enchimentos regulares.

Tipo de Enchimento	K_F
CUB	1
ORT	$\frac{4 + \sqrt{3}}{6}$
TET	$\frac{\sqrt{3}}{2}$
RBP	$\frac{12 + 6\sqrt{3} + 3\sqrt{2} + 2\sqrt{6}}{36}$

Verificou-se que um polinómio de terceiro grau correlaciona satisfatoriamente os valores de K_F em função da porosidade, sendo este apresentado na Figura 3.27 em conjunto com os valores calculados analiticamente. A expressão geral pode ser escrita na forma

$$K_F(\varepsilon) = 0.8740 - 0.5859(\varepsilon - 0.26) + 13.53(\varepsilon - 0.26)^2 - 37.57(\varepsilon - 0.26)^3 \quad (3.43)$$

Utilizando a Equação 3.42, é possível determinar K_l conhecidos os valores da porosidade e do ângulo θ . Na Figura 3.28 são apresentadas as funções de K_l em função de ε para quatro valores de θ : $\pi/4$, $5\pi/18$, $11\pi/36$ e $\pi/3$, correspondentes a 45° , 50° , 55° e 60° respectivamente. Apesar de ser indiferente a utilização de ângulos em radianos ou em graus, preferiu-se a primeira forma por ser a forma natural de caracterizar o valor de um ângulo. Os valores usados foram seleccionados com base nas restrições que a estrutura da rede impõem ao gerador da rede (ver Secção 3.4.8.1). Nas Secções 3.5.5 e 3.6.4 este aspecto será analisado mais em detalhe. De forma a distinguir as curvas baseadas em correlações ou funções, como por exemplo a Figura 3.28, e aquelas baseadas em pontos calculados para cada um dos leitos

de enchimento regulares, como por exemplo a Figura 3.27, apenas neste último caso é que são representados os pontos calculados.

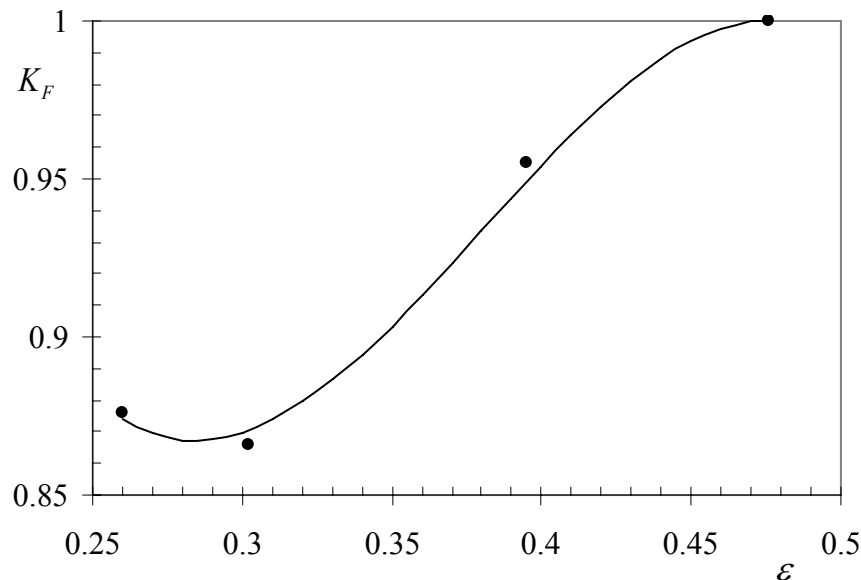


Figura 3.27 Valores e curva de correlação de K_F em função da porosidade.

Como todas as curvas apresentadas na Figura 3.28 são derivadas a partir da Equação 3.42, estas possuem naturalmente a mesma forma. Duas características principais podem ser observadas.

- É possível observar em cada uma delas um máximo e um mínimo. O máximo ocorre na gama de porosidade entre os leitos de enchimento regular cúbico e ortorrômico. Como nesta zona ocorre uma forte variação de K_D , a única forma de verificar a porosidade das células fundamentais é através do aumento de K_I . A existência de um valor mínimo para baixos valores de porosidade é atribuível à existência de um mínimo da função $K_D(\varepsilon)$, como se observa na Figura 3.27, para um valor de porosidade correspondente ao leito de enchimento regular tetragonal. As variações em torno deste mínimo são menos acentuadas do que no máximo, visto que K_D é constante para os enchimentos romboédrico-piramidal e tetragonal, permitindo deste modo que a variação de porosidade entre as células fundamentais seja compensada principalmente por variações em K_d .

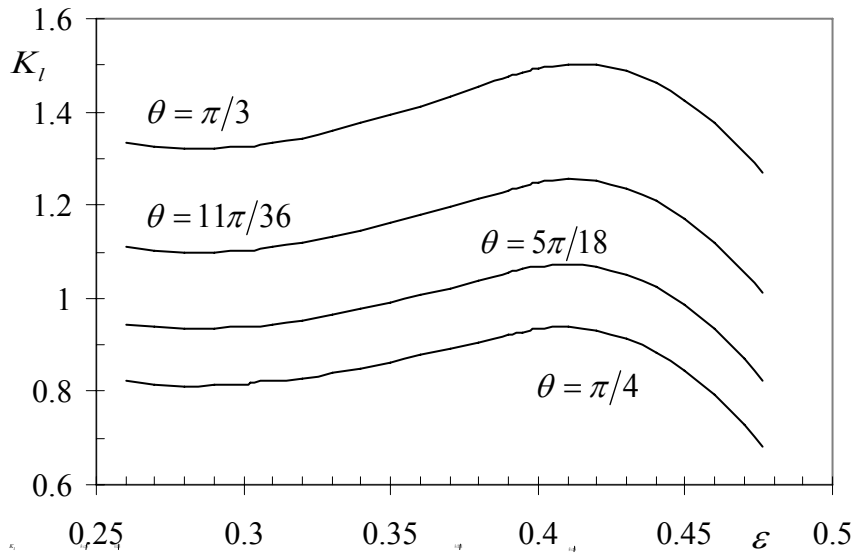


Figura 3.28 Curvas de correlação K_l em função de ε para quatro valores de θ - Modelo T1.

- Quanto maior for o θ maior é K_l , implicando valores do comprimento médio dos canais oblíquos mais elevados. O aumento de θ implica a geração de uma rede mais larga que comprida, que apenas através do aumento de l pode ser conseguido, como se pode observar na Figura 3.28.

A estratégia de determinação de d passa pela verificação da igualdade de valores de porosidade entre o enchimento regular e a sua célula fundamental do mesmo, assegurando também que a razão de volumes se mantém também com a rede de câmaras e canais equivalente. Fazendo um balanço de vazios a uma célula fundamental de qualquer um dos enchimentos regulares, desprezando a influência das calotes, obtém-se a seguinte equação geral que permite a determinação de K_d

$$\varepsilon K_{cel} = \left[\frac{\pi}{4} N_{can}^{eq} K_d^2 K_l + \frac{\pi}{6} N_{cam}^{eq} K_d^3 - \frac{\pi}{3} N_{cal}^{eq} V_{Cal} \right] \quad (3.44)$$

em que N_{can}^{eq} , N_{cam}^{eq} e N_{cal}^{eq} representam respectivamente o número de canais e câmaras equivalentes do enchimento e o número de calotes que é possível definir entre as câmaras e os canais da rede, sendo K_{cel} uma constante de proporcionalidade entre o volume da célula e D_p . Como todos os valores dos parâmetros são conhecidos e assumindo que $V_{Cal} = 0$, a Equação 3.44 pode ser resolvida em ordem a K_d , obtendo-se a seguinte expressão

$$K_d = \sqrt{\frac{\varepsilon K_{Cel} - \frac{\pi}{6} N_{Cam}^{eq} K_D^3}{\frac{\pi}{4} N_{Can}^{eq} K_l}} \quad (3.45)$$

As variáveis N_{can}^{eq} , N_{cam}^{eq} e N_{cal}^{eq} podem ser determinadas a partir das características geométricas das células fundamentais. Na sua determinação assumiu-se que, com a excepção do leito regular cúbico, o número de câmaras e canais equivalentes é igual a metade do número de faces quadrangulares e triangulares respectivamente existente em cada uma das células fundamentais. Como cada uma dessas faces apenas contém metade de uma câmara ou canal, o factor 0.5 é usado na determinação de N_{can}^{eq} e N_{cam}^{eq} . Para o leito cúbico, considera-se que existe uma câmara no interior da célula e o número de canais é igual ao número de faces quadrangulares da célula. O número de calotes equivalentes é igual ao número de faces quadrangulares, para o leito cúbico, ou ao número de faces triangulares para os restantes leitos regulares.

O parâmetro K_{Cel} é determinado da análise geométrica das células fundamentais de cada um dos leitos regulares, apresentando-se os valores obtidos na Tabela 3.11 conjuntamente com os valores de N_{can}^{eq} , N_{cam}^{eq} e N_{cal}^{eq} necessários para a determinação de K_d usando a Equação 3.44.

Tabela 3.11 Valores de N_{can}^{eq} , N_{cam}^{eq} , N_{cal}^{eq} e K_{Cel} para cada uma das células fundamentais dos enchimentos regulares.

Enchimento	K_{Cel}	N_{cam}^{eq}	N_{can}^{eq}	N_{cal}^{eq}
CUB	1	1	3	6
ORT	$\frac{\sqrt{3}}{4}$	1.5	1	2
TET	$\frac{\sqrt{3}}{4}$	1	1.5	3
RBP	$\frac{\sqrt{2}}{6}$	0.5	2	4

Os valores de K_l e $K_F(\varepsilon)$ são determinados das Equações 3.42 e 3.43 respectivamente, assumindo-se previamente um valor para θ . Na Secção 3.5.5 será descrita em detalhe uma das estratégias possíveis para a determinação de θ em função da porosidade baseada na

definição de tortuosidade e na utilização de correlações deste parâmetro em função da porosidade.

Os valores de K_d para cada um dos leitos de enchimento regulares foram determinados para o mesmo conjunto de valores de θ usado na secção anterior, sendo os resultados apresentados na Figura 3.29. Observa-se que K_d é proporcional ao valor da porosidade e que os valores de K_d variam de uma forma monótona crescente em função de ε . A resistência de um meio poroso ao escoamento é directamente proporcional a d , mesmo em condições de escoamento não linear, mas inversamente proporcional ao valor da porosidade, pelo que os valores mais elevados de K_d devem ocorrer para valores de ε elevados, como foi obtido pelo modelo. Independentemente do valor de θ , K_d tende para um patamar quando ε tende para 0.476, na vizinhança do limite superior de validade do modelo geométrico, resultando também num patamar na resistência total da rede ao escoamento.

Por outro lado, o aumento de θ resulta em valores de K_d mais baixos, comportamento oposto ao observado nos valores calculados de K_l , como se pode observar na Figura 3.28. Com o aumento de θ , K_l tem de aumentar para permitir o aumento da tortuosidade do meio poroso, resultando em valores de K_d mais baixos para verificar a condição de igual porosidade entre a porosidade das células fundamentais e dos leitos de enchimento regulares. É de esperar ainda que o aumento da tortuosidade do meio poroso resulte numa resistência ao escoamento superior, resultado do maior percurso do fluido através deste, encontrando-se a variação de d em função de θ de acordo com esta conclusão.

De modo a representar a variação monótona e assintótica de K_d em função de ε , foi seleccionada uma função exponencial da forma

$$K_d(\varepsilon, \theta) = a_d(\theta) - b_d(\theta) \exp\left[-\frac{(\varepsilon - 0.260)}{c_d(\theta)}\right] \quad (3.46)$$

tendo-se assumido que as constantes são função apenas de θ , sendo os valores obtidos para o conjunto de valores apresentados na Tabela 3.12.

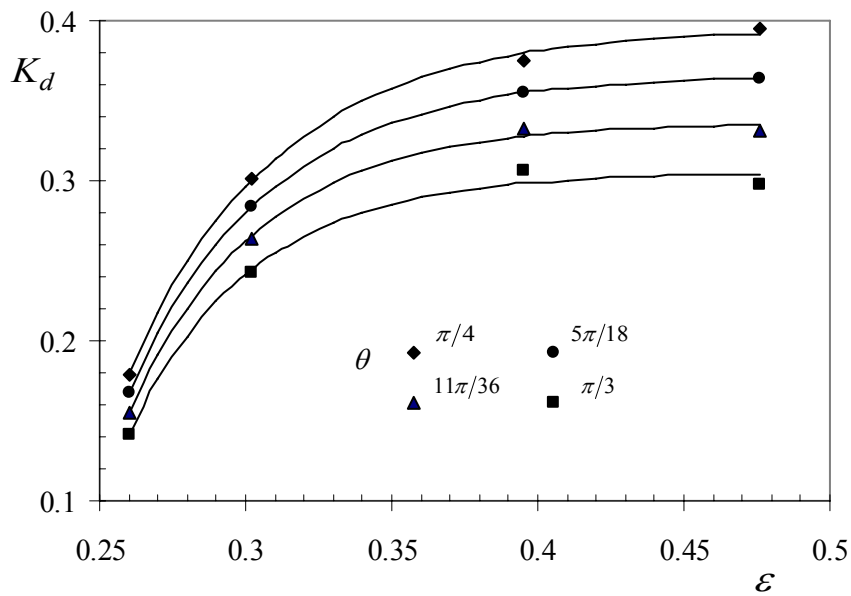


Figura 3.29 Valores e curvas de correlação de K_d em função de ε para quatro valores típicos de θ - Modelo T1.

Os valores das constantes $a_d(\theta)$, $b_d(\theta)$ e $c_d(\theta)$ são bem correlacionados pelas rectas seguintes

$$a_d(\theta) = 0.4218 - 0.3902\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.47)$$

$$b_d(\theta) = 0.2309 - 0.2385\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.48)$$

$$c_d(\theta) = 0.0501 - 0.0299\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.49)$$

Tabela 3.12 Constantes das funções de correlação de K_d em função de θ - Modelo T1.

θ (rad)	Valores dos Coeficientes		
	a_d	b_d	c_d
$\pi/4$	0.4126	0.2316	0.0502
$5\pi/18$	0.3791	0.2100	0.0475
$11\pi/36$	0.3448	0.1890	0.0447
$\pi/3$	0.3105	0.1681	0.0424

Não tomar em conta o volume das calotes esféricas originadas pelas entradas dos canais nas câmaras permitiu determinar independentemente os valores de K_d e K_l . De acordo com os resultados da Secção 3.4.8.3, esta hipótese é válida desde que a razão entre os diâmetros da câmara e do canal associados seja menor que 0.8. No modelo geométrico, a razão entre o diâmetro da câmara e do canal é igual à razão entre os factores de proporcionalidade K_d e K_D . Na Figura 3.30 são apresentados os valores de K_d/K_D em função da porosidade para os quatro valores de θ considerados anteriormente, observando-se que esta razão de aproxima de um para valores de porosidade em redor de 0.4, correspondente ao leito de enchimento regular ORT. De acordo com os resultados apresentados na Figura 3.13 para gama de valores de porosidade entre 0.35 e 0.45 a influência do volume das calotes deverá ser tomado em consideração. Observa-se também que quanto maior for θ , menor a gama de valores de porosidade em que o volume das calotes deve ser tomado em conta.

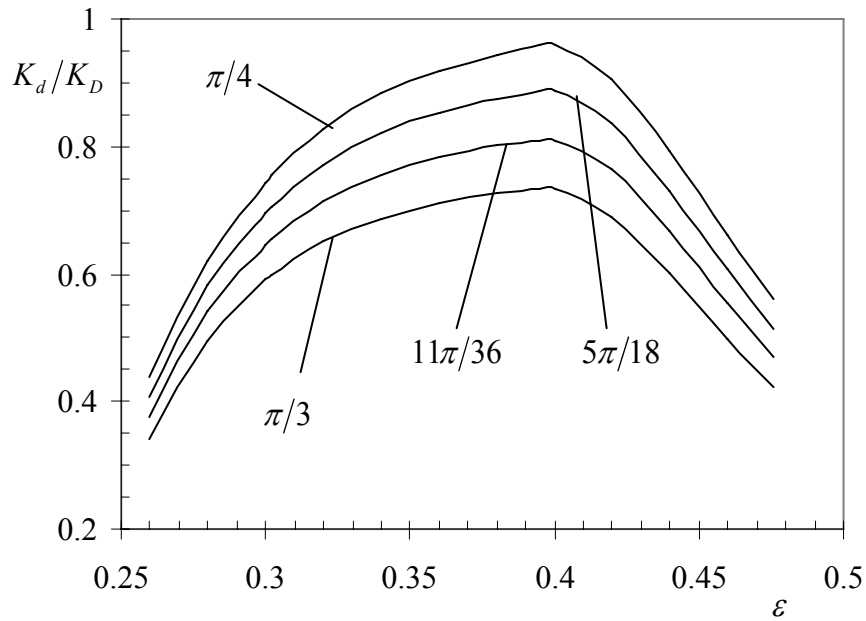


Figura 3.30 Razão K_d/K_D para o Modelo T1 para diferentes valores de θ .

3.5.4.2 Modelo T2

Quando o volume das calotes esféricas é incluído, as Equações 3.42 e 3.44 devem ser modificadas, passando a ter a seguinte forma

$$K_l(\varepsilon, \theta) = K_F(\varepsilon) \sec(\theta) - K_D(\varepsilon) + 2K_h(\varepsilon, \theta) \quad (3.50)$$

$$\varepsilon K_{cel} = \begin{bmatrix} \frac{\pi}{4} N_{can}^{eq} K_d^2(\varepsilon, \theta) K_l(\varepsilon, \theta) + \frac{\pi}{6} N_{cam}^{eq} K_D^3(\varepsilon) - \\ \frac{\pi}{3} N_{cal}^{eq} K_h^2(\varepsilon, \theta) [1.5 K_D(\varepsilon) - K_h(\varepsilon, \theta)] \end{bmatrix} \quad (3.51)$$

em que $K_D(\varepsilon)$ é definido pelas Equações 3.31 e 3.32 e $K_F(\varepsilon)$ é definido pela Equação 3.43. De acordo com as Equações 3.35 e 3.36, K_h é uma função de K_D e de K_d , de modo que as Equações 3.50 e 3.51 formam um sistema de equações, que, conhecidos os valores de ε e de θ , permitem a determinação dos valores de K_d e K_l . Na Figura 3.31 e Figura 3.32 são representados os valores de ambas as variáveis em função de ε para o mesmo conjunto de valores de θ utilizados nas secções anteriores.

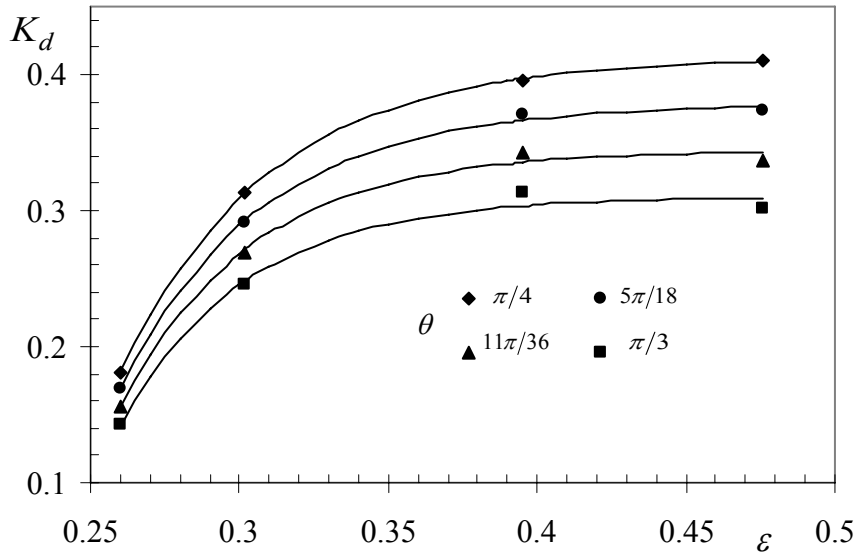


Figura 3.31 Valores e curvas de correlação de K_d em função de ε para quatro valores de θ - Modelo T2.

Os valores de $K_d(\varepsilon, \theta)$ obtidos foram correlacionados por uma função exponencial da forma apresentada na Equação 3.46, sendo os valores dos coeficientes em função de θ apresentados na Tabela 3.13.

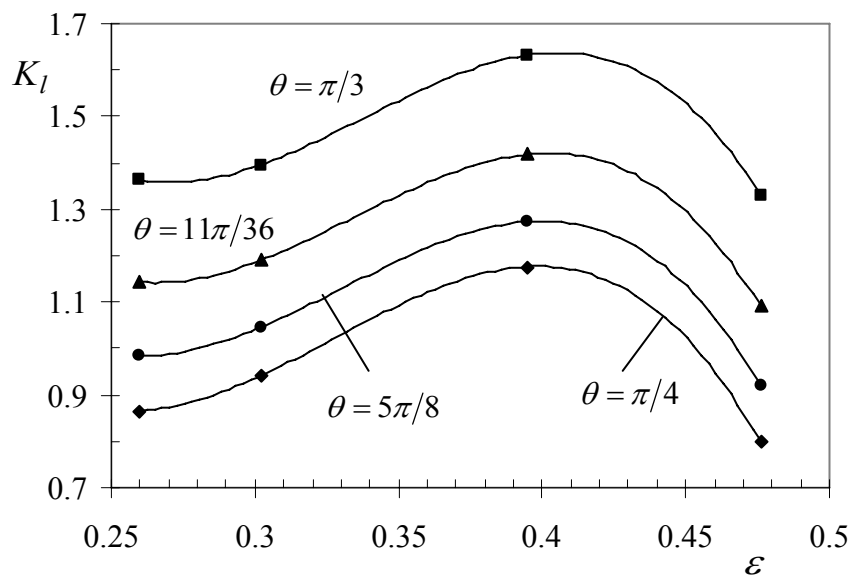


Figura 3.32 Valores e curvas de correlação de K_l em função de ε para quatro valores de θ - Modelo T2.

Tabela 3.13 Constantes das funções de correlação de K_d em função de θ - Modelo T2.

θ (rad)	Valores dos Coeficientes		
	a_d	b_d	c_d
$\pi/4$	0.3948	0.2150	0.0511
$5\pi/18$	0.3659	0.1983	0.0475
$11\pi/36$	0.3363	0.1815	0.0446
$\pi/3$	0.3050	0.1636	0.0422

Os valores dos coeficientes podem ser correlacionados em função de $\theta - \pi/4$ pelas rectas seguintes

$$a_d(\theta) = 0.3954 - 0.3429\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.52)$$

$$b_d(\theta) = 0.2152 - 0.1957\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.53)$$

$$c_d(\theta) = 0.0508 - 0.0339\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.54)$$

Os valores de K_l foram correlacionados usando polinômios de terceiro grau na forma

$$K_l(\varepsilon, \theta) = a_l(\theta) + b_l(\theta)(\varepsilon - 0.26) + c_l(\theta)(\varepsilon - 0.26)^2 + d_l(\theta)(\varepsilon - 0.26)^3 \quad (3.55)$$

sendo os coeficientes obtidos para vários valores de θ tabelados na Tabela 3.14.

Tabela 3.14 Constantes dos polinômios de interpolação de K_l em função de θ - Modelo T2.

θ (rad)	Valores dos Coeficientes			
	a_l	b_l	c_l	d_l
$\pi/4$	0.8654	0.347	43.73	-216.6
$5\pi/18$	0.9840	0.351	33.66	-169.7
$11\pi/36$	1.143	-0.520	48.43	-218.3
$\pi/3$	1.363	-1.039	53.08	-226.6

Os valores dos coeficientes podem ser correlacionados em função de $\theta - \pi/4$ por polinômios.

Para $a_l(\theta)$ obteve-se um polinômio quadrático na forma

$$a_l(\theta) = 0.8664 + 1.024\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) + 3.316\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right)^2 \quad (3.56)$$

Enquanto os restantes coeficientes são bem representados por polinômios de terceiro grau

$$b_l(\theta) = 0.3470 + 9.749\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) - 138.0\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right)^2 + 307.8\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right)^3 \quad (3.57)$$

$$c_l(\theta) = 43.73 - 393.2\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) + 3944\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right)^2 - 8808\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right)^3 \quad (3.58)$$

$$d_l(\theta) = -216.6 + 1604\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right) - 15186\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right)^2 + 34052\left(\theta - \frac{\pi}{4}\right)^3 \quad (3.59)$$

Comparando os resultados apresentados na Figura 3.29 e Figura 3.31 para K_d , e na Figura 3.28 e Figura 3.32 para K_l , observa-se uma semelhança qualitativa entre as curvas de correlação obtidas. Esta observação reforça a ideia de que na maior parte dos casos, a influência das calotes pode ser desprezada com um erro desprezável. Mais à frente os dois

modelos são analisados de modo a determinar qual destes é o mais adequado do ponto de vista geométrico.

3.5.4.3 Modelos T3 e T4

Na introdução da Secção 3.5.4 foram referidos dois modos diferentes para determinar $K_l(\varepsilon, \theta)$. A mais geral, considerada nas secções anteriores, admite que o valor pretendido é função das características do meio poroso. A outra hipótese assume que K_l é constante e independente dos valores de ε ou θ . Por limitações geométricas, K_l deve ser aproximadamente igual a 1, tendo sido utilizado $K_l = 1$ no desenvolvimento dos Modelos T3 e T4. As equações de balanço aos volumes das células fundamentais dos vários leitos de enchimento regulares simplificam-se, passando os valores calculados a ser função somente da porosidade do leito de enchimento. Como não se procura manter a igualdade de valores entre a altura do leito real e da rede, o parâmetro K_F deixa ainda de ter significado.

Quando o volume das calotes esféricas é tomado em conta, a Equação 3.51 reduz-se a

$$\varepsilon K_{cel} = \left[\frac{\pi}{4} N_{can}^{eq} K_d^2(\varepsilon) + \frac{\pi}{6} N_{cam}^{eq} K_D^3(\varepsilon) - \frac{\pi}{3} N_{cal}^{eq} K_h^2(\varepsilon) [1.5 K_D(\varepsilon) - K_h(\varepsilon)] \right] \quad (3.60)$$

em que $K_D(\varepsilon)$ é definido da forma descrita na Secção 3.5.3. Deste modo, o parâmetro $K_h(\varepsilon)$ é função apenas de K_d , pelo que substituindo a Equação 3.35 na Equação 3.60 se obtém uma equação não linear somente em função de K_d .

Ao procurar determinar o valor para o enchimento ortorrômbico, verificou-se que era impossível determinar K_d que verificasse a restrição $d < D$. Deste modo, apenas é possível usar três valores para a determinação das constantes da função exponencial de correlação, passando esta a ser equivalente a uma função de interpolação, sendo esta expressa na forma

$$K_d = 0.3471 - 0.1808 \exp \left[- \frac{(\varepsilon - 0.260)}{0.0358} \right] \quad (3.61)$$

Os pontos obtidos e a função de interpolação são apresentados na Figura 3.33. Observa-se um comportamento similar ao já observado atrás no modelo com K_l variável, embora seja possível observar uma curvatura mais elevada da função de correlação para valores baixos de porosidade.

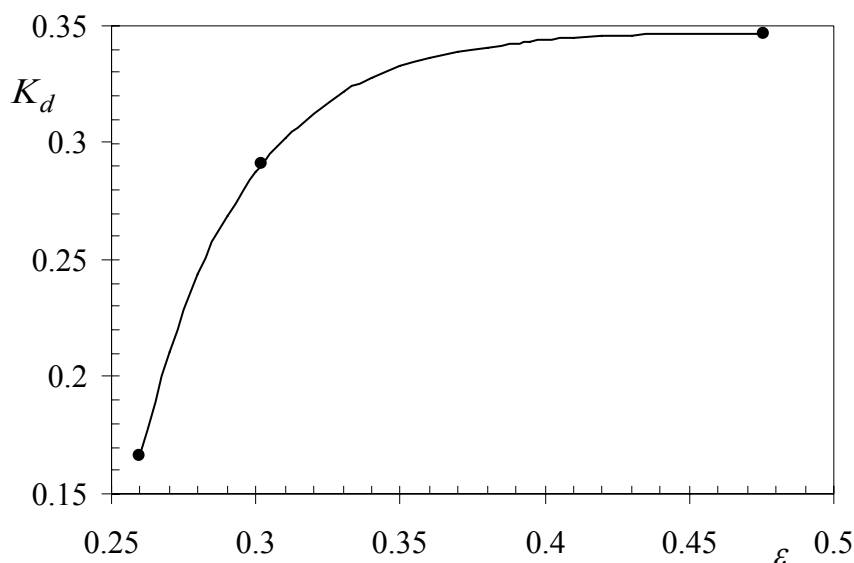


Figura 3.33 Valores e curva de correlação de K_d em função de ε - Modelo T4.

A impossibilidade de calcular K_d utilizando esta estratégia para o enchimento ortorrômbico pode ser atribuída ao comportamento dos valores de K_D em função da porosidade. Entre os enchimentos regulares cúbico e ortorrômbico K_D varia cerca de 43%, enquanto a porosidade das células fundamentais varia apenas 17%. Como o comprimento dos canais não varia em função da porosidade, a única forma de verificar a porosidade da célula é através de um valor elevado de K_d , resultando num valor de K_D incorrecto para o enchimento ortorrômbico. A mesma situação também se observa nos Modelos T1 e T2, em que K_l é função de θ e de ε , mas, como $K_l > 1$, não é necessário um valor tão elevado de K_d para que a porosidade da célula fundamental e do leito de enchimento ORT sejam iguais. Em particular, observa-se também que os máximos dos valores de K_l em função da porosidade para qualquer θ ocorrem na vizinhança do valor de ε correspondente a ORT, devido à forte variação de K_D entre os enchimentos ortorrômbico e cúbico.

Quando o volume das calotes esféricas não é contabilizado nos balanços de vazios, modelo T3, K_d pode ser menor de modo a verificar a porosidade da célula fundamental. De acordo com a Equação 3.60, a contabilização do volume das calotes reduz o volume total de vazios, que deverá ser compensado por um valor mais elevado de K_d . Deste modo, é possível determinar-se K_d do leito de enchimento regular ORT no modelo T3. Como $K_h = 0$, a Equação 3.60 pode simplificar-se, obtendo-se a seguinte expressão

$$\varepsilon K_{cel} = \left[\frac{\pi}{4} N_{can}^{eq} K_d^2 + \frac{\pi}{6} N_{cam}^{eq} K_D^3 \right] \quad (3.62)$$

Esta equação pode ser resolvida explicitamente em função de K_d

$$K_d = \sqrt{\frac{\varepsilon K_{cel} - \frac{\pi}{6} N_{cam}^{eq} K_D^3}{\frac{\pi}{4} N_{can}^{eq}}} \quad (3.63)$$

Para o modelo T3 observou-se que os valores obtidos não são representados convenientemente através de uma função exponencial. Em particular, observa-se um máximo marcado para valores de porosidade na vizinhança de 0.4, como se pode observar na Figura 3.34. Nos Modelos T1 e T2 observa-se uma situação idêntica nos valores de $K_d(\varepsilon)$ para os valores mais elevados de θ considerados, como se pode observar na Figura 3.29 e Figura 3.31. No entanto, o máximo é pouco significativo e o ajuste a uma função exponencial é adequado para a representação dos valores calculados.

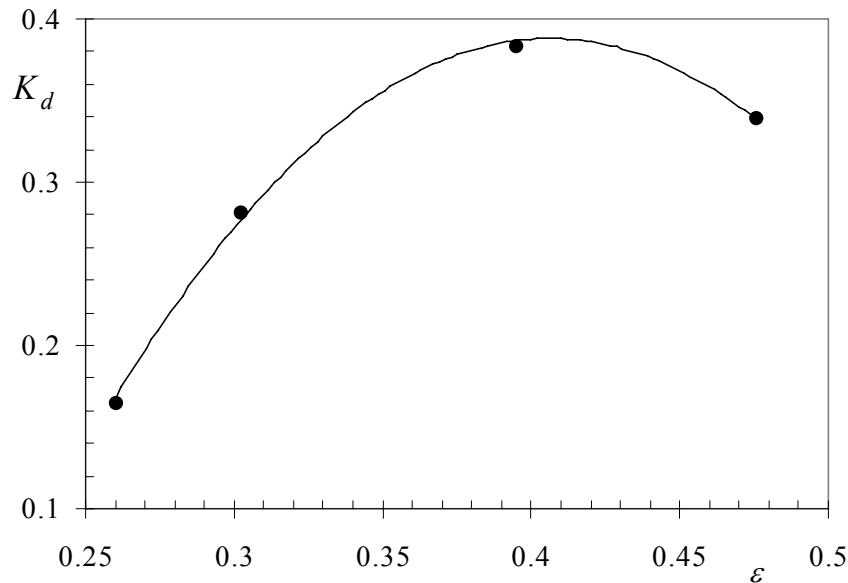


Figura 3.34 Valores e curva de correlação de K_d em função de ε - Modelo T3.

Deste modo, foi escolhido um polinómio quadrático como função de correlação, como se representa na Figura 3.34 em conjunto com os pontos calculados

$$K_d = 0.1679 + 3.0113(\varepsilon - 0.260) - 10.31(\varepsilon - 0.260)^2 \quad (3.64)$$

3.5.5 Determinação de θ

Na Secção 3.5.4 assumiu-se que o valor de θ era constante e conhecido antes da geração da rede, não existindo nenhuma relação com as características geométricas do meio poroso. Nestas condições, θ pode ser considerado como um parâmetro livre, permitindo maior liberdade ao modelo para ajustar dados experimentais relacionados com o escoamento e o transporte de massa através de um meio poroso (ver nos Capítulos 4 e 5).

No entanto, de acordo com a definição de tortuosidade, T , apresentada na Secção 2.3.2.2 e tomando em conta a estrutura da rede, é possível relacionar θ e T . Por definição, estes dois parâmetros encontram-se relacionados pela expressão

$$T = \frac{L_X}{L_T} = \cos \theta \quad (3.65)$$

em que L_T representa a distância total percorrida pelo fluido através da rede e L_X representa o comprimento da rede segundo o sentido principal de escoamento. Esta expressão é exacta para uma rede sem canais horizontais. Para uma rede com canais horizontais é de se esperar que a Equação 3.65 seja uma boa aproximação do valor correcto. Como estes canais são normais ao sentido principal de escoamento, o caudal através dos canais horizontais vai ser muito inferior ao caudal através dos canais oblíquos. A grande maioria das partículas do fluido que atravessam a rede vai-se deslocar pelos canais oblíquos, pela que o valor real da tortuosidade é bem aproximado pela Equação 3.65.

Como a rede implementada é regular, a Equação 3.65 é válida também a nível local, permitindo relacionar l_F e L_0 pela relação

$$T = \frac{l_F}{L_0} = \cos \theta \quad (3.66)$$

A tortuosidade T de um meio poroso é função das características geométricas do meio, em particular do tipo de partículas, da forma como o mesmo é gerado e da estrutura local do meio. Não é um parâmetro de fácil determinação, dependendo os valores obtidos das técnicas experimentais usadas na sua determinação (Liu e Masliyah, 1996). Alguns autores assumem que T é constante, como é o caso da equação de Carmam-Kozeny, baseando-se na análise simplificada do escoamento através de um leito de enchimento (Chabra *et al.*, 2001). Outros autores consideram que T é função das características do meio poroso, em particular da

porosidade, sendo algumas das expressões propostas na literatura apresentadas na Secção 2.3.2.2. Destas, foram seleccionadas no modelo geométrico as seguintes

$$T = \sqrt{\varepsilon} \quad (3.67)$$

$$\frac{1}{T} = 1 - P_{CR} \ln(\varepsilon) \quad (3.68)$$

A primeira expressão é recomendada por Liu e Masliyah (1996) para determinar T num leito de enchimento regular. Na Secção 2.3.2.2 são apresentadas duas expressões propostas por estes autores, mas como ambas prevêem valores idênticos, preferiu-se usar a primeira por ser mais simples. A segunda expressão foi proposta por Comiti e Renaud (1989), com base em dados experimentais obtidos em leitos de enchimento formados por partículas com características geométricas bastante distintas, representando a constante P_{CR} a influência desses factores. Para leitos de enchimento de esferas, $P_{CR} = 0.49$ (Mauret e Renaud, 1997), tendo-se usado este valor neste trabalho. Para facilitar a representação gráfica e a comparação dos valores previstos pelas duas equações a Equação 3.67 é referida por equação LM e a Equação 3.68 é referida por equação CR.

O valor de θ pode ser expresso em função de T através da expressão

$$\theta = \arccos(T) \quad (3.69)$$

e como T é expresso como sendo uma função apenas de ε , θ é função de ε . Conhecido o valor deste parâmetro, é possível determinar os valores de K_d e K_l usando os Modelos T1 e T2 conforme se pretende tomar em conta ou não o volume associado ao volume das calotes esféricas. De forma a diferenciá-los dos modelos completos, quando θ é expresso em função de ε é usada a designação T1S e T2S. Em cada um deles, como são consideradas duas expressões de θ em função de ε , duas variantes podem ser consideradas, sendo especificado qual é a equação (LM ou CR) que serve de base às correlações a determinar.

Na Figura 3.35 são apresentados os valores de θ em função de ε previstos pelas equações LM e CR, tendo usado $P_{CR} = 0.49$ apresentado atrás. Ambas as expressões prevêem o mesmo comportamento qualitativo na gama de valores de porosidade definida pelos seis leitos de enchimento regulares. A equação CR prevê valores sistematicamente menores que os valores previstos pela equação LM, reduzindo-se a diferença entre estas com o aumento da

porosidade. Por outro lado, observa-se que a equação LM é uma função mais forte de ε . Na gama de valores de porosidade definida pelos leitos de enchimento regulares, os valores de θ previstos por ambas as equações encontram-se entre $\pi/4$ e $\pi/3$.

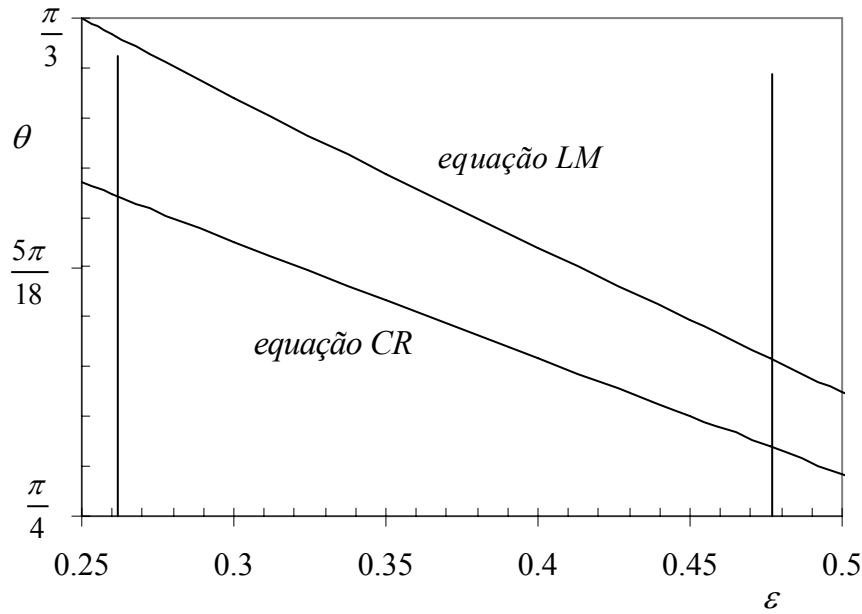


Figura 3.35 Representação dos valores previstos de θ em função de ε para as duas expressões de tortuosidade propostas.

Se o volume das calotes esféricas for desprezado, é possível determinar os valores de K_L e K_d independentemente um do outro (ver Seção 3.5.4.1). No caso mais geral, deve-se substituir θ em função de ε na Equação 3.43, obtendo-se dessa forma uma função apenas da porosidade da rede. Substituindo as expressões previstas pelas equações LM e CR, após simplificação são obtidas as seguintes expressões para $K_l(\varepsilon)$

$$K_l^{LM}(\varepsilon) = \frac{K_F(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon}} - K_D(\varepsilon), \quad \text{usando a Equação LM} \quad (3.70)$$

$$K_l^{CR}(\varepsilon) = K_F(\varepsilon)[1 - P_{CR} \ln(\varepsilon)] - K_D(\varepsilon), \quad \text{usando a Equação CR} \quad (3.71)$$

em que $K_F(\varepsilon)$ é definido pela Equação 3.43 e $K_D(\varepsilon)$ é definido pelas Equações 3.31 e 3.32. Expressões análogas podem ser obtidas usando a Equação 2.14. Na Figura 3.36 são apresentados os valores calculados, com base nos valores de K_D e de K_l obtidos pelo modelo T1 para cada um dos leitos de enchimento regulares, e as curvas de $K_l(\varepsilon)$ determinadas com base nas Equações 3.43, 3.31 e 3.32, para cada uma das expressões de θ

em função de ε . Em qualquer dos casos, as funções de correlação são uma descrição adequada dos valores conhecidos para cada um dos leitos de enchimento regulares. O comportamento das curvas de K_l em função de ε é similar ao observado na Figura 3.36, possuindo as duas curvas o mesmo comportamento qualitativo. Numa gama alargada de valores de porosidade, $\varepsilon < 0.4$, a curva de $K_l(\varepsilon)$ prevista pela equação CR prevê valores de K_l quase constantes e na vizinhança de 1, de acordo com a hipótese considerada por Payatakes *et al.* (1973a) para o comprimento médio dos canais.

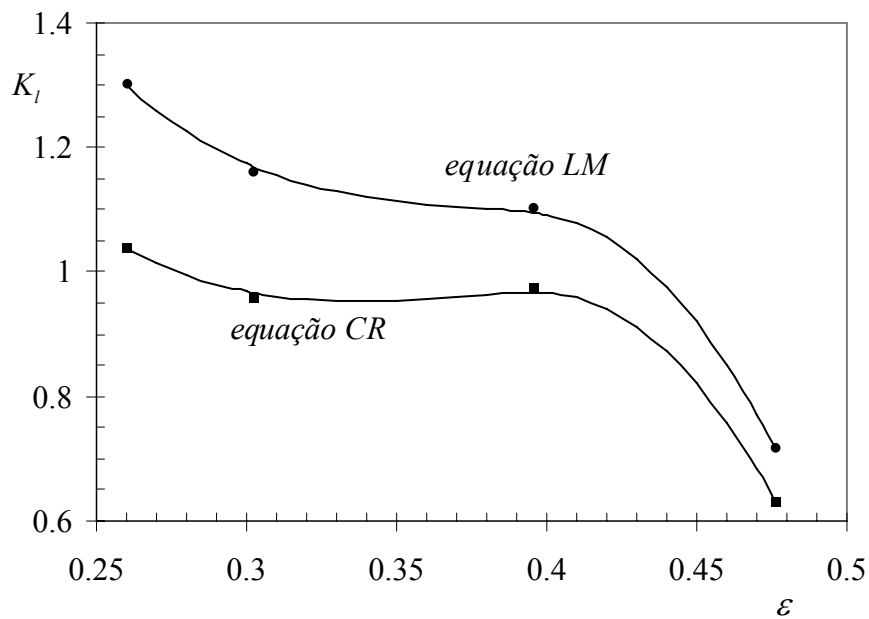


Figura 3.36 Valores calculados e curvas de correlação de K_l em função de ε para o modelo TIS.

Os valores de K_d são determinados usando a estratégia considerada no modelo T1. Os valores para cada um dos enchimentos regulares são calculados a partir da Equação 3.45, utilizando a Equação 3.42 na determinação de K_l . Por exemplo, para a equação LM, K_l é definido pela Equação 3.70, permitindo deste modo que K_d seja apenas função da porosidade.

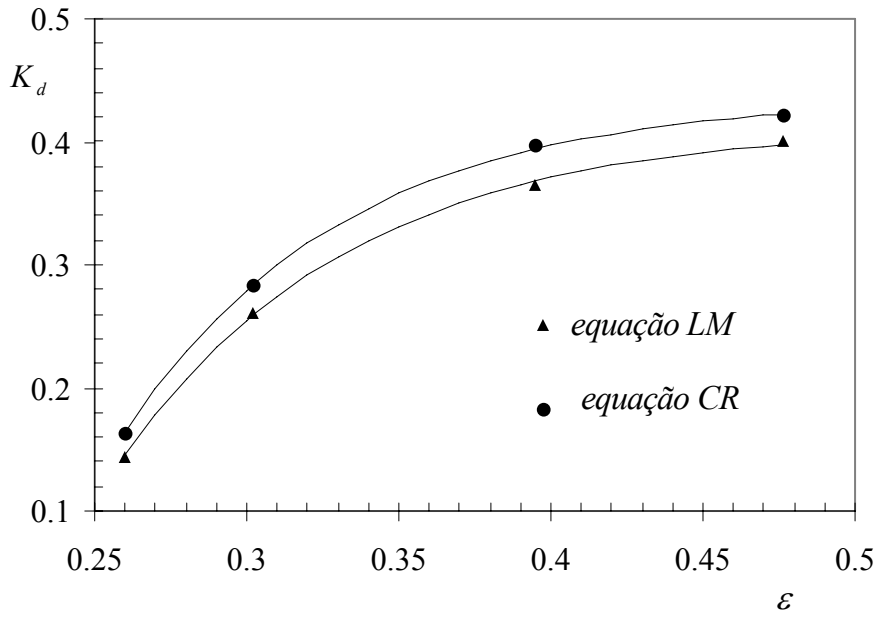


Figura 3.37 Curvas de correlação de K_d em função de ε para o modelo T1S.

Observou-se que os valores de K_d obtidos podiam ser descritos por uma função da forma da Equação 3.46, sendo estas definidas pelas expressões

$$K_d = 0.4135 - 0.2683 \exp\left[-\frac{(\varepsilon - 0.260)}{0.0761}\right], \text{ usando a Equação LM} \quad (3.72)$$

$$K_d = 0.4360 - 0.2730 \exp\left[-\frac{(\varepsilon - 0.260)}{0.0719}\right], \text{ usando a Equação CR} \quad (3.73)$$

Para o modelo T2S, o sistema de equações definido pelas Equações 3.50 e 3.51 deve ser resolvido para obter os valores de K_d e K_l de cada um dos enchimentos regulares. Na Figura 3.38 e Figura 3.39 os valores obtidos para cada uma das expressões da tortuosidade em função de ε são apresentados.

Ao contrário do modelo T2, os valores previstos pelas duas expressões são similares, sendo as funções exponenciais de correlação definidas pelas expressões

$$K_d = 0.4067 - 0.2623 \exp\left[-\frac{(\varepsilon - 0.260)}{0.0748}\right], \text{ usando a Equação LM} \quad (3.74)$$

$$K_d = 0.4142 - 0.2522 \exp\left[-\frac{(\varepsilon - 0.260)}{0.0703}\right], \text{ usando a Equação CR} \quad (3.75)$$

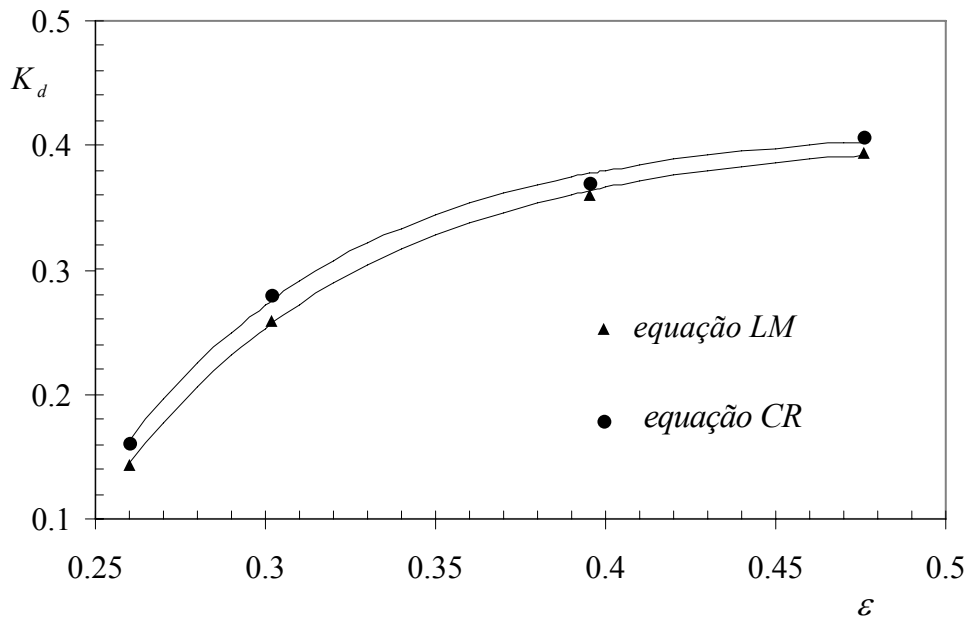


Figura 3.38 Valores calculados e curvas de correlação de K_d em função de ε para o modelo T2S.

Os valores de K_l determinados no modelo T2S são apresentados na Figura 3.39, assim como as funções de correlação usadas para as representar.

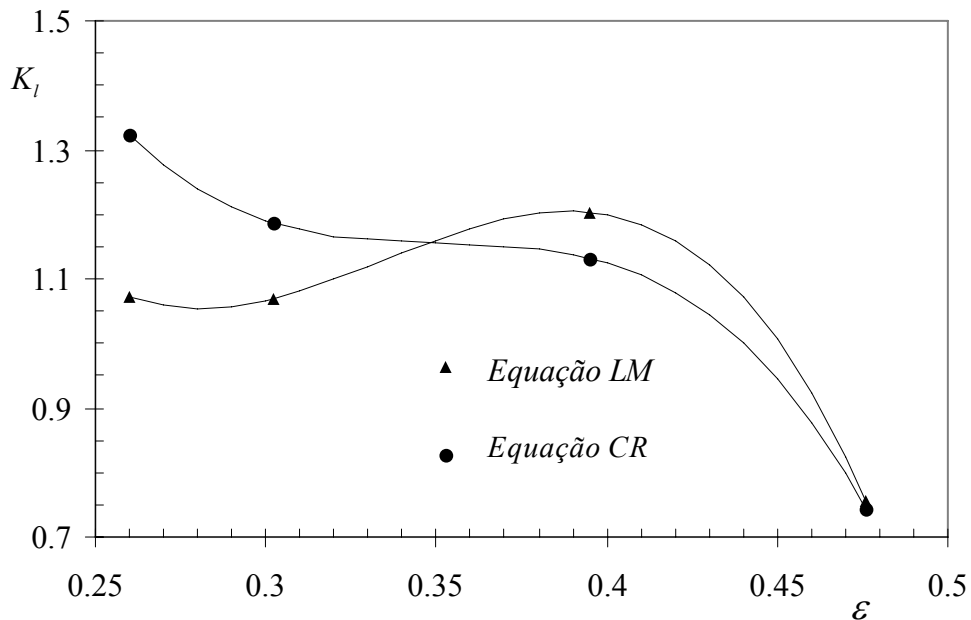


Figura 3.39 Curvas de correlação K_l em função de ε para o modelo T2S. Como nas secções anteriores, polinómios de terceira ordem foram usados para correlacionar os valores calculados, sendo as expressões obtidas apresentadas de seguida

$$K_l^{LM} = 1.324 - 5.209(\varepsilon - 0.26) + 55.39(\varepsilon - 0.26)^2 - 202.2(\varepsilon - 0.26)^3 \quad (3.76)$$

$$K_l^{CR} = 1.072 - 1.892(\varepsilon - 0.26) + 53.18(\varepsilon - 0.26)^2 - 237.1(\varepsilon - 0.26)^3 \quad (3.77)$$

3.5.6 Funções de Distribuição das Dimensões dos Elementos da Rede

Nas secções anteriores foi descrita a estratégia de determinação dos valores médios das dimensões características dos elementos que constituem a rede, tendo sido determinadas correlações que permitem a determinação dos valores de D , d e l em função da porosidade do leito de enchimento. Como os leitos de enchimento que serviram de base à determinação destas funções são formados por esferas com um diâmetro constante, é de esperar que os valores calculados sejam mais adequados para leitos de enchimento formados por partículas com os mesmos valores para as dimensões características. No entanto, é vulgar existir uma distribuição de tamanhos das partículas, sendo esta função de fácil determinação experimental, por exemplo, através do uso de peneiros calibrados.

Quando existe e é conhecida a distribuição de dimensões características das partículas do leito de enchimento, $f_{D_p}(D_{P_j})$, assume-se que é possível determinar as distribuições de diâmetros das câmaras e canais a partir das relações

$$f_D(D_i) = K_D(\varepsilon) f_{D_p}(D_{P_j}) \quad (3.78)$$

$$f_d(d_j) = K_d(\varepsilon) f_{D_p}(D_{P_j}) \quad (3.79)$$

3.6 Análise do Modelo Geométrico

Nesta secção são analisados e discutidos os resultados obtidos pelas diversas variantes do modelo geométrico, com o objectivo de determinar qual destes deverá ser o mais adequado para determinar os parâmetros das distribuições das dimensões características dos elementos da rede equivalente. Na comparação dos modelos serão usadas como critérios qualitativos as relações esperadas entre o comportamento hidrodinâmico da rede e as dimensões dos elementos da rede, em particular o diâmetro médio dos canais da rede, as restrições existentes entre as dimensões características dos elementos da rede e o comportamento destes em função da porosidade do leito. De salientar que, com excepção de θ para os modelos T1, T2, T3 e T4, os valores de todos os parâmetros importantes para caracterizar a rede equivalente são determinados da análise geométrica das células fundamentais dos leitos de enchimento ideais, não se tendo definido nenhum parâmetro empírico a ajustar a partir de dados experimentais.

3.6.1 Limitações dos Modelos

Tomando em consideração as hipóteses consideradas no desenvolvimento do modelo, não é de esperar que o mesmo seja válido para todos os tipos de leitos de enchimento. Algumas das limitações mais importantes são apresentadas de seguida.

Como as correlações foram determinadas a partir da análise da estrutura local de leitos de enchimento regulares formados por esferas iguais, é natural que estas sejam adequadas para determinar os parâmetros de redes associadas a leitos de enchimento formados por partículas aproximadamente esféricas. Esta restrição implica que o modelo geométrico é aplicável apenas para meios porosos homogêneos e isotrópicos. Para leitos de partículas possuindo formas muito distintas da esférica, como é o caso dos leitos de enchimento apresentados na Figura 3.1, os leitos podem ser anisotrópicos, ou seja, podem ter comportamentos distintos conforme a direcção considerada na análise do escoamento, ou de outros fenómenos de transporte. Como o modelo não inclui nem permite a determinação de valores de parâmetros relacionados com a estrutura do meio, o modelo proposto não é aplicável para leitos de enchimentos deste tipo.

A distribuição de tamanhos das partículas deverá ser unimodal e apresentar um valor do desvio padrão pequeno. No caso da distribuição de tamanhos das partículas ser muita larga, situação que ocorre se os valores de desvio padrão forem elevados, podem ser obtidos leitos com porosidade muito inferior a 0.260 (Yu *et al.*, 1996), ou distribuições das dimensões dos canais largas ou mesmo multimodais (Nolan e Kavanagh, 1994; Assouline e Rouault, 1996). Este facto deve-se à possibilidade das partículas mais pequenas se introduzirem nos espaços vazios formados entre as partículas maiores, como se pode observar na Figura 3.40.

Outra limitação do modelo geométrico é a impossibilidade de determinar a distribuição dos números de coordenação das câmaras da rede, C_i , a partir da análise da estrutura geométrica dos leitos regulares. Poderia ter-se considerado que o número de coordenação era igual ao número de canais associado a uma célula fundamental. No entanto, ao “mapear” a estrutura de cada um dos leitos de enchimento regulares numa rede equivalente é possível observar diferenças apreciáveis entre as redes obtidas. Deste modo, e como o número de canais associado a cada uma das células fundamentais varia apreciavelmente (ver Tabela 3.11), considerou-se que C_i é um parâmetro a definir externamente ao gerador da rede. Observa-se uma situação idêntica para θ , embora a gama de valores esperada para este parâmetro possa

ser obtida a partir da analogia com a tortuosidade usando correlações de T em função de ε , como se efectuou na Secção 3.5.5.

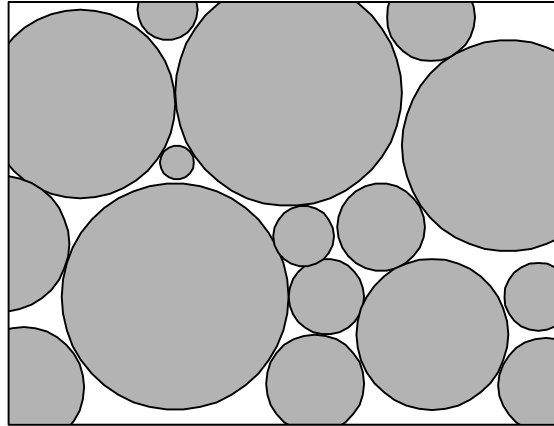


Figura 3.40 Corte de um leito de enchimento de esferas com uma distribuição larga de diâmetros.

As conclusões anteriores podem colocar restrições na aplicação do modelo geométrico na descrição dos fenómenos de transporte num meio poroso, sendo algumas situações descritas de seguida.

- Os mecanismos que controlam os fenómenos de transporte são fortemente dependentes dos valores das dimensões características dos elementos da rede. Por exemplo, a resistência ao escoamento de um fluido em regime laminar é controlada pelos canais com menor diâmetro, visto esta ser inversamente proporcional à quarta potência de d_j . Se a função $f_d(d_j)$ for muito larga, diferentes regimes de escoamento podem ser observados nos canais e é possível a existência de caminhos preferenciais para o escoamento, devido à formação de zonas mais permeáveis no meio associadas às zonas onde se encontram os canais com diâmetro mais elevado, por onde o fluido se escoar preferencialmente (Moreno e Tsang, 1994). No transporte de massa, a ocorrência de diferentes zonas origina o aparecimento de caudas nas curvas de *breakthrough*, devido à menor velocidade do fluido nas zonas menos permeáveis do meio poroso.
- A estrutura irregular dos espaços vazios do enchimento não permite muitas vezes determinar qual é a forma geométrica mais simples que os representa adequadamente, em particular para os canais. Dependendo da estrutura local e da posição no leito, diferentes unidades ou formas dos elementos podem ter de ser definidas, tornando a definição e a determinação dos parâmetros geométricos muito mais complexa (Chan e Ng, 1989).

Além das restrições apresentadas, as relações de proporcionalidade definidas pelas Equações 3.78 e 3.79 implicam que os valores dos parâmetros estatísticos das funções $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ sejam iguais, diferindo apenas no seu valor médio. Apesar de, à vista desarmada, a estrutura de um leito de enchimento real parecer possuir uma estrutura irregular e aleatória, ao nível local os valores de D_i e d_j estão correlacionados entre si, de acordo com as restrições impostas aos diâmetros das câmaras e dos canais ao nível local. Apesar destas relações não implicarem necessariamente que as distribuições possuem os mesmos valores para os seus parâmetros estatísticos, como o modelo geométrico não permite obter nenhuma informação acerca dos parâmetros estatísticos das funções de distribuição de tamanhos, esta hipótese assume-se como sendo adequada.

Apesar das limitações gerais do modelo que foram apresentadas, apenas através da comparação entre dados experimentais e resultados previstos é possível concluir com rigor se ele é válido ou não. Do ponto de vista formal, o facto de não terem sido utilizados parâmetros empíricos no seu desenvolvimento facilita a correcção do modelo através da introdução de constantes, ajustáveis a dados experimentais. Estes parâmetros podem ser determinados a partir da comparação dos resultados previstos com a utilização do modelo na descrição da estrutura e do comportamento fenomenológico de um leito de enchimento real, quando comparados com dados experimentais publicados. Duas formas distintas de comparação foram consideradas neste trabalho.

- Os valores médios dos elementos da rede previstos pelo modelo geométrico são comparados com os valores médios apresentados na literatura. Como os resultados apresentados na literatura são quase sempre dependentes das estruturas assumidas para o meio poroso, a comparação é efectuada tomando as dimensões características dos elementos análogos entre os dois tipos de estrutura (ver Secção 3.6.7).
- Utilizando os resultados dos modelos geométricos na descrição do escoamento e da transferência de massa através do mesmo, descritos nos Capítulos 4 e 5 respectivamente. De acordo com a hipótese de que o comportamento macroscópico de um meio poroso é função do comportamento local, esta forma de comparação permite averiguar se o modelo proposto é capaz de determinar com rigor os valores dos parâmetros macroscópicos de um meio poroso, como é o caso da permeabilidade e do coeficiente de dispersão axial.

Nas secções seguintes, apenas são analisados os aspectos associados com o modelo proposto, as hipóteses impostas no gerador da rede, e a validade ou não dos valores obtidos, em particular.

- Verificação dos critérios impostos ao gerador da rede. Atenção particular deve ser prestada à verificação das condições limites entre d e D , que poderá não ser verificada em algumas situações e para algumas gamas de valores de porosidade.
- Comparação dos valores dos parâmetros médios obtidos pelo modelo com dados experimentais ou de outros modelos validados por comparação com dados experimentais. De acordo com as condições de aplicabilidade do modelo, apenas é correcto fazer comparações com dados obtidos em leitos de enchimento constituídos por esferas ou com forma aproximadamente esférica.

3.6.2 Influência da Inclusão do Enchimento Ortorrômico

Uma das características do modelo desenvolvido e das suas variantes é a ocorrência de uma larga zona de porosidade em que D é constante e igual a $(\sqrt{2} - 1)D_p$. No Apêndice A.2.2 este facto é provado para os enchimentos ortorrômico, tetragonal e romboédrico-piramidal, com base na estrutura geométrica destes leitos de enchimento regulares.

Observa-se que comportamento da função $K_D(\varepsilon)$ na gama de porosidade em que o modelo está definido influencia o comportamento dos valores de K_d e de K_l , em particular $\varepsilon \approx 0.4$, correspondente ao leito ortorrômico. A situação limite ocorre para o modelo T4, em que é impossível determinar um valor de K_d válido. De modo a determinar a importância da inclusão do enchimento ortorrômico nas correlações obtidas pelo modelo geométrico, as constantes destas foram re-determinadas sem tomar em conta o valor obtido para o enchimento ortorrômico. As formas funcionais consideradas são análogas às usadas nas secções anteriores.

Na Figura 3.41 são comparadas as funções de interpolação baseadas em polinómios de segundo grau para o modelo T3, sendo possível observar que a inclusão ou não do enchimento ortorrômico não modifica sensivelmente a forma das funções obtidas.

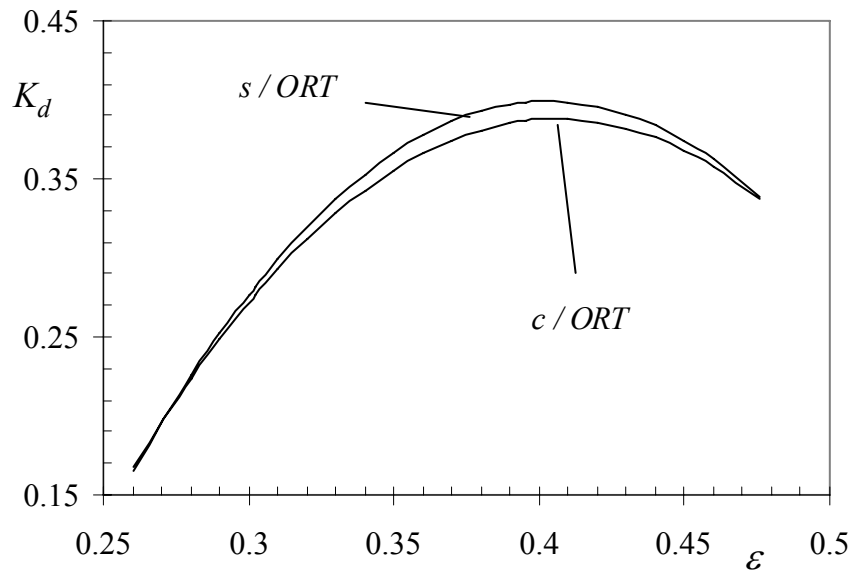


Figura 3.41 Comparação das curvas de correlação de K_d em função de ε para o modelo T3 com ou sem o valor do enchimento ortorrômico.

Na Figura 3.42 e na Figura 3.43 são apresentadas e comparadas as funções de correlação de $K_d(\varepsilon)$ para os valores limites de θ considerados nas secções anteriores com a inclusão ou não do valor correspondente ao enchimento ortorrômico, para os modelos T1 e T2 respectivamente.

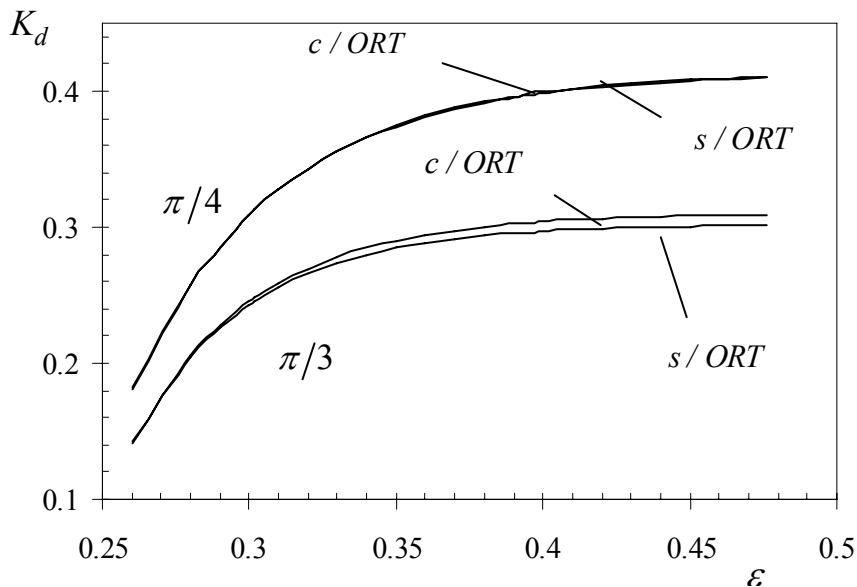


Figura 3.42 Comparação das curvas de interpolação de K_d em função de ε para o modelo T1, para os valores limite de θ , com a inclusão ou não do enchimento ortorrômico.

Em qualquer dos modelos observa-se que as curvas obtidas são muito próximas, ocorrendo as maiores diferenças para valores de porosidade próximos do extremo superior da gama de definição do modelo e quanto maior for θ .

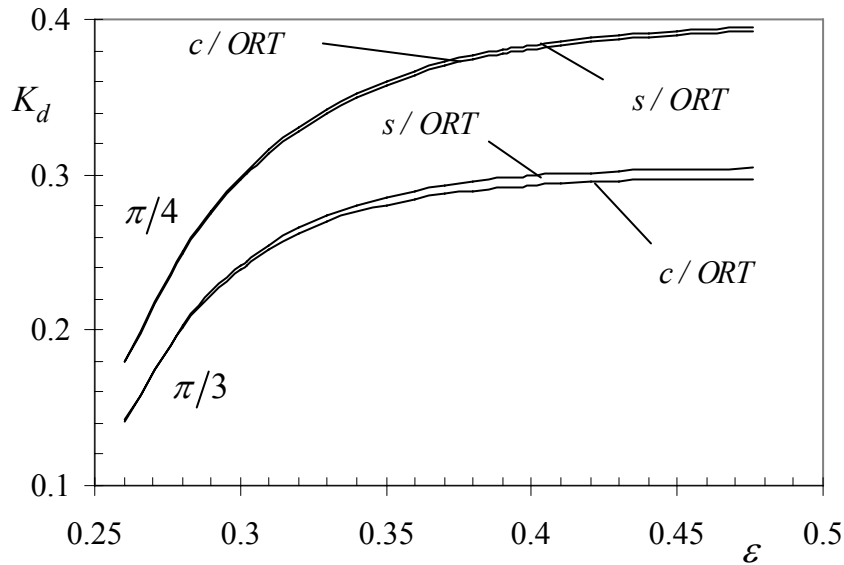


Figura 3.43 Comparação das curvas de interpolação de K_d em função de ε para o modelo T2, para os valores limite de θ com ou sem o valor do enchimento ortorrômbo.

Na Figura 3.44 são comparadas as funções de correlação de $K_l(\varepsilon)$ para o modelo T2 com a inclusão ou não do valor correspondente ao enchimento ortorrômbo, para os valores limites de θ considerados nas secções anteriores. Observa-se que a não inclusão do valor do enchimento ortorrômbo resulta no deslocamento do valor máximo de K_l para valores menores de ε , sendo este máximo muito menos pronunciado. A ocorrência de um valor máximo tão pronunciado para a função de K_l em função de ε na vizinhança de 0.4 está relacionado com o aumento do número de canais equivalentes, N_{can}^{eq} , entre os enchimentos ortorrômbo e tetragonal, passando o valor deste parâmetro de 1 para 1.5. Como K_D não varia entre os dois enchimentos e a variação de K_d para os dois enchimentos regulares não é significativa, para compensar o aumento da porosidade da célula fundamental ao passar de tetragonal para ortorrômbo, K_l tem de variar significativamente. Para os valores de porosidade correspondentes aos restantes leitos de enchimento regulares, a razão entre D e d é tal que o volume das calotes é pouco significativo, sendo a porosidade das células compensada sobretudo pela variação de d .

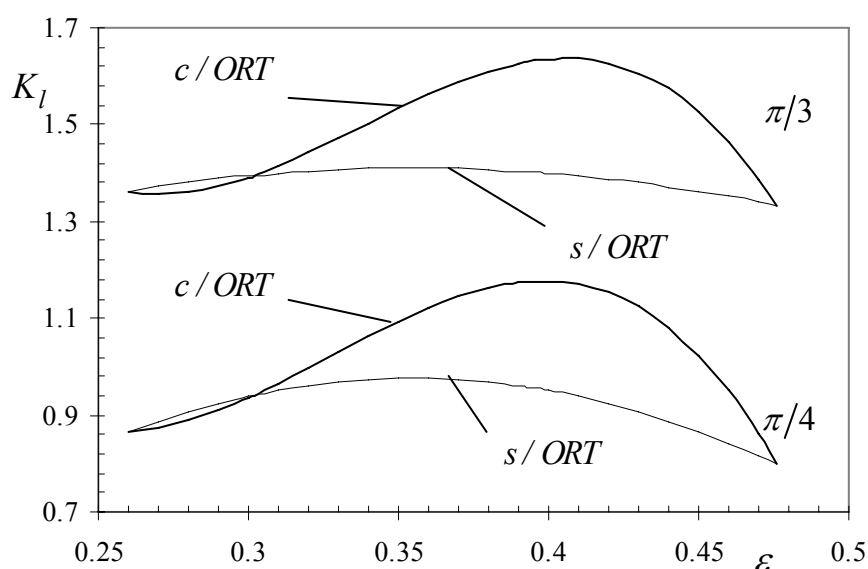


Figura 3.44 Comparação das curvas de correlação de K_l em função de ε para o modelo T2 para os valores limites de θ , com e sem o valor do enchimento ortorrômbico.

A ocorrência de um valor máximo em l implica o aumento da resistência dos canais da rede ao escoamento, sendo no entanto um efeito pouco significativo quando comparado com a influência de d . Deste modo, foi preferido como critério de escolha do modelo a manutenção da monotonia da função de correlação de $K_d(\varepsilon)$.

Apesar dos modelos T1 e T2 serem similares, a não consideração do volume de vazios associado às calotes esféricas pode resultar em diferenças do comportamento dos dois modelos, sobretudo para valores de porosidade em torno de 0.4, correspondentes ao leito ortorrômbico. Na Figura 3.45 são comparadas as correlações de K_l em função de ε para o modelo T1, baseadas nos valores determinados para cada um dos leitos de enchimento regulares, para os valores limites de θ considerados nas secções anteriores. Observa-se que a não inclusão do valor correspondente ao leito ortorrômbico resulta num comportamento quase linear da função $K_l(\varepsilon)$, como se pode observar na Figura 3.45. Como a razão d/D é praticamente constante para estes modelos, ao baixar a porosidade, a redução do diâmetro dos canais permite compensar a redução do volume dos vazios associado às células fundamentais dos leitos de enchimento regulares.

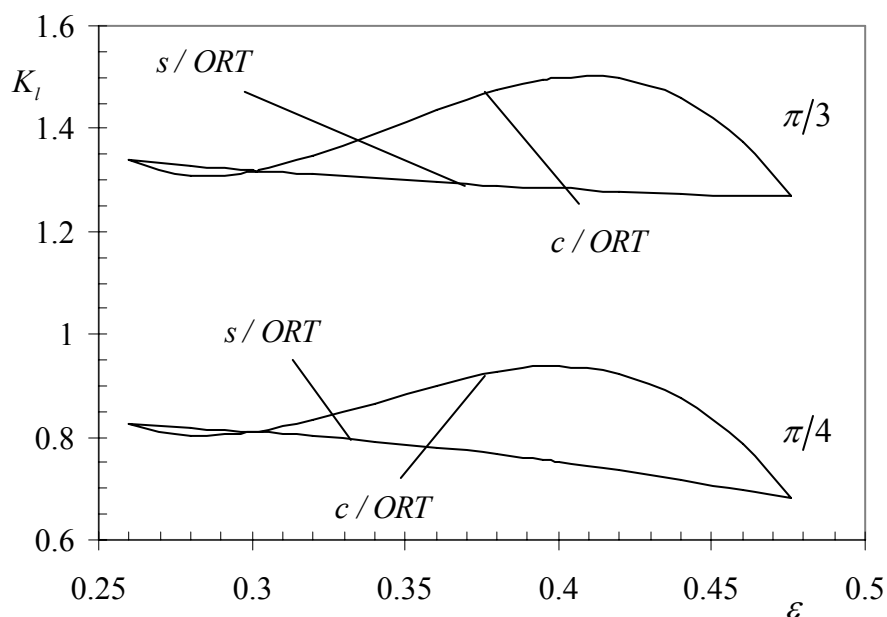


Figura 3.45 Comparação das curvas de correlação de K_l em função de ε para o modelo T1 para os valores limites de θ , com e sem o valor do enchimento ortorrômbico.

Comparando os resultados apresentados nas Figura 3.44 e Figura 3.45, observam-se maiores variações na Figura 3.44, correspondente às previsões efectuadas pelo modelo T2, em particular para valores de porosidade próximos de 0.4. Esta gama de valores de porosidade corresponde à zona onde o volume associado às calotes esféricas é mais importante, e em que as variações em K_l devem ser maiores, de modo a compensar o maior volume das calotes esféricas.

Comparando as Figura 3.29 e Figura 3.37, correspondentes aos modelos T1 e T1S respectivamente, e as Figura 3.31 e Figura 3.38, correspondentes aos modelos T2 e T2S respectivamente, observa-se que, com excepção do modelo T1S quando a Equação 3.68 é usada para determinar T em função de θ , as curvas de $K_d(\varepsilon)$ possuem o mesmo comportamento. Deste modo, as mesmas conclusões obtidas nos modelos T1 e T2 quando o valor correspondente ao leito ortorrômbico não é tomado em conta nas correlações são válidas para os modelos T1S e T2S. Mesmo para o caso particular referido, o comportamento linear dos valores obtidos de K_d permite concluir que a não inclusão do valor do enchimento ortorrômbico não altera significativamente as correlações obtidas.

Para os valores de K_l , observam-se diferenças significativas entre os resultados previstos pelos modelos T1 e T2 e pelos modelos T1S e T2S. Na Figura 3.46 são comparadas as curvas

de K_l para o modelo T1S, com ou sem a inclusão dos valores correspondentes ao enchimento ortorrômbico, para ambas as funções de $T(\theta)$. O comportamento qualitativo é praticamente independente da expressão de $T(\theta)$ considerada. Observa-se que a remoção do enchimento ortorrômbico resulta em expressões quase lineares para $K_l(\varepsilon)$, o que já se tinha observado nas Figura 3.44 e Figura 3.45, sendo as curvas qualitativamente similares às curvas de θ em função de ε .

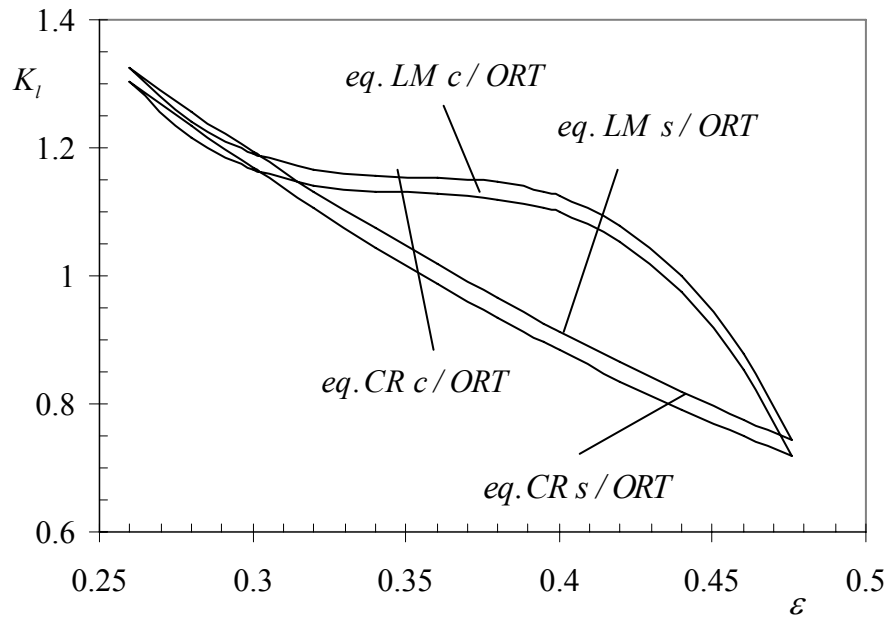


Figura 3.46 Comparação das curvas de K_l em função de ε para o modelo T1S, usando as equações LM e CR.

Para os modelos T1 e T2 observa-se um comportamento distinto, com uma gama de variação de valores de l_0 mais reduzida. A influência de θ faz-se sentir ao nível do comprimento da rede (segundo o sentido de escoamento principal do fluido) e não directamente na tortuosidade da rede, que se mantém praticamente constante.

Na Figura 3.47 são apresentados os valores de K_l em função da porosidade, usando o modelo T2S. Os resultados obtidos são similares aos obtidos pelo modelo T1S, observando-se máximos mais marcados para o modelo T2S. Os resultados obtidos permitem concluir que a não inclusão dos valores correspondentes ao leito ortorrômbico apenas são importantes para a função $K_l(\varepsilon)$, visto que na modelização do comportamento hidrodinâmico da rede as variações nos valores de K_d são mais importantes do que as variações nos valores de K_l , e como a não inclusão do valor correspondente ao enchimento ortorrômbico não altera K_d ,

seria válido usar as correlações sem os valores associados ao enchimento ortorrômbico. No entanto, o comportamento de redes com valores de porosidade na gama entre 0.4 e 0.476 seria idêntico, pois as correlações de $K_l(\varepsilon)$ nessa gama prevêm também valores idênticos. Como a resistência ao escoamento é inversamente proporcional à porosidade, a única forma de aumentar a resistência dos elementos da rede é aumentar o valor do comprimento dos canais, o que se observa apenas para as correlações de $K_l(\varepsilon)$ com a inclusão do valor correspondente ao leito com enchimento ortorrômbico. Conclui-se então que o uso de todos os valores calculados na determinação das funções de correlação é a estratégia mais adequada.

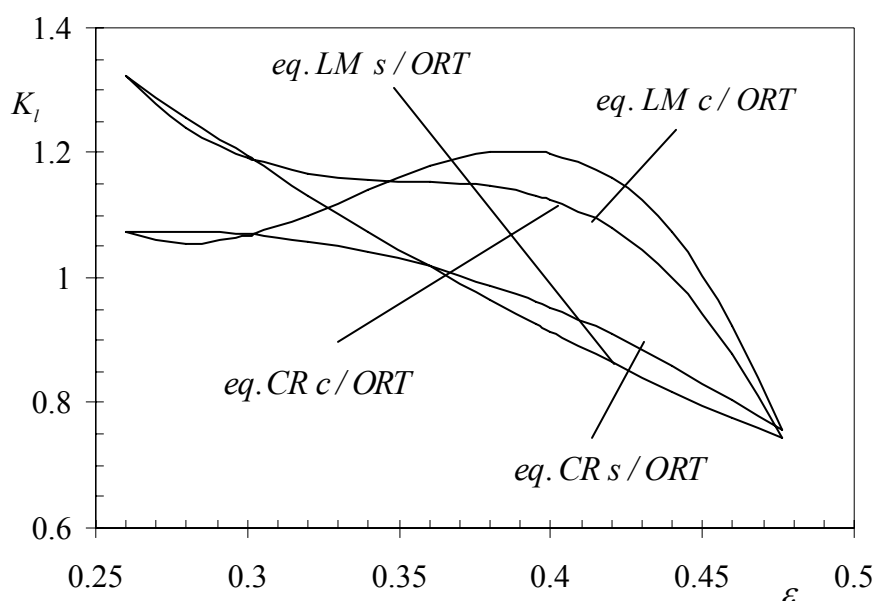


Figura 3.47 Comparação das curvas de K_l em função de ε para o modelo T2S, usando as equações LM e CR.

3.6.3 Influência da Inclusão das Calotes

A diferença entre os modelos T2 e T1 encontra-se na consideração ou não do volume das calotes nos balanços volúmicos necessários para a determinação de $K_d(\varepsilon)$ e $K_l(\varepsilon)$ respectivamente. Na Figura 3.48 encontram-se representadas as funções $K_d(\varepsilon)$ para os modelos T1 e T2, para os valores limites da gama de valores válidos de θ , não se observando diferenças significativas entre eles. Nota-se que, quanto maior for θ maiores são as diferenças entre os dois modelos, apesar de nunca serem superiores a 10%. Observa-se também que K_d previsto pelo modelo T2 é sempre superior às previsões feitas pelo modelo T1. Visto que o volume das calotes é tomado em conta no modelo T2, de modo a compensar o

volume de vazios associado às calotes, em iguais condições K_d deverá ser maior para esse modelo.

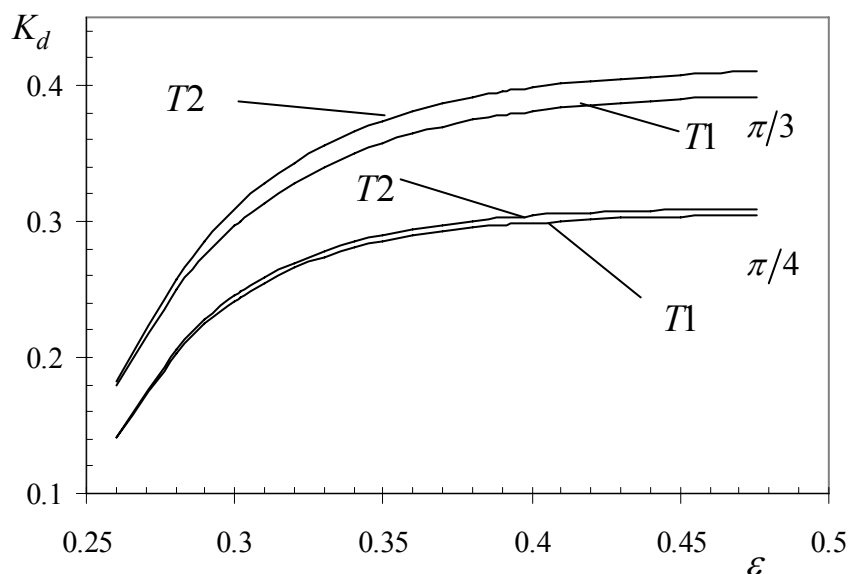


Figura 3.48 Comparação das curvas de correlação de K_d em função de ε dos modelos T1 e T2 para os valores limites de θ .

Na Figura 3.49 são comparadas as funções $K_l(\varepsilon)$ obtidas para os modelos T1 e T2. Ao contrário do que foi observado para K_d , a inclusão das calotes é significativa sobretudo na gama de valores de porosidade intermédios correspondentes aos enchimentos regulares ORT e TET. Como a razão entre os diâmetros médios das câmaras e dos canais é maior nessa zona, de acordo com a Figura 3.13 é também nessa gama de valores que o volume das calotes é mais significativo quando comparado com o volume dos restantes elementos da rede. Da mesma forma que K_d , K_l aumenta para compensar o volume das calotes associadas às células fundamentais dos leitos de enchimento regulares.

As conclusões das duas últimas duas secções não permitem concluir com rigor qual dos modelos, T1 ou T2, é o mais adequado. Como ambos os modelos prevêem valores médios quase iguais dos diâmetros dos canais, e é esperado que o comportamento hidrodinâmico da rede seja dominado pelos valores de d , não é possível afirmar com rigor qual é o modelo mais adequado. Como já se afirmou anteriormente, apenas a utilização do mesmo na previsão do comportamento de um leito de enchimento e a comparação dos resultados obtidos com dados experimentais é que permite tirar conclusões acerca do modelo mais adequado (Capítulos 4 e 5).

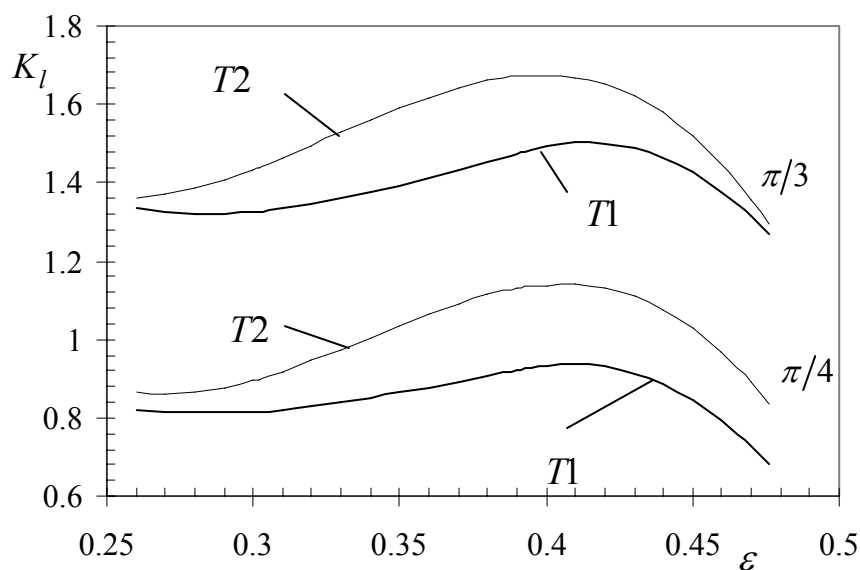


Figura 3.49 Comparação das curvas de correlação de K_l em função de ε dos modelos T1 e T2 para os valores limites de θ .

Na Figura 3.50 e na Figura 3.51 são comparados os valores previstos de K_d pelos modelos T1S e T2S. Na Figura 3.50 são comparados os resultados previstos pelos dois modelos usando a equação LM, observando-se que os dois modelos prevêem valores praticamente idênticos.

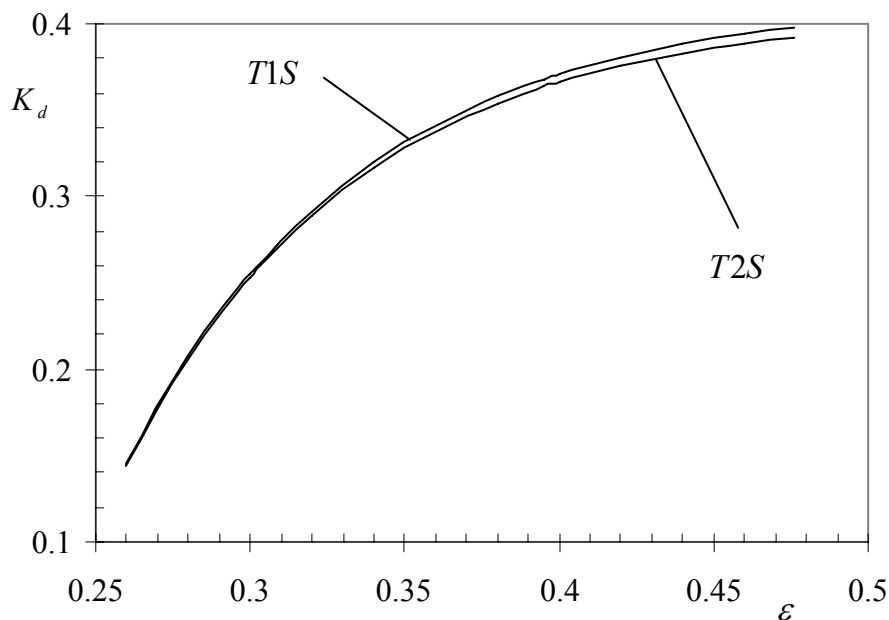


Figura 3.50 Comparação das curvas de correlação de K_d em função de ε obtidos pelos modelos T1S e T2S, usando a equação LM.

O modelo T1S prevê valores ligeiramente superiores para valores de ε elevados, zona em que o volume associado às calotes é mais significativo, mas, a diferença nunca é significativa.

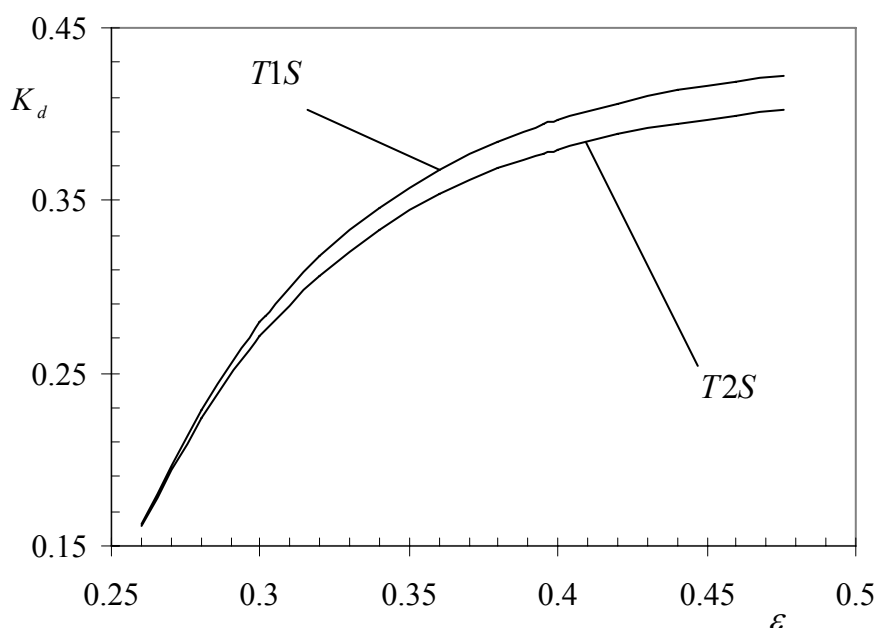


Figura 3.51 Comparação das curvas de correlação de K_d em função de ε obtidos pelos modelos T1S e T2S, usando a equação CR.

Os valores previstos de K_l pelos modelos T1S e T2S usando as equações LM e CR são comparados entre si na Figura 3.52 e na Figura 3.53 respectivamente. Para a equação LM, as curvas de $K_l(\varepsilon)$ são similares entre si, obtendo-se valores superiores para o modelo T2S, o que pode ser atribuído à consideração do volume associado às calotes. Para os valores previstos usando a equação CR observa-se um comportamento distinto dos dois modelos simplificados.

Em particular, para o modelo T2S, observa-se a ocorrência de um valor máximo para valores de porosidade na vizinhança de 0.4. A equação CR prevê uma variação mais suave de θ em função de ε que a equação LM, como se pode observar na Figura 3.35. Deste modo, a compensação do volume das calotes é efectuada através da redução de K_d e não através da variação de K_l . Os resultados apresentados na Figura 3.36 e na Figura 3.37 mostram isso mesmo, sendo K_d maior e K_l menor quando é usada a equação CR. Deste modo, a compensação do volume das calotes acarreta alterações na forma da curva correspondente ao modelo T2S, o que não ocorre para o modelo T1S.

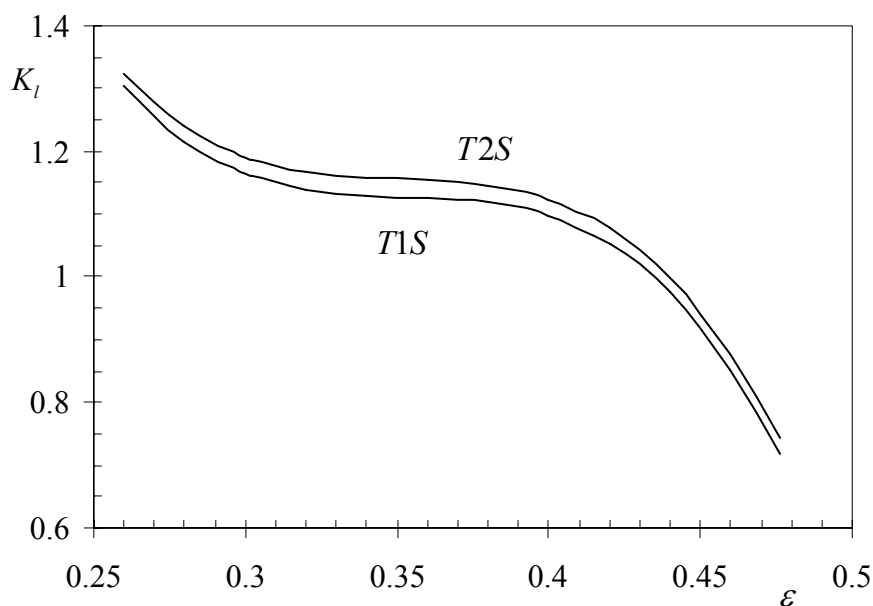


Figura 3.52 Comparação das curvas de correlação de K_l em função de ε obtidos pelos modelos T1S e T2S, usando a equação LM.

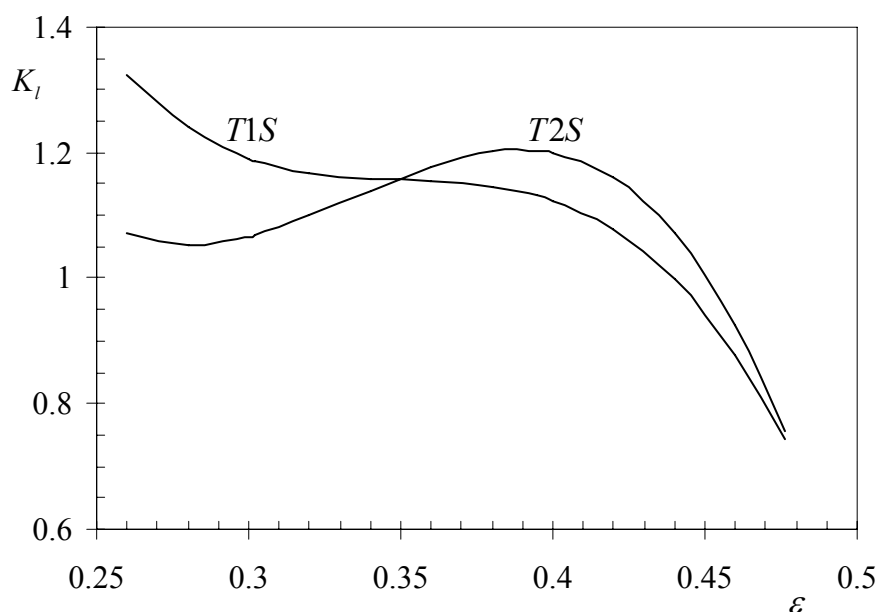


Figura 3.53 Comparação das curvas de correlação de K_l em função de ε obtidos pelos modelos T1S e T2S, usando a equação CR.

Os resultados mostram que a influência da inclusão das calotes esféricas na determinação dos diâmetros médios dos elementos da rede é significativo apenas para os valores de K_l , correspondentes ao comprimento médio dos canais, l . Como o comportamento hidrodinâmico da rede é uma função mais forte do diâmetro dos canais, é possível concluir que a inclusão das calotes não é muito significativa. No entanto, a influência do volume das

calotes também se faz sentir em E_R , parâmetro necessário para determinar os parâmetros macroscópicos que caracterizam o escoamento e o transporte de massa na rede.

3.6.4 Comparação entre os Modelos T2 e T2S

Os modelos T1S e T2S foram desenvolvidos para reduzir o número de parâmetros que devem ser impostos ao gerador da rede. Nesta secção os valores previstos pelos dois tipos de modelos são comparados entre si. Como os valores previstos de $K_d(\varepsilon)$ e $K_l(\varepsilon)$ pelos dois modelos são idênticos, na comparação entre os valores previstos pelos dois tipos de modelos apenas vão ser considerados os modelos T2 e T2S.

Na Figura 3.54 são comparadas as correlações de $K_d(\varepsilon)$ obtidas pelos dois modelos. É possível observar que as correlações previstas pelos dois modelos possuem comportamentos diferentes. Em particular, as correlações obtidas pelo modelo T2S atravessam as curvas do modelo T2 para diferentes valores de θ e não se observa um comportamento limite tão marcado como o observado no modelo T2. Para valores de porosidade baixas, o modelo T2S prevê valores similares aos previstos pelo modelo T2 quando θ toma valores próximos de $\pi/3$. No outro extremo observa-se o mesmo comportamento mas com $\theta = \pi/4$.

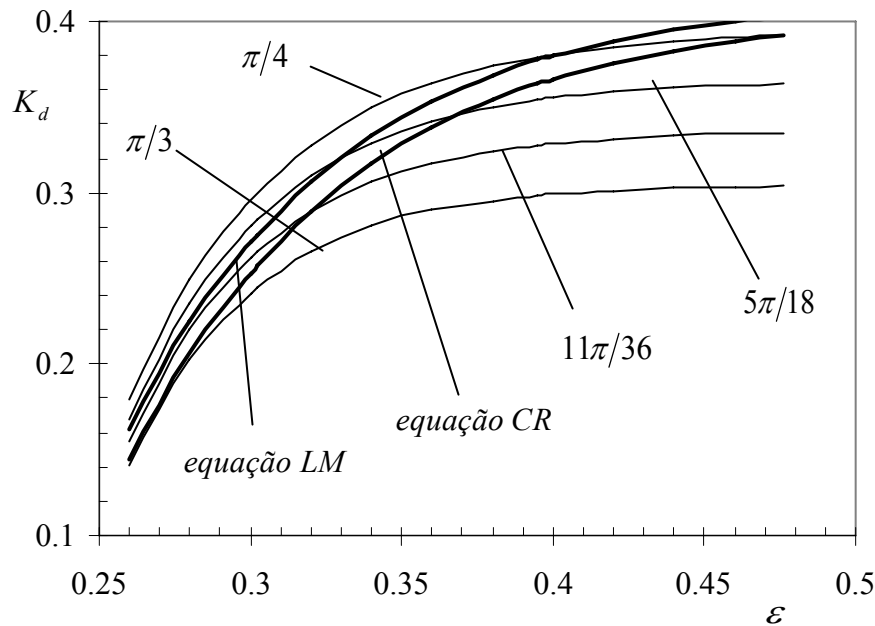


Figura 3.54 Comparação das curvas de correlação de K_d em função de ε para o modelo T2 completo e simplificado, usando quatro valores de típicos de θ . Curvas a cheio correspondem aos valores determinados pelo modelo T2S.

Como se pode observar na Figura 3.35, as equações LM e CR prevêm valores de θ dentro dos valores apresentados nos limites da gama de valores de porosidade para os quais o modelo geométrico está definido. Visto que a tortuosidade do meio poroso está relacionada com θ , impor um valor de θ na rede implica que o valor de T está fixado. Esta hipótese pode não ser adequada para toda a gama de valores de porosidade, pois espera-se que a redução da porosidade resulte num aumento da distância média percorrida pelas partículas através do meio poroso com a consequente redução da tortuosidade, de acordo com a Equação 3.65. Por outro lado, para valores elevados de porosidade as curvas previstas pelos modelos T1 e T2 (como se pode ver na Figura 3.29 para o modelo T1) tendem para valores constantes, ao contrário dos modelos T1S e T2S. Deste modo, a variação da resistência ao escoamento com a porosidade vai ser mais marcada para os modelos T1S e T2S. Como as curvas de K_l se comportam da mesma forma nessa gama de valores de ε , o comportamento previsto pelos modelos T1S e T2S prevê uma maior dependência da porosidade, situação fisicamente mais adequada. Apenas a comparação com dados experimentais nos Capítulos 4 e 5 permitirá obter conclusões mais detalhadas.

Na Figura 3.55 são comparadas as curvas de $K_l(\varepsilon)$ para os modelos T2 e T2S. Ao contrário das correlações de $K_d(\varepsilon)$, em que se observa o mesmo comportamento qualitativo, para este parâmetro observam-se diferenças apreciáveis. Em particular, o comportamento da função das correlações de K_l em função de ε é mais regular e monótono do que o observado para o modelo completo. De acordo com a definição da tortuosidade e como a distância média percorrida pelas partículas do fluido é proporcional a K_l , aumentando θ K_l aumenta de modo a que l_o aumente. A ocorrência de um máximo de K_l nos modelos T1 e T2 é devida à necessidade de compensar o volume de vazios na célula fundamental, devido à forte variação de K_D entre os enchimentos cúbico e ortorrômbico. Nos modelos T1S e T2S a variação mais pronunciada de K_d em função da porosidade permite reduzir as variações de K_l , como é possível observar na Figura 3.55.

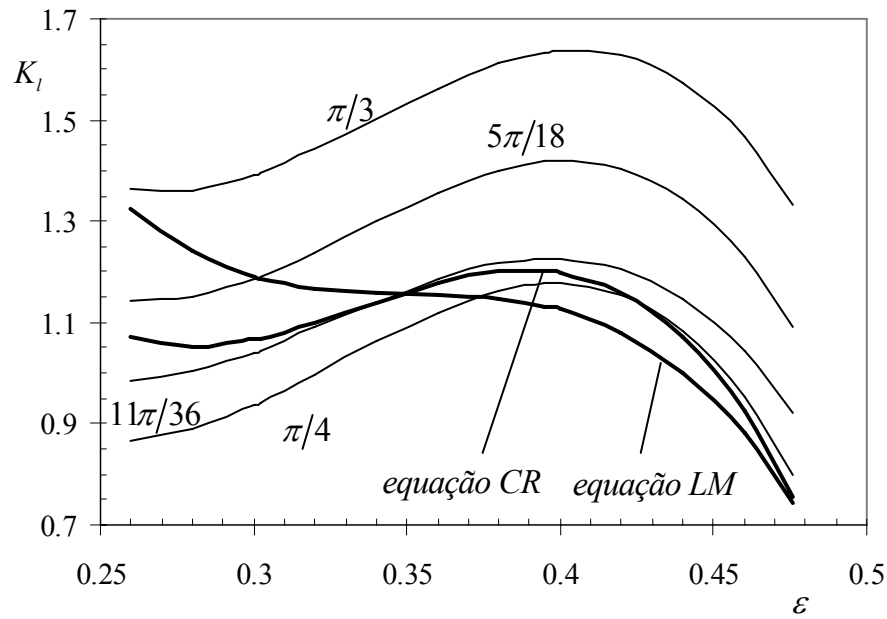


Figura 3.55 Comparação das curvas de correlação de K_l em função de ε para o modelo T2 completo e simplificado, para quatro valores típicos de θ .

3.6.5 Verificação dos Critérios e Restrições Impostos no Gerador da Rede

No desenvolvimento do modelo geométrico não foram tomadas em conta as restrições existentes entre os diâmetros das câmaras e dos canais. Apenas nos modelos T2, T2S e T4, em que o volume das calotes é tomado em conta, é que $d_j < D_i$ para toda a gama de valores de porosidade para que K_h seja fisicamente válido. Esta restrição é a razão pela qual não é possível determinar o valor de K_d correspondente ao leito ORT no modelo T4.

Independentemente do modelo considerado, K_l é sempre maior que zero. A única possibilidade de ocorrerem problemas na determinação da distribuição de comprimentos é na situação em que existem canais horizontais na rede e quando $\theta < \pi/6$. Na Secção 3.5.5 mostrou-se, que para gama de valores de porosidade definida pelos leitos de enchimentos regulares, θ deverá ser definido no intervalo entre $\pi/4$ e $\pi/3$. Estes valores são superiores a $\pi/6$, pelo que é improvável a ocorrência de problemas na determinação de comprimentos dos canais. Por outro lado, como a distribuição de valores de D_i é apertada, de acordo com as características dos leitos de enchimento de esferas que serviram de base ao modelo geométrico, a probabilidade de ocorrer $D_i > L_0$ é praticamente nula.

A verificação das condições de não intersecção depende de θ , não permitindo o modelo geométrico a determinação deste parâmetro. Para a gama de valores de θ determinada na Secção 3.4.8, os critérios mais significativos são o A2 ou o A3, conforme a rede possui ou não redes horizontais respectivamente (ver Figura 3.12). Como quantitativamente os modelos T1 e T2 possuem um comportamento similar, apenas são analisados os valores previstos por este último. Na Figura 3.56 e na Figura 3.57 são comparadas as curvas da razão K_d/K_D em função da porosidade, previstas pelo modelo T2 e as curvas limites dessa razão previstas pela aplicação dos critérios A2 e A3, para dois valores de θ : $\pi/4$ e $\pi/3$. As curvas limite são rectas horizontais, encontrando-se a zona válida por abaixo da linha associada a cada um dos critérios.

Da análise das figuras conclui-se que, quando os critérios de não intersecção são considerados, os valores previstos pelo modelo geométrico não podem ser usados em redes com canais horizontais. Em redes sem canais horizontais, apenas nos extremos do intervalo de valores de porosidade é que os valores podem ser aplicados. Comparando a Figura 3.56 e a Figura 3.57 pode-se observar que o aumento de θ reduz a gama de aplicabilidade do modelo geométrico.

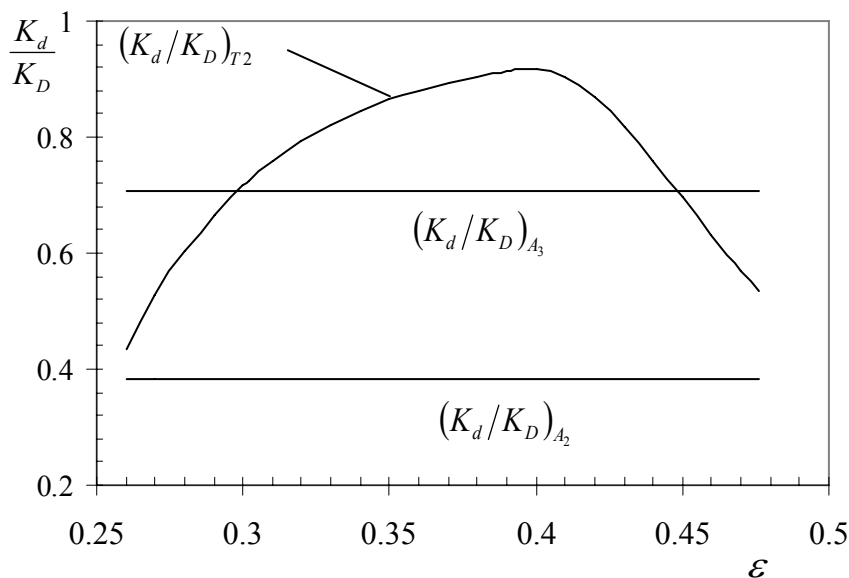


Figura 3.56 Valores da razão entre K_d e K_D para o modelo T2, para $\theta = \pi/4$.

Como os valores de K_D são constantes numa gama larga de porosidade, K_d e K_l têm de aumentar de valor para manter a porosidade da célula fundamental. Este resultado está de acordo com a influência de θ em K_d , em que se observou que ambas as variáveis são inversamente proporcionais.

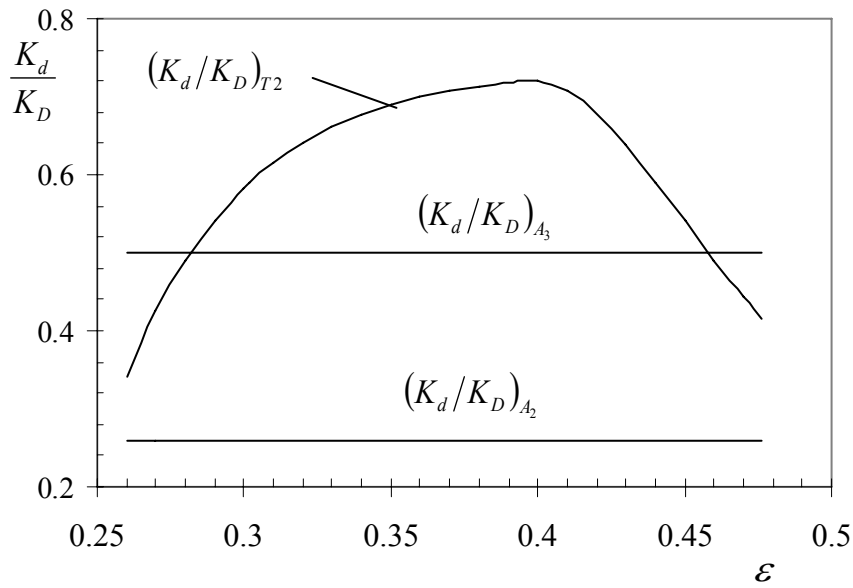


Figura 3.57 Valores da razão entre K_d e K_D para o modelo T2, para $\theta = \pi/3$.

Como os valores de K_D não dependem de θ , a redução dos valores de K_d devido ao aumento de θ origina uma redução da razão K_d/K_D , alargando desse modo a gama de validade do modelo.

Para os modelos T1S e T2S, usando as Equações 3.67 e 3.68 é possível determinar as expressões limites dos critérios A2 e A3 em função da porosidade. As expressões obtidas são exactas quando as distribuições usadas são pontuais. Para o caso em que são usadas distribuições não pontuais, as expressões obtidas representam critérios aproximados, que, quando verificados pelos valores médios das distribuições, devem ser verificados pela generalidade das câmaras e dos canais associados entre si. Para a equação LM, as seguintes expressões foram obtidas

$$\frac{K_d}{K_D} \leq \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + \sqrt{\varepsilon}} - \sqrt{1 - \sqrt{\varepsilon}} \right) \text{Critério A2} \quad (3.80)$$

$$\frac{K_d}{K_D} \leq \sqrt{\varepsilon} \text{ Critério A3} \quad (3.81)$$

Usando a equação CR, as seguintes expressões são obtidas para cada um dos critérios

$$\frac{K_d}{K_D} \leq \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{1}{1 - 0.49 \ln(\varepsilon)}} - \sqrt{1 - \frac{1}{1 - 0.49 \ln(\varepsilon)}} \right) \text{Critério A2} \quad (3.82)$$

$$\frac{K_d}{K_D} \leq \frac{1}{1 - 0.49 \ln(\varepsilon)} \quad \text{Critério A3} \quad (3.83)$$

Na Figura 3.58 são comparadas as curvas de K_d/K_D em função da porosidade para os modelos T1S e T2S com as curvas limite definidas pelas Equações 3.80 e 3.81. Como se toma em conta a variação de θ em função de ε , as curvas limite vão variar em função da porosidade. Em particular, como θ diminui com o aumento de ε , como se pode observar na Figura 3.35, os valores limites previstos a partir dos critérios de não intersecção aumentam. Comparando as Figura 3.58 e a Figura 3.59, observa-se que as curvas possuem o mesmo comportamento qualitativo, prevendo a equação LM variações mais acentuadas em função de ε .

As conclusões já obtidas para os modelos T1 e T2 são extensíveis também aos modelos T1S e T2S. Em particular, os valores previstos pelo modelo são aplicáveis apenas a redes sem canais horizontais e nos extremos da gama de valores de porosidade.

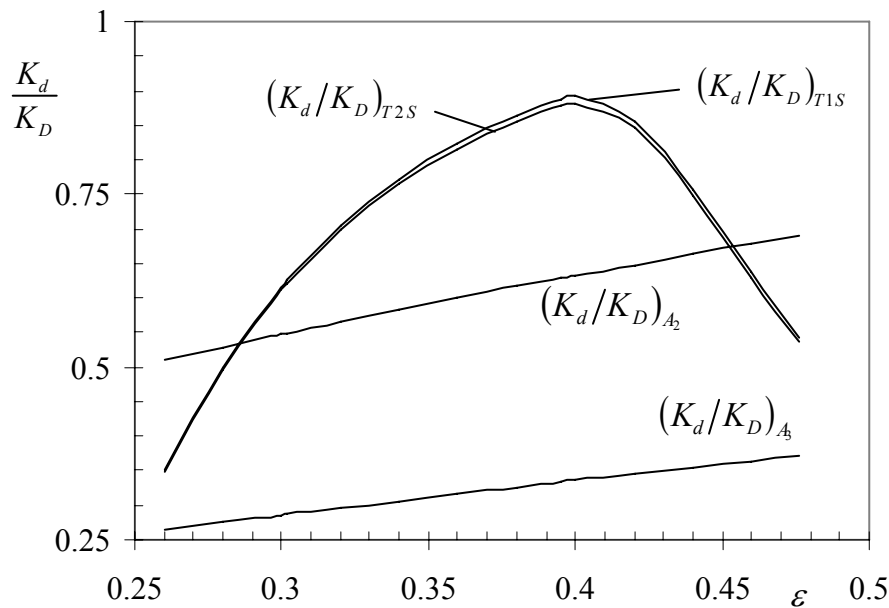


Figura 3.58 Comparação da razão K_d/K_D limite e as previsões dos modelos T1S e T2S usando a equação LM.

Comparando com os resultados apresentados nas Figura 3.56 e Figura 3.57, observa-se que na gama de valores de porosidade baixa os modelos T1S e T2S comportam-se como se θ fosse mais elevado. Para a gama de valores de porosidade elevada, observa-se a situação contrária.

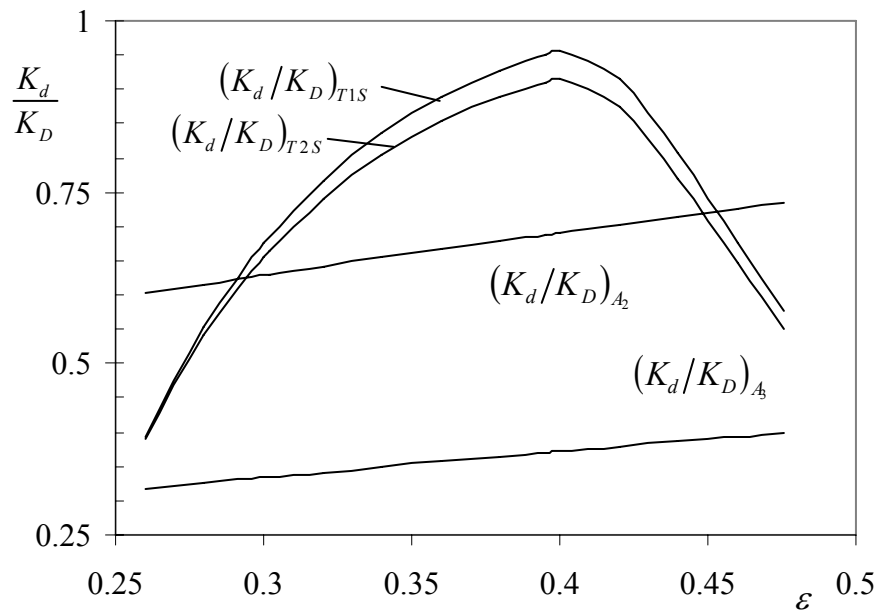


Figura 3.59 Comparação da razão K_d/K_D limite as previsões dos modelos T1S e T2S usando a equação CR.

Os resultados apresentados permitem concluir que os valores previstos pelo modelo geométrico não devem ser usados quando se usam os critérios de não intersecção, não sendo possível a utilização de redes com canais horizontais. A relaxação das condições a verificar entre os valores de D_i e d_j associados entre si, além de reduzir o tempo de cálculo necessário para a geração da rede, permite também usar os valores previstos pelos modelos geométricos em toda a gama de valores de porosidade. Mesmo considerando que em certas situações, como por exemplo quando θ é elevado ou os valores médios das distribuições de diâmetros são próximos, o volume das intersecções entre os canais possa ser significativo, na maior parte das situações este pode ser desprezado. Este erro é implícito na maior parte dos modelos de redes propostos na literatura, em que as câmaras têm um volume desprezável (Sahimi, 1992) ou não existe nenhuma preocupação em corrigir o volume de vazios devido à intersecção dos canais nos nós de mistura. Mesmo em modelos em que são definidos dois tipos de elementos (Koplik, 1982; Berkowitz e Ewing, 1996; Wang *et al.*, 1998), a possibilidade de intersecção dos canais à entrada das câmaras e a sua influência nos parâmetros geométricos da rede não é tomada em consideração. Estes aspectos são analisados com mais atenção nas secções seguintes.

3.6.6 Selecção do Modelo

A análise e comparação das previsões dos diferentes modelos geométricos permite concluir que os modelos T3 e T4 não são adequados. Observa-se a existência de um máximo marcado nos valores de K_d em função de ε , o que, de acordo com o comportamento esperado para o escoamento através da rede, é fisicamente improvável.

Os restantes modelos assumem que K_l é uma função da porosidade. A diferença mais significativa é a forma como θ é definido, arbitrário nos modelos T1 e T2 ou função de ε para os modelos T1S e T2S, tendo-se observado diferenças significativas entre estes. Como o parâmetro mais importante para a descrição do escoamento é o diâmetro dos canais, a selecção do ou dos modelos mais adequados deverá ser feita principalmente baseada neste parâmetro.

Nos modelos T1 e T2, a função $K_d(\varepsilon)$ tende para um patamar para valores de porosidade próximos do limite superior da gama de definição dos modelos geométricos. Nos modelos T1S e T2S, apesar da influência da porosidade ser menor nessa gama de valores, $K_d(\varepsilon)$ não tende para um valor assintótico. Como já se concluiu nas secções anteriores, a diminuição da influência de ε em d implica a diminuição da redução da resistência ao escoamento, de acordo com o comportamento qualitativo esperado em função da porosidade. O mesmo comportamento não deve ser tão acentuado nos modelos T1S e T2S.

Em relação a θ , por razões físicas é de se esperar que o valor deste parâmetro dependa da porosidade mas também da estrutura do meio poroso. Mesmo o sentido de escoamento pode ser significativo, como se conclui na análise da estrutura geométrica dos leitos de enchimento regulares. A utilização de um valor médio para o espaçamento entre as linhas das câmaras, definido pelo parâmetro K_F , permite eliminar o efeito do posicionamento relativo das esferas no cálculo de θ . Como a resistência ao escoamento aumenta com a redução de ε , e esta é proporcional ao espaço percorrido pelo fluido através do meio poroso, este parâmetro também é função da porosidade. No entanto, como as estruturas geométricas da rede e dos leitos de enchimento regulares são diferentes, duas hipóteses podem ser consideradas para θ .

- Se T for conhecido, θ pode ser determinado directamente a partir da Equação 3.66. O valor calculado é independente do modelo geométrico considerado, mas apenas pode ser usado nos modelos T1 e T2, em que θ é um parâmetro livre. Os valores de K_D , K_d e K_l

podem ser calculados conhecido ε e tomando em conta as hipóteses respeitantes ao volume associado às calotes esféricas.

- Se T não for conhecido, duas opções podem ser consideradas. Conhecido ε , T e θ podem ser estimados a partir das equações LM e CR. Por outro lado, θ pode ser determinado de modo a ajustar os valores previstos pelo simulador hidrodinâmico ou de transporte de massa a dados experimentais disponíveis na literatura. Visto que a utilização de uma expressão de T em função de ε permite a obtenção de uma curva única para $K_d(\varepsilon)$ e $K_l(\varepsilon)$, independente de θ , e o valor de T é de difícil determinação experimental, é preferível a utilização dos modelos T1S e T2S.

Como o modelo T2S permite a inclusão de maior número de características geométricas da rede, considera-se este como devendo ser o mais adequado na determinação dos parâmetros da rede equivalente a um dado meio poroso. No entanto, não é possível concluir qual das expressões da tortuosidade consideradas é mais adequada, sendo esta questão analisada nos Capítulos 4 e 5.

3.6.7 Comparação com Valores Publicados

Nesta secção, vai-se efectuar a comparação com valores publicados das dimensões características dos elementos da rede. Como quase sempre os valores apresentados são baseados no ajuste de dados experimentais ou obtidos da geração do meio poroso através da deposição de partículas (ver Secção 2.2.4.3) apenas pode ser efectuada uma comparação qualitativa dos resultados. Visto que o modelo geométrico se baseia na análise geométrica de leitos de enchimento de esferas iguais com uma estrutura regular, apenas são considerados dados experimentais obtidos em leitos de enchimento formados por partículas esféricas com uma distribuição apertada de diâmetros. Além deste aspecto, apenas foram considerados os modelos T1S e T2S na comparação entre valores previstos e experimentais, quando é necessário comparar valores dos parâmetros que caracterizam a estrutura local do meio poroso.

A maior parte dos dados experimentais apresentados na literatura foram obtidos recorrendo a porosimetria de mercúrio ou métodos similares. Estas técnicas experimentais, baseadas na análise da penetração ou retracção de um fluido no interior do meio poroso, permitem determinar as distribuições das dimensões características das constrições existentes no interior do meio. Para se determinarem as características geométricas da estrutura, outras técnicas

experimentais devem ser usadas para completar os dados experimentais obtidos por porosimetria de mercúrio, como por exemplo tratamento de imagem de cortes bidimensionais do meio poroso (Dullien, 1992; Mata *et al*, 2001a e 2001b).

Kruyer (1958) efectuou experiências de porosimetria em leitos de enchimento de esferas com tamanho uniforme mas com uma estrutura aleatória. As curvas de intrusão e de retracção obtidas permitem concluir que a distribuição dos diâmetros dos poros, correspondente aos canais da rede, são praticamente pontuais, com valores de desvio padrão muito pequenos. Frevel e Kressley (1963) e Mayer e Stowe (1965 e 1966) modelizaram a penetração e retracção de mercúrio em enchimentos de esferas admitindo que a sua estrutura é regular. Frevel e Kressley analisaram a disposição relativa entre as linhas de esferas existentes no meio poroso e Mayer e Stowe (1965 e 1966) analisaram o comportamento dos leitos de enchimento definindo uma célula fundamental similar às definidas no modelo geométrico. Os resultados obtidos pelos dois modelos são concordantes com os dados experimentais de Kruyer (1958). Wall e Brown (1981) analisaram o comportamento de leitos de enchimento de esferas iguais com uma estrutura cúbica regular (em que se incluem os leitos romboédrico-piramidal e cúbico) tendo obtido conclusões idênticas. Dependendo da porosidade do meio poroso, Mayer e Stowe (1965 e 1966) prevêm valores de K_d entre 0.27 e 0.37, valores concordantes com os obtidos pelo modelo geométrico.

Nolan e Kavanagh (1994) simularam a deposição aleatória de esferas com diferentes distribuições de diâmetros no interior de contentores, desprezando os efeitos das paredes e do fundo do contentor. As dimensões características dos espaços vazios de maiores dimensões foram obtidas determinando as dimensões das maiores esferas que é possível introduzir no interior da estrutura do leito de enchimento. Os resultados obtidos por Nolan e Kavanagh (1994) confirmam a hipótese das distribuições de diâmetros das câmaras e dos canais serem dependentes da distribuição de tamanhos das partículas, em particular do valor do desvio padrão. Os valores previstos para D para valores de porosidade próximas do leito ortorrômbico são concordantes com o valor previsto pelo modelo geométrico. No entanto, a razão entre os valores de D e d é muito elevada, cerca de sete, em desacordo com os resultados do modelo geométrico. As diferenças estão relacionadas com a forma como o volume dos vazios existentes no interior do leito de enchimento é tomado em consideração. Assumir que o diâmetro dos canais é igual ao diâmetro da maior partícula que pode percolar através do leito apenas toma em conta em consideração as constrições existentes entre as partículas do enchimento. No entanto, um canal real, além da constrição, possui uma zona de

contração e outra de expansão (Payatakes *et al.*, 1973a), sendo o volume associado a essas zonas desprezado por esta estratégia.

Payatakes *et al.* (1973a) determinaram as dimensões características de uma rede unidimensional constituída por tubos de diâmetro variável. As dimensões características dos diâmetros foram determinadas analisando as curvas de penetração de água no interior de leitos de enchimento formados por partículas com uma distribuição apertada de diâmetros. Os valores obtidos de d comparam-se favoravelmente com os valores previstos pelo modelo geométrico (T1S e T2S), observando-se erros de cerca de 7%. Em relação aos valores de D e de l , existem diferenças acentuadas com os valores previstos, o que pode ser devido à diferente estrutura geométrica e à forma como os dados experimentais foram usados. Payatakes *et al.* (1980) apresentam dados para um enchimento de partículas com uma distribuição larga de diâmetros, observando-se diferenças acentuadas entre valores experimentais e previstos. Os resultados obtidos confirmam as conclusões anteriores de que o modelo geométrico é adequado apenas quando a distribuição dos diâmetros das partículas é apertada.

Chan e Ng (1986 e 1988) consideraram a deposição de esferas com uma distribuição de diâmetros apertada num contentor rectangular. A estrutura da rede foi determinada efectuando uma tesselação de Voronoi com base em tetraedros (logo, $C = 4$), tendo estes autores assumido que os canais estavam definidos nas suas faces. O diâmetro das câmaras é calculado a partir do volume dos tetraedros e o diâmetro dos canais é calculado como sendo o raio hidráulico das faces. Por analogia com o modelo geométrico, os valores de d e de D previsto pelo modelo são aproximadamente 0.38 e 0.45 respectivamente, tendo-se obtido distribuições de diâmetros apertadas, em particular para as câmaras. Como os leitos de enchimento gerados deste modo possuem um valor de porosidade próximo de 0.4 (Spedding e Spencer, 1995), os valores obtidos por Chan e Ng (1986 e 1988), são concordantes com os valores previstos pelo modelo geométrico.

A mesma estratégia foi usada por Chu e Ng (1989), mas tomando em conta o efeito da parede na estrutura local do leito de enchimento. Nas zonas centrais do leito foram definidos tetraedros, mas, na vizinhança das paredes, de modo a simular a zona de maior porosidade, foram definidos pentaedros. As distribuições dos diâmetros dos canais e das câmaras são determinadas da mesma forma que no trabalho de Chan e Ng (1988), tendo também determinado a distribuição dos comprimentos dos canais, l_j . Os valores apresentados

mostram que $K_l \approx 1.25$, em contradição com a hipótese de Payatakes *et al.* (1973a) de que $K_l \approx 1$, e que a distribuição dos comprimentos dos canais é bastante larga, mas de acordo com os valores previstos pelo modelo geométrico.

Bryant e Blunt (1992) e Bryant *et al.* (1993a, 1993b e 1996) utilizaram o leito de enchimento formado a partir de esferas com uma distribuição apertada dos diâmetros construído por Finney (1970) para estudar o escoamento monofásico e bifásico em meios porosos não consolidados. A estrutura da rede equivalente deste leito de enchimento foi também determinada usando uma tesselação de Voronoi baseada nas posições dos centros das esferas do meio poroso. Bryant e Blunt (1992) mostraram que os valores calculados dos diâmetros dos canais assumindo igual queda de pressão entre a constrição do meio real e os canais da rede resulta em valores de d similares, reforçando a validade do modelo geométrico. Bryant *et al.* (1993a e 1993b) estenderam o modelo inicialmente proposto por Bryant e Blunt (1992) de modo a calcular também o comprimento dos canais, tendo mostrado que num leito de enchimento existe uma distribuição de valores de l_j , também de acordo com o modelo geométrico. Bryant *et al.* (1996) simularam a saída de fluido com a estrutura do leito de enchimento de Finney, tendo concluído que os valores dos diâmetros das constrições do meio, equivalentes aos canais, possuem uma distribuição com $d \approx 0.25$, ainda de acordo com as previsões do modelo geométrico.

Seguin *et al.* (1998a), com base no modelo de raio hidráulico de Comiti e Renaud (1989), determinaram os valores de d correspondentes a leitos de enchimento formados por esferas uniformes com 8 e 5 mm de diâmetro. Os valores previstos pelo modelo são menores que os valores apresentados, com uma diferença de cerca de 13% entre eles, podendo esta diferença ser atribuível à forma distinta como os parâmetros são determinados.

Assumindo que a estrutura de um leito de enchimento era bem descrita por uma rede tridimensional com uma estrutura cúbica simples, e relacionando a estrutura desta com a estrutura local de um meio de enchimento, Payatakes e Neira (1977) obtiveram $\theta \approx 54^\circ$. Este valor foi usado na previsão dos valores de permeabilidade de leitos de enchimento, tendo obtido boa concordância entre valores experimentais e previstos. O valor de θ previsto pelo modelo geométrico é inferior para a gama de valores de porosidade normalmente encontrada, o que pode ser devido à diferente estrutura da rede considerada neste trabalho. Apesar da análise da estrutura de leitos de enchimento simulados permitir a determinação da distribuição de θ , não foram encontrados na literatura dados em relação a este parâmetro.

Da análise dos dados publicados e da comparação dos valores obtidos pelos vários autores com os previstos pelo modelo geométrico proposto é de realçar a boa concordância qualitativa obtida. Alguns dos autores referidos (Payatakes *et al.*, 1973a) utilizaram os valores obtidos para a descrição do comportamento de meios porosos, com bons resultados qualitativos, reforçando a validade do modelo apresentado. Os valores usados na comparação que são previstos pelo modelo geométrico apenas tomam em conta a restrição $d_j < D_i$. Deste modo, é de se esperar que este critério seja suficiente para descrever a estrutura do meio poroso e servir de base na modelização do escoamento e do transporte de massa neste.

3.7 Análise dos resultados do gerador da Rede

Apesar da boa concordância entre os valores previstos pelos modelos geométricos e dados experimentais disponíveis na literatura, alguns das condições e dos parâmetros necessários para a geração da rede não podem ser determinados por este. Visto que diferentes conjuntos de condições e restrições podem ser impostas ao gerador da rede, é importante analisar a sua importância nas características das redes obtidas.

Entre os valores de D e d é sempre imposto que $d_j < D_i$, de acordo com a consideração de que as câmaras correspondiam aos espaços vazios com maiores dimensões associados às câmaras da rede. A condição de não intersecção nunca é considerada nos modelos geométricos, pois não é possível relacionar directamente as estruturas geométricas da rede e dos leitos de enchimento regulares. Quando as distribuições de valores de D_i e d_j são pontuais não se coloca qualquer problema, o que pode não ser verdade quando as distribuições são não pontuais. Nesta situação, de acordo com o algoritmo da geração da rede considerado atrás, poderão ocorrer alterações ao nível local dos valores de D_i e d_j , resultando em diferenças entre as distribuições assumidas inicialmente e as obtidas.

Deste modo, as influências das restrições impostas ao gerador e dos parâmetros estatísticos das distribuições das dimensões características dos elementos devem ser analisadas simultaneamente. Nesta secção não se pretende analisar as condições de validade do modelo de redes mas sim como o processo de geração, em particular o conjunto de condições impostas e os valores dos parâmetros das funções de distribuição, influencia a estrutura geométrica final da rede.

Por outro lado, variando os parâmetros das distribuições de valores de D_i e d_j , vão-se obter redes com características macroscópicas diferentes. Aumentando o número de elementos, é de esperar que os valores dos parâmetros característicos tendam para valores médios independentes das características das distribuições usadas. Interessa portanto determinar também quais são os critérios que permitem assegurar que os resultados obtidos são estatisticamente significativos.

Como existem restrições na aplicação dos valores previstos pelos modelos geométricos, em particular em relação às restrições de não intersecção, na análise de sensibilidade efectuada nesta secção usaram-se valores representativos de um meio poroso real mas não relacionados entre si. Foram considerados três valores distintos da razão de diâmetros $d/D = 0.25, 0.50, 0.75$, sendo fixados o diâmetro médio das câmaras, $D = 0.004 \text{ m}$, o comprimento médio dos canais $l = 0.007 \text{ m}$, e o ângulo que os canais oblíquos fazem com a vertical, $\theta = \pi/4$. Salvo indicação em contrário, assume-se que os parâmetros tomam sempre o valor indicado. Em todas as simulações envolvendo distribuições não pontuais é usada a distribuição ULLN, sendo os seus parâmetros definidos de modo a que esta possua um comportamento aproximadamente normal (ver Apêndice A.4.2). Para cada uma das distribuições foram usados três valores do desvio padrão: para a distribuição de valores de D_i , $\sigma_D = 0.05, 0.20, 0.40$; para a distribuição de valores de d_j , $\sigma_d = 0.05, 0.20, 0.50$. Impôs-se em todas as distribuições que o valor máximo é 2.5 vezes maior que o valor médio. Nas Figura 3.60 e Figura 3.61 são apresentadas as distribuições dos valores de D_i e dos d_j para valores de d/D iguais a 0.25 e 0.75. As curvas das distribuições de valores de D_i apresentadas a cheio e as curvas das distribuições de valores de d_j a traço mais fino de modo a facilitar a sua visualização.

Nas secções seguintes não é estudada a influência da remoção de câmaras e/ou canais, quaisquer que sejam as condições impostas nesta. Esses procedimentos de remoção alteram apenas a distribuição dos valores de C_i , e não as distribuições das dimensões características dos elementos da rede, visto que não influenciam a forma como os valores de D_i , d_j e l_j são atribuídos. Então, a sua influência vai-se observar ao nível do escoamento e do transporte na rede de elementos, em que as alterações da estrutura derivadas do processo de remoção podem ser significativas.

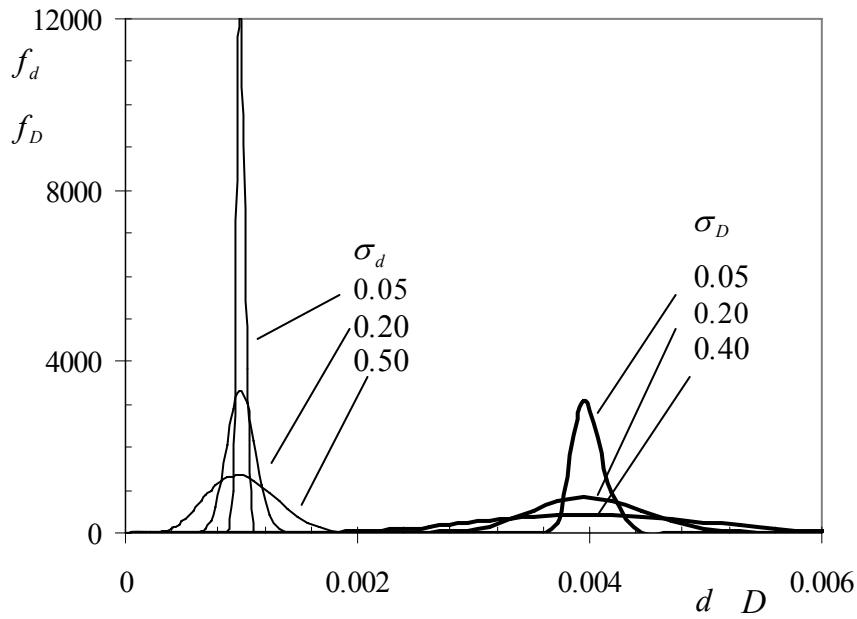


Figura 3.60 Distribuições dos diâmetros das câmaras e dos canais para $d/D = 0.25$.

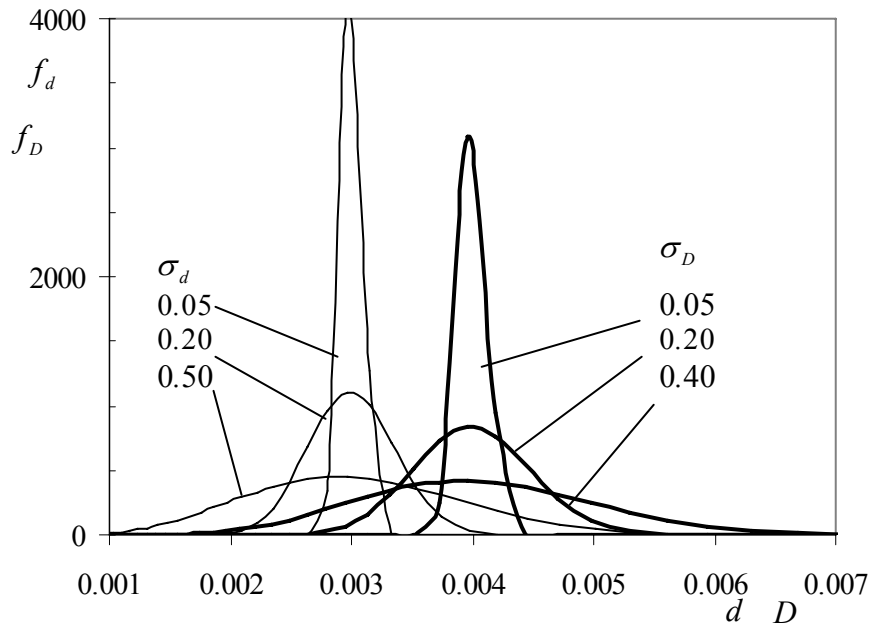


Figura 3.61 Distribuições dos diâmetros das câmaras e dos canais para $d/D = 0.75$.

A remoção de elementos da rede influencia no entanto o volume de vazios e por consequência os valores dos parâmetros geométricos que caracterizam a rede de elementos, em particular a espessura equivalente, E_R . Mas, como as distribuições das dimensões características dos elementos da rede não são alteradas, e o número de elementos removidos é proporcional ao valor de C pretendido, E_R e C vão ser directamente proporcionais, dependendo a constante de proporcionalidade do tipo de elementos removidos. Apesar da dependência esperada do

valor de E_R , o que influenciará o escoamento a nível macroscópico, como nesta secção apenas estamos interessados nas características geométricas da rede e dos seus elementos, o estudo da remoção de elementos da rede não é muito importante, não sendo efectuado.

3.7.1 Influência das Características Geométricas da rede

Dos vários parâmetros que caracterizam geometricamente uma rede ao nível macroscópico, seleccionou-se a espessura equivalente, E_R , para determinar em que condições podem considerar as redes geradas como sendo estatisticamente significativas. Este parâmetro é determinado usando a Equação 3.12, observando-se que depende tanto das distribuições de tamanhos dos elementos da rede como das condições impostas ao gerador da rede.

Foram geradas redes para diferentes parâmetros e conjuntos de condições impostas ao gerador. Pelo menos oito repetições de cada uma das simulações foram efectuadas, de modo a ser possível a determinação da variabilidade dos valores obtidos. Desde que a variabilidade seja menos de 1% do valor médio, assume-se que alcançaram as condições em que os valores obtidos são estatisticamente significativos. Em todos os casos estudados considerou-se que $\varepsilon = 0.4$.

3.7.1.1 Dimensões da rede

O parâmetro mais importante na definição das condições de validade da rede é o número total de elementos da rede, sendo este controlado pelos valores de N_x e N_y . Como estes parâmetros são impostos ao gerador interessa determinar que condições devem verificar N_x e N_y de modo a assegurar resultados estatisticamente significativos.

Valores de E_R em função de N_y para valores constantes de N_x são apresentados na Figura 3.62. Os resultados foram obtidos para rede do tipo 11 usando $d/D = 0.25$, $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$, considerando apenas a restrição $d_j < D_j$, desprezando o volume associado às calotes. Com o aumento de N_x obtém-se valores cada vez maiores de E_R , embora as diferenças sejam cada vez menores. Todas as curvas de E_R em função de N_y tendem para valores constantes se $N_y \geq 200$. A variabilidade dos valores calculados para cada geração da rede diminui com o aumento de N_y e N_x .

Na Figura 3.63 são apresentados os valores previstos de E_R em função de N_x para diferentes valores constantes de N_y , nas mesmas condições usadas na Figura 3.62. O mesmo comportamento qualitativo observado na Figura 3.62 também se observa na Figura 3.63, permitindo agora concluir que se $N_x \geq 200$ já se alcançou o comportamento assintótico.

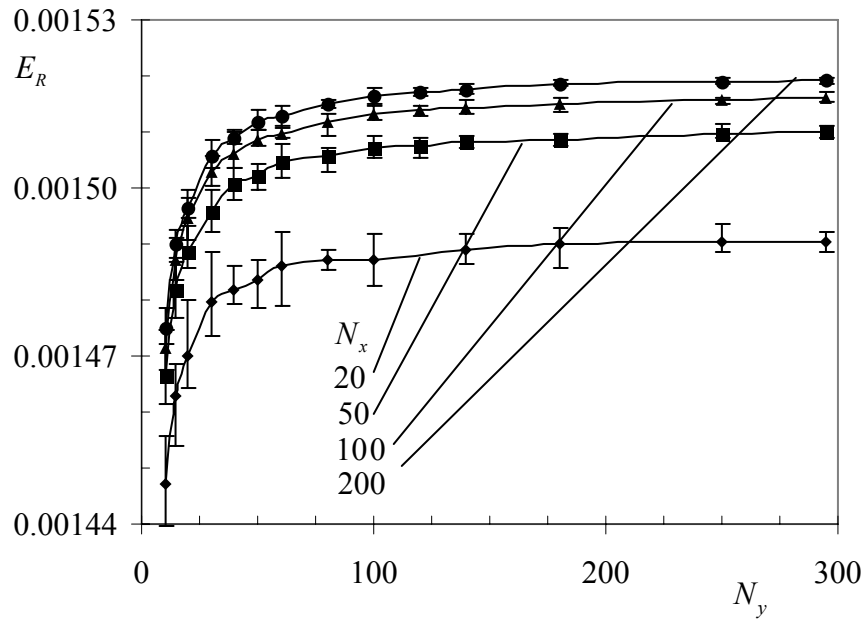


Figura 3.62 Valores de E_R em função de N_y para diferentes valores de N_x .

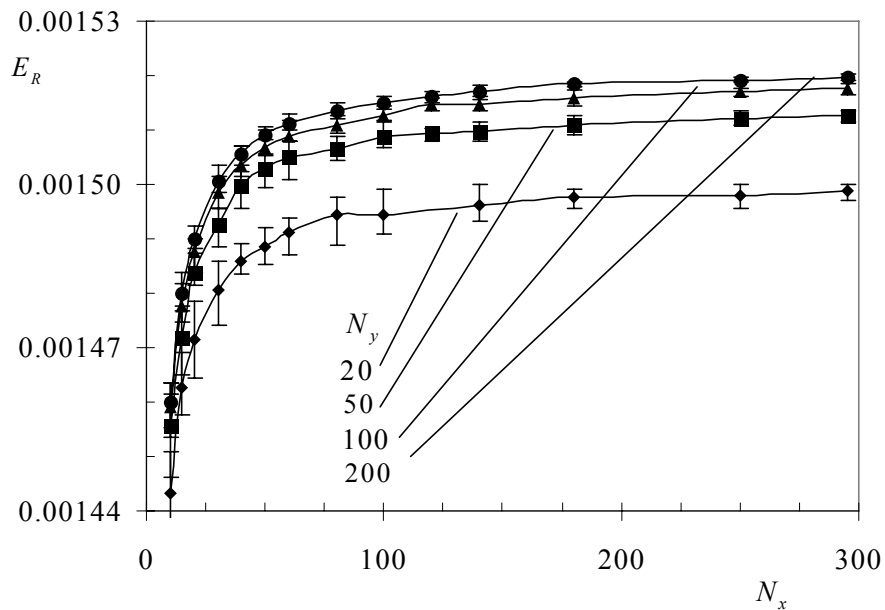


Figura 3.63 Valores de E_R em função de N_y para diferentes valores de N_x .

Como o tempo necessário para a geração da rede e para as simulações dos Capítulos 4 e 5 são fortemente dependentes dos valores de N_x e N_y , e como a variação de E_R entre $N_x = 100$ e

$N_x = 200$ (ou $N_y = 100$ e $N_y = 200$) é no máximo 1%, assumiu-se que desde que $N_x \geq 100$ e $N_y \geq 100$ os resultados obtidos são significativos. Estes resultados podem depender também das condições impostas à estrutura da rede e às distribuições dos diâmetros das câmaras e dos canais, sendo estes aspectos analisados mais em detalhe nas sub-secções seguintes. Como o comportamento observado em função de N_x ou de N_y é idêntico, é indiferente analisar o comportamento em função de uma ou outra variável.

3.7.1.2 Estrutura da Rede

Das condições impostas ao gerador da rede, as mais importantes na determinação da estrutura da rede são a existência ou não de canais horizontais, o tipo de fronteiras, e a remoção ou não de câmaras e/ou canais (para alterar o número de coordenação). O valor de E_R é função do volume de vazios da rede, que por sua vez depende do número total de elementos da rede.

Para redes com dimensões estatisticamente significativas, a razão entre o número total de elementos de redes com e sem fronteiras periódicas tende para um, como se mostra no Apêndice A.3.4. Para ilustrar este facto e analisar a influência deste factor no valor previsto para a espessura equivalente da rede, na Figura 3.64 são comparados os valores de E_R e da razão entre o número total de elementos em função de N_y . Como se mostra no apêndice A.3.4, o valor de N_T^{10}/N_T^{00} , em que N_T^{00} e N_T^{10} são o número total de elementos de redes tipo 00 e 10 respectivamente, não depende de N_x . Os diâmetros das câmaras e dos canais da rede são descritos por distribuições pontuais, com $d/D = 0.5$.

Os valores previstos para E_R possuem o mesmo comportamento limite observado na razão entre o número total de elementos dos dois tipos de redes, tendendo para o mesmo valor. Caso fosse representada a razão entre os valores de E_R , esta tenderia para um e teria um comportamento qualitativo idêntico ao da razão N_T^{10}/N_T^{00} . Estes resultados permite concluir que é o número total de elementos na rede o factor determinante no cálculo da espessura equivalente da rede quando as suas dimensões são estatisticamente significativas.

Conclusões idênticas são obtidas entre redes do tipo 11 (com fronteiras periódicas, com canais horizontais) e 10 (com fronteiras periódicas, sem canais horizontais). No entanto, a razão entre o número total dos elementos numa rede deste tipo não tende para a unidade, visto que

a inclusão ou não de canais horizontais altera a distribuição de valores de C_i em toda a rede e não apenas nas fronteiras.

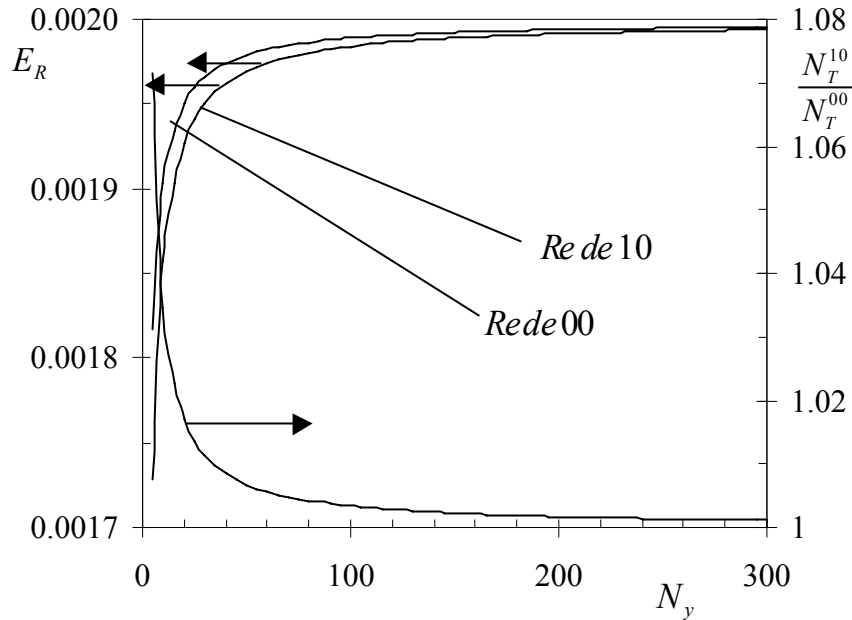


Figura 3.64 Comparação das razões dos valores de E_R e do número de canais de rede tipo 10 e 00 em função de N_y , para $N_x = 200$.

Na Figura 3.65 são apresentados os valores da razão entre os valores de E_R e do número total de elementos dos dois tipos de rede em função de N_y e de N_x , para os mesmos parâmetros das redes apresentadas na Figura 3.64. Observa-se que o comportamento limite dos valores das duas é idêntico. Contudo, ao contrário dos resultados apresentados na Figura 3.64, os valores limites não são iguais. De acordo com os resultados da Secção 3.4.8, os valores dos comprimentos médios dos canais horizontais e oblíquos são diferentes, sendo a sua razão função de θ . Deste modo, a razão entre o volume total de vazios de redes com e sem canais horizontais não é igual à razão entre o número total de elementos da rede, visto existirem elementos do mesmo tipo com características diferentes. Apenas quando $\theta = \pi/6$ é que os valores da razão dos valores da espessura equivalente da rede e do número total de elementos tendem para o mesmo valor limite.

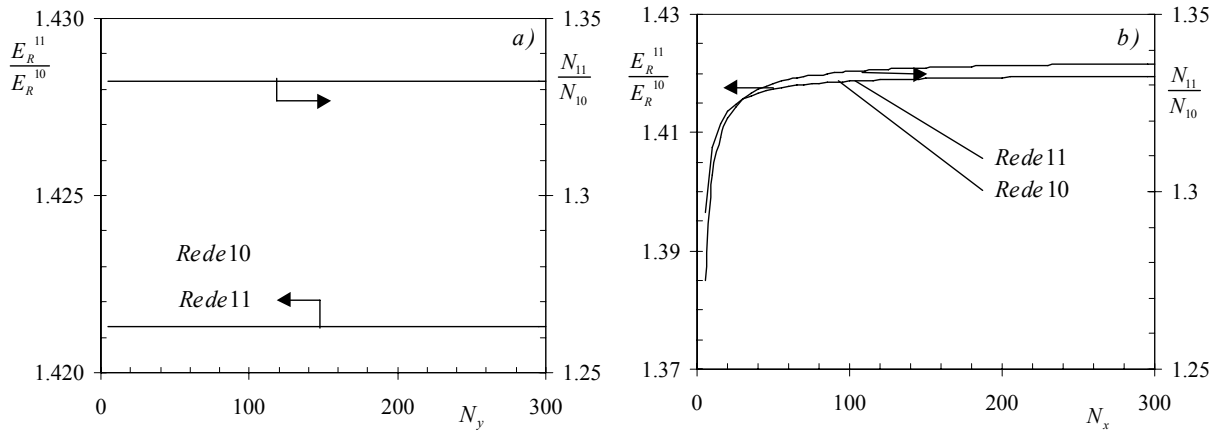


Figura 3.65 Comparação das razões dos valores de E_R e do número de canais de rede tipo 11 e 10 em função de: a) N_y , para $N_x = 200$; b) N_x , para $N_y = 200$.

As conclusões anteriores são válidas para redes com distribuições pontuais dos diâmetros das câmaras e dos canais. Na Figura 3.66 são comparados os valores previstos de E_R em função de N_y entre redes do tipo 00 e 10, com $N_x = 200$, $d/D = 0.5$, $\sigma_D = 0.40$, $\sigma_d = 0.50$. Apesar do comportamento irregular dos valores previstos de E_R em função de N_y , observa-se o mesmo comportamento qualitativo da Figura 3.64 para distribuições pontuais.

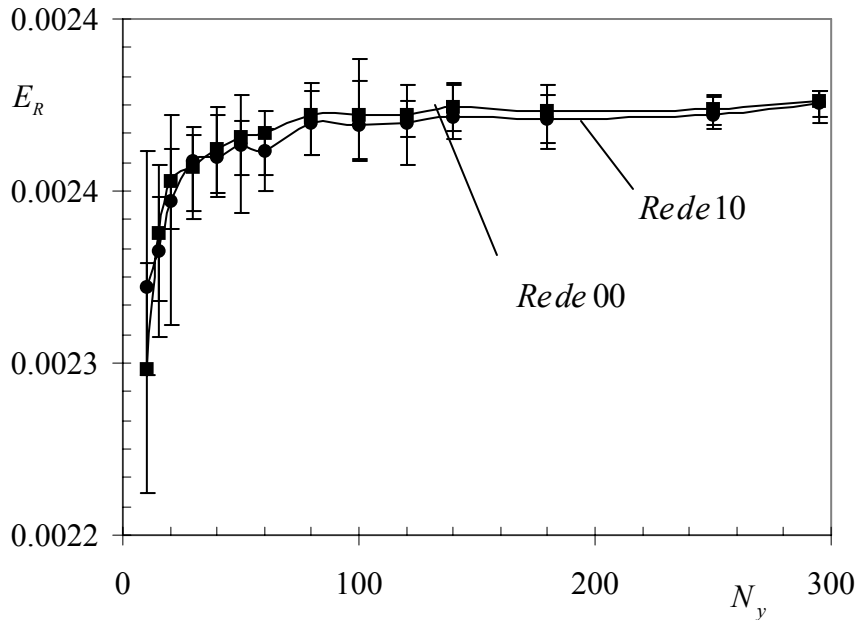


Figura 3.66 Comparação dos valores previstos de E_R em função de N_y , para $N_x = 200$, e redes tipo 00 e 10.

Comparando as variabilidades dos valores apresentados nas Figura 3.62 e Figura 3.63, para baixos valores do desvio padrão, com os valores apresentados na Figura 3.66, conclui-se que

os valores limite de N_x e de N_y que asseguram que os resultados obtidos pelo gerador são estatisticamente significativos não dependem apreciavelmente dos valores dos desvio padrão considerados.

Na Figura 3.67 mostra-se um estudo semelhante mas agora para redes tipo 10 e 11, para analisar a existência ou não de canais horizontais na rede. Foram consideradas redes com $N_x = 200$, $d/D = 0.5$, $\sigma_D = 0.40$, $\sigma_d = 0.50$, sendo comparada a influência dos dois tipos de restrições que é possível impor entre os valores de d_j e D_i ao nível local. De um modo semelhante aos resultados apresentados na Figura 3.65, pode-se observar que os valores de E_R tendem para valores constantes, mas diferentes devido à existência de duas distribuições distintas dos comprimentos dos canais, sendo desse os valores das razões entre o volume dos elementos da rede diferentes para os dois casos.

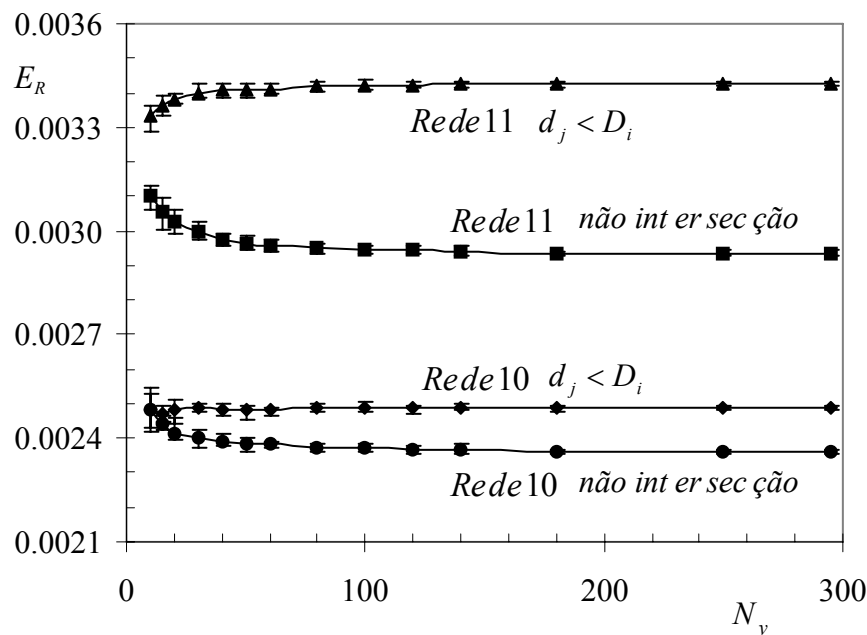


Figura 3.67 Comparação dos valores previstos de E_R em função de N_y , para $N_x = 200$ e redes tipo 10 e 11.

Comparando os resultados previstos para os dois conjuntos de restrições, observa-se que são mais marcados para a rede tipo 11. Devido à maior densidade de canais associados às câmaras quando existem canais horizontais, a verificação dos critérios de não intersecção implica maiores alterações nas distribuições dos valores de D_i e d_j . Em particular, o valor dos diâmetros das câmaras aumenta, resultando em valores mais elevados de E_R de acordo com a forma como este parâmetro é calculado (ver Secção 3.4.6). Em qualquer dos casos observa-se que os critérios definidos para assegurar que as redes são estatisticamente válidas em função

de N_x e N_y continuam a ser válidos e independentes do tipo de restrições entre os valores dos diâmetros dos canais e câmaras associados entre si.

Outro parâmetro da rede que influencia o valor E_R é o ângulo θ . A influência deste parâmetro pode-se exercer aos níveis global e local da rede. Ao nível global a influência deste parâmetro sente-se nos valores do comprimento e largura da rede. De acordo com as expressões de definição de L_x e L_y , Equações 3.16, 3.17 e 3.18, quando maior for θ , maior L_x e menor L_y . De notar que apesar de terem definido duas expressões para L_y , conforme o tipo de fronteira da rede, para dimensões da rede estatisticamente significativas as diferenças entre as duas expressões não são significativas. Ao nível local, a influência de θ só é significativa apenas quando são considerados os critérios de não intersecção entre os canais associados a uma câmara, visto que os critérios desenvolvidos são função deste parâmetro (ver Secção 3.4.3). Na Figura 3.68 são apresentados os valores de E_R previstos em função de N_y para redes tipo 10, tendo-se considerado redes com $N_x = 200$, distribuições pontuais com $d/D = 0.75$, usando apenas a restrição $d_j < D_i$. Foram considerados valores de θ dentro da gama prevista para o modelo geométrico e de acordo com as restrições impostas pelo gerador da rede, observando-se que quando maior for θ maior é E_R .

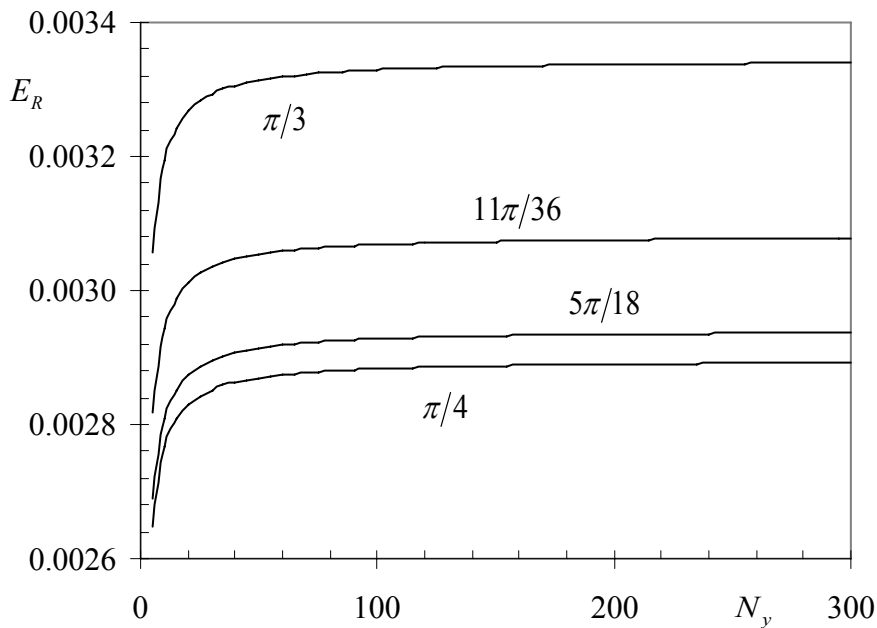


Figura 3.68 Comparação dos valores de E_R previstos em função de N_y , E_R para redes tipo 10, $N_x = 200$ e quatro valores de θ .

De acordo com as Equações 3.16, 3.17 e 3.18, L_x e L_y variam de formas opostas em função de θ . Para os valores de θ considerados, a variação dos valores de L_x com o valor deste parâmetro é mais pronunciada do que os valores de L_y , resultando num aumento do valor da espessura equivalente.

Na Figura 3.69 é considerada a influência da imposição da restrição de não intersecção em E_R para diferentes valores de θ usando condições semelhantes às da Figura 3.68, com excepção do tipo de distribuição, em que se considerou $\sigma_D = 0.40$ e $\sigma_d = 0.50$. Apesar do comportamento qualitativo de E_R em função de N_y ser distinto do da Figura 3.68, a disposição das curvas em função de θ é similar, o que permite concluir que, nas condições usadas para gerar as redes, este parâmetro influencia essencialmente as características macroscópicas da rede.

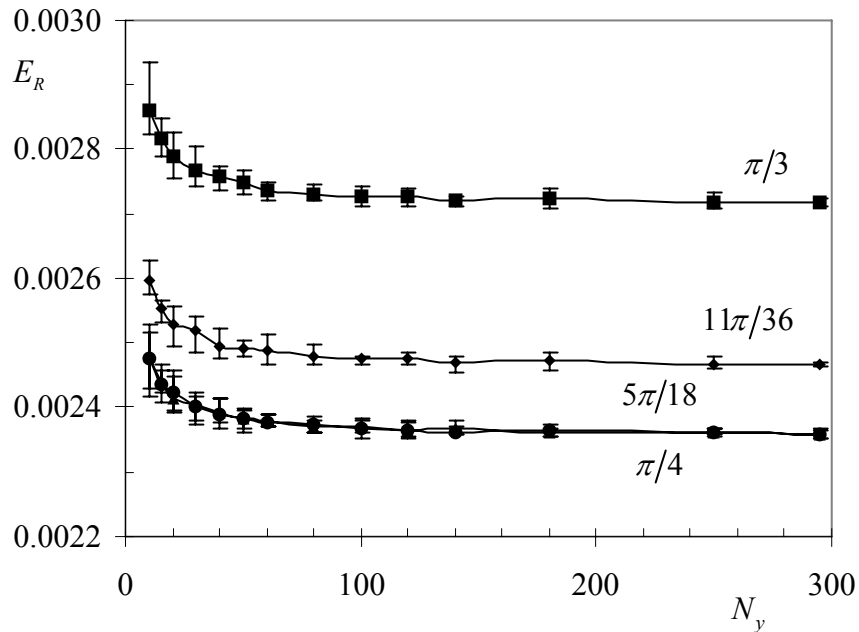


Figura 3.69 Comparação dos valores previstos de E_R em função de N_y para redes tipo 10, $N_x = 200$, e quatro valores de θ , considerando a restrição de não-intersecção.

Dos diferentes aspectos estudados anteriormente, apenas o tipo de fronteiras da rede influencia a estrutura geométrica da rede ao nível local. Os resultados apresentados na Figura 3.66 mostram que os efeitos deste parâmetro são significativos para redes com um número baixo de elementos.

Na Secção 3.4.4 descreveu-se uma estratégia para alterar o número de coordenação das câmaras da rede, através da remoção aleatória de câmaras e/ou canais. Em qualquer das três situações este procedimento vai tornar a rede mais irregular do ponto de vista geométrico, o que poderá ser significativo na descrição dos fenómenos de transporte na rede.

Na Figura 3.70 são comparados os valores previstos de E_R em função de N_x para redes com $C = 4$, com e sem remoção de câmaras ou canais. Não foi considerada a remoção simultânea de canais e câmaras, assumindo-se que as conclusões são válidas nessa situação. Foram utilizadas redes com $d/D = 0.5$, $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$, $d_j < D_i$, $l = 0.007$ e $N_y = 100$. Para eliminar o efeito das fronteiras da rede, foram consideradas sempre fronteiras periódicas. Para o caso sem remoção de elementos considerou-se uma rede tipo 10, para os casos com remoção de canais ou câmaras uma rede tipo 11.

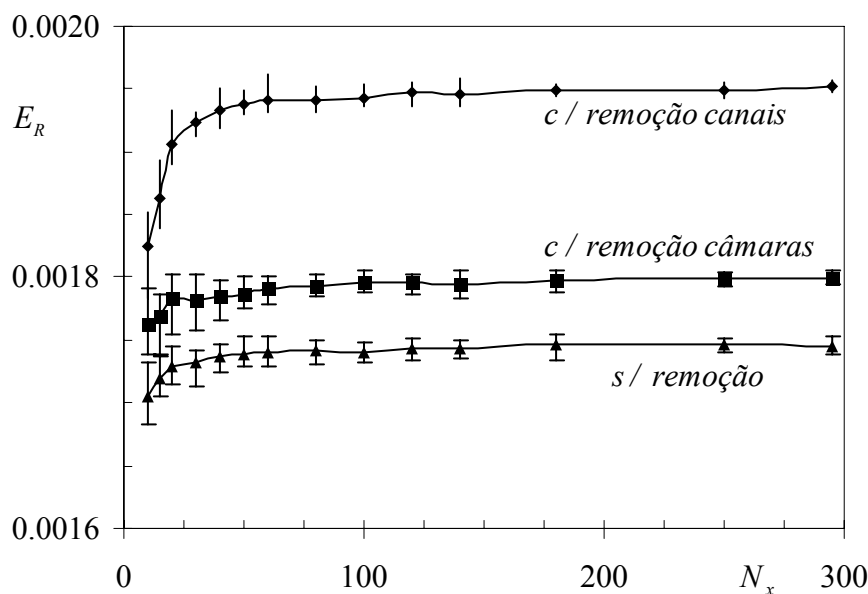


Figura 3.70 Comparação dos valores previstos de E_R em função de N_x com $N_y = 100$, para redes com $C = 4$, com e sem remoção de canais e/ou câmaras.

Comparando as três curvas apresentadas na Figura 3.70, é possível observar diferenças significativas. Em relação ao caso sem remoção, observa-se que E_R aumenta em qualquer dos tipos, resultado da redução do volume de vazios devido ao procedimento de remoção implementado. Este efeito pode ser devido aos diferentes tipos de redes de partida considerados para os casos sem e com remoção de elementos, em particular na existência ou não de canais horizontais.

No entanto, observa-se que a diferença entre os diferentes casos é sempre mais baixa daquela que é observada quando as redes são regulares. Como as dimensões macroscópicas da rede não variam, visto os valores de N_x , N_y , l e ε serem fixados, E_R reflecte o diferente número dos vários tipos de elementos e de estruturas da rede. Este aspecto é particularmente visível comparando os casos com remoção de canais ou com remoção de câmaras, em que os resultados obtidos com remoção de canais mostram que a estrutura da rede é mais próxima da rede tipo 11 original. Em particular, quando são removidas câmaras, como estas possuem um volume mais elevado, a variação de volume é mais marcada, resultando em variações mais acentuadas em E_R . Na Figura 3.71 são comparados os valores da espessura equivalente em função de N_x com $N_y = 100$ para três valores de C : 6 usando uma rede tipo 11, 5 usando uma rede tipo 11 e com remoção apenas de canais; e 4 usando uma rede tipo 10. O segundo valor foi obtido através da remoção aleatória apenas de canais. Foram consideradas redes com $d/D = 0.5$, $C = 4$, $N_y = 100$, $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$, tendo-se usado apenas a restrição $d_j < D_i$. Observa-se que o valor diminui com o aumento de C , de acordo com os resultados anteriores, não se observando no entanto uma variação linear. Este comportamento pode ser devido à existência de canais horizontais e oblíquos para a rede com $C = 5$, enquanto a rede com $C = 4$, apenas possui canais oblíquos.

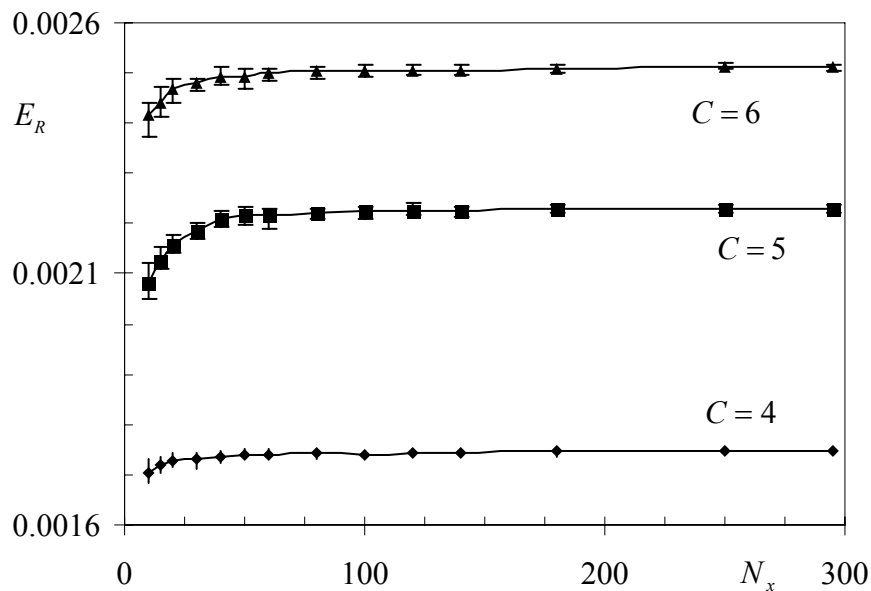


Figura 3.71 Comparação dos valores previstos de E_R em função de N_x com $N_y = 100$, para três valores de C , sem e com remoção de canais.

Como os dois tipos de canais possuem volumes diferentes, sendo superior para os horizontais, a existência deste tipo de canais na rede com $C = 5$ resulta numa variação mais acentuada no volume de vazios e consequentemente em E_R . Os resultados obtidos mostram que além da estrutura geométrica o tipo e o número dos diferentes elementos da rede também deve ser tomado em conta na caracterização da rede.

3.7.1.3 Inclusão das Calotes

As calotes originadas pela entrada dos canais nas câmaras influenciam o valor do volume de vazios associado à rede de duas formas distintas. A primeira é directa e consiste na contabilização do volume comum às câmaras e aos canais da rede. A segunda está relacionada com a determinação da distribuição dos comprimentos dos canais, em que a contabilização ou não do comprimento das calotes pode resultar em valores diferentes de l_j , sendo este aspecto analisado na Secção 3.8.2. Na Figura 3.72 e na Figura 3.73 são apresentados os valores previstos de E_R para redes tipo 10 e 11, com ou sem a inclusão de calotes. São consideradas redes com distribuições pontuais com $d/D = 0.75$, de modo a realçar a influência das calotes. A inclusão do volume associado às calotes na determinação da espessura equivalente da rede resulta, de acordo com a Equação 3.12, em valores mais baixos de E_R , como se pode observar na Figura 3.72.

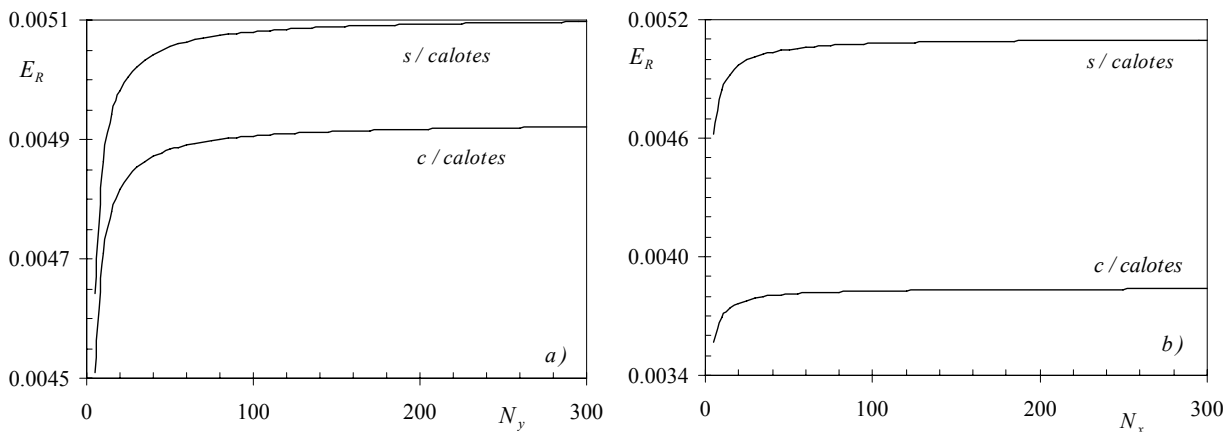


Figura 3.72 Comparação dos valores previstos de E_R para redes com e sem a inclusão das calotes usando distribuições pontuais para redes tipo 11, em função de: a) N_y para $N_x = 200$; b) N_x para $N_y = 200$.

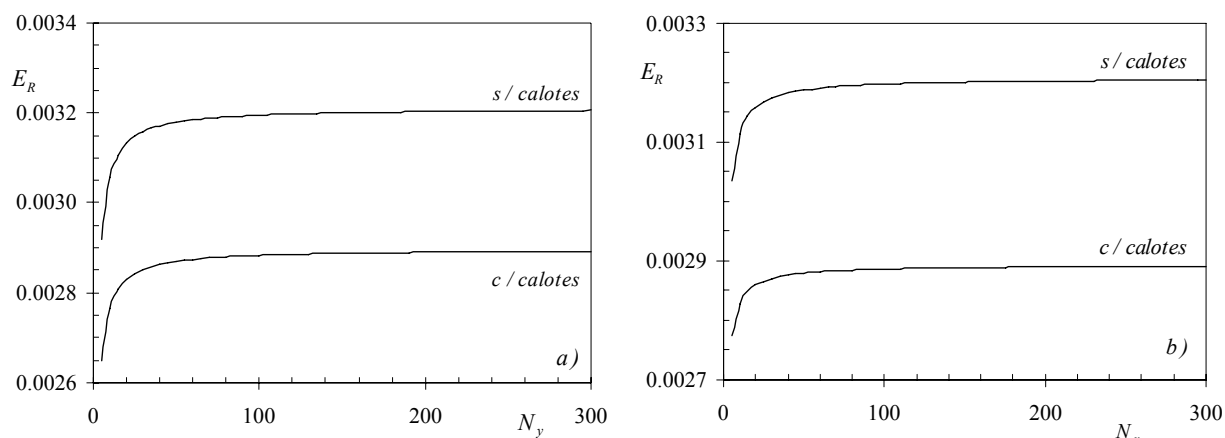


Figura 3.73 Comparação dos valores previstos de E_R para redes com e sem a inclusão das calotes usando distribuições pontuais para redes tipo 10, em função de: a) N_y para $N_x = 200$; b) N_x para $N_y = 200$.

Na Figura 3.74 são comparados os valores previstos de E_R com e sem a inclusão de calotes usando redes tipo 11 (para realçar as diferenças provocadas pela inclusão ou não de calotes), para $d/D = 0.50$, $\sigma_D = 0.40$ e $\sigma_d = 0.50$. Observa-se que a diferença entre os valores da espessura equivalente da rede se reduz, de acordo com as conclusões anteriores.

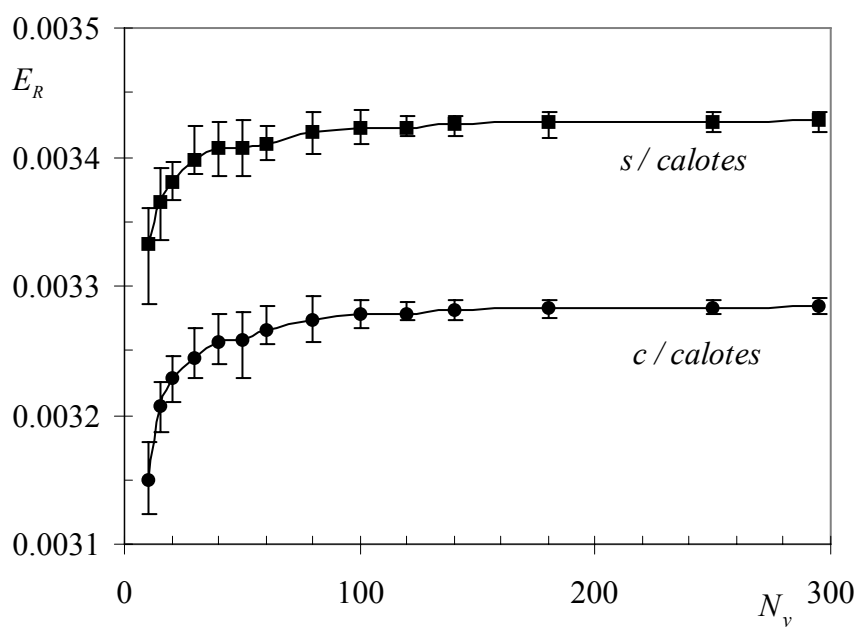


Figura 3.74 Comparação dos valores previstos de E_R para redes com e sem a inclusão das calotes usando distribuições não pontuais em função de N_y para $N_x = 200$.

A variabilidade dos resultados está de acordo com os resultados apresentados anteriormente, concluindo-se deste modo que a inclusão das calotes não é um factor importante nas condições que asseguram que as redes geradas são estatisticamente significativas.

3.7.2 Influência dos Parâmetros Estatísticos da Rede

Os parâmetros estatísticos mais influentes na geração da rede são a razão entre os valores médios das funções densidade de probabilidade, d/D , e os valores dos desvios padrão. A influência destes parâmetros depende também das restrições impostas entre os valores de D_i e d_j ao nível local, pelo que a influência deve ser considerada simultaneamente.

3.7.2.1 Desvio Padrão

Nesta secção é analisada a influência dos valores dos desvios padrão das distribuições de valores de D_i e d_j , σ_D e σ_d respectivamente. Quando maior o valor deste parâmetro, maior será a dispersão dos valores em torno do valor médio sendo de esperar que seja necessário um maior número de elementos para que os resultados obtidos pelo gerador da rede possam ser considerados estatisticamente significativos. Como são definidas duas distribuições distintas no gerador da rede, cada uma destas deve ser analisada independentemente.

Os resultados obtidos nas secções anteriores permitem concluir que os critérios de significância dos resultados obtidos pelo gerador devem ser válidos para valores de σ_D e σ_d elevados. De modo a verificar estas conclusões, são comparados na Figura 3.75 valores de E_R em função de N_y , para $N_x = 100$, para as mesmas condições consideradas na Figura 3.62, usando diferentes conjuntos de valores dos desvio padrão. Observa-se que os critérios propostos são adequados, mesmo para valores de desvio padrão elevados. Na Figura 3.75 são apresentadas também as previsões obtidas nas mesmas condições para distribuições pontuais, observando-se que estas são de facto adequadas quando os valores de σ_D e σ_d são baixos. As curvas de E_R mostram também a influência dos valores do desvio padrão. O aumento dos valores de σ_D e σ_d implica a existência de maior número de câmaras e canais com um diâmetro superior à média, o que resulta num volume de vazios superior. Como os restantes parâmetros da Equação 3.12 se mantêm constantes, E_R deve aumentar para compensar o aumento do volume de vazios, como se observa na Figura 3.75. Observa-se também que a

influência de σ_D é mais pronunciada, resultado da restrição $d_j < D_i$, obtendo-se alterações mais acentuadas do volume de vazios com variações nos valores de D_i do que d_j .

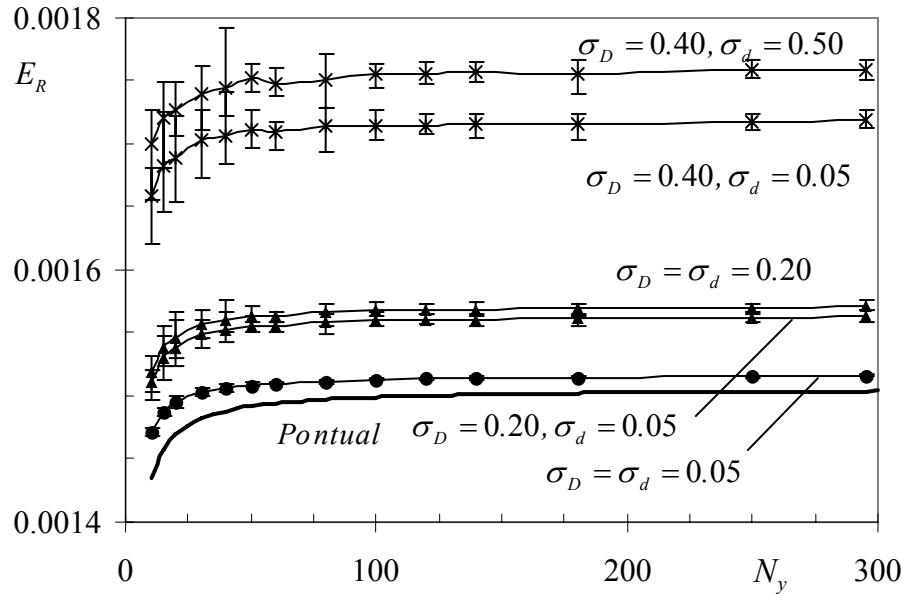


Figura 3.75 Comparação das curvas de E_R em função de N_y para diferentes conjuntos de valores dos desvios padrão, para as mesmas condições dos resultados apresentados na Figura 3.62.

Na Figura 3.76 são comparados valores de E_R em função de N_y usando os critérios de não intersecção, para $N_x = 100$, $d/D = 0.50$, e os mesmos conjuntos de valores do desvio padrão considerados anteriormente. Comparando os resultados obtidos com os apresentados nas secções anteriores, é possível concluir que os critérios propostos atrás são válidos. O comportamento qualitativo das curvas é distinto do observado na Figura 3.75. Em particular, não é possível tirar conclusões sobre qual dos parâmetros σ_D e σ_d é mais significativo. Por outro lado, observam-se diferenças apreciáveis entre distribuições pontuais e não pontuais, o que é atribuível às alterações nas distribuições de tamanhos dos elementos necessárias para se verificarem os critérios de não intersecção.

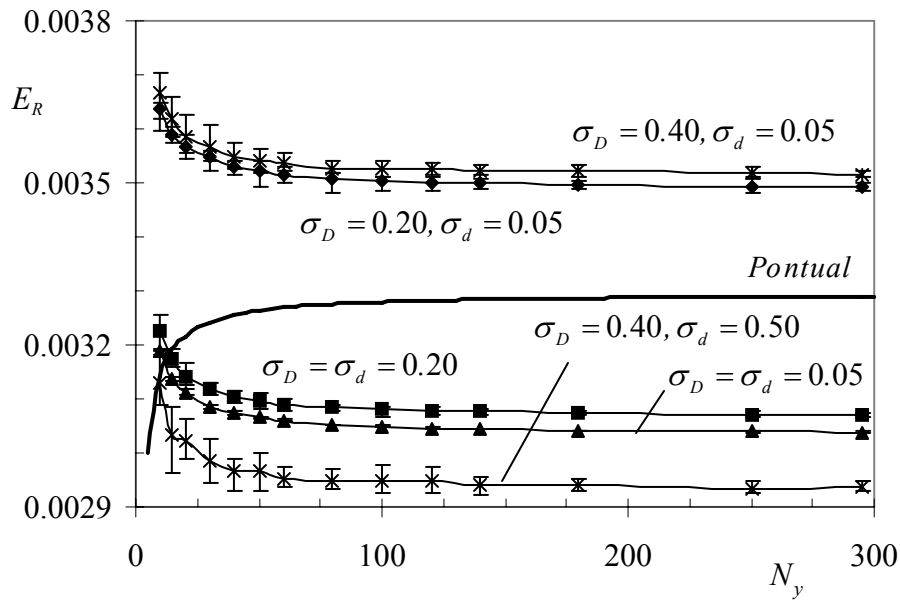


Figura 3.76 Comparação das curvas de E_R em função de N_y para diferentes conjuntos de valores dos desvios padrão, usando a restrição de não intersecção, para rede tipo 11.

3.7.2.2 Razão Entre os Diâmetros Médios das Câmaras e Canais

Outro parâmetro estatístico importante é a razão entre os valores médios dos diâmetros das câmaras e dos canais, dependendo a sua influência do tipo de restrições imposta entre os valores de D_i e d_j ao nível local.

Na Figura 3.77 são comparadas as curvas de E_R em função de N_y para três valores de d/D , usando a restrição $d_j < D_i$, para redes tipo 11, com $\sigma_D = 0.40$ e $\sigma_d = 0.50$. A influência das calotes não é tomada em conta na Figura 3.77a, sendo incluída na Figura 3.77b. Observa-se o mesmo comportamento qualitativo independentemente da inclusão das calotes ou não, estando de acordo com o observado na Figura 3.74. Observa-se que quanto maior o valor da razão d/D , maiores são os valores de E_R . O aumento de d/D apenas é possível pelo aumento de d , visto que D se mantém constante. Como os restantes parâmetros são fixados, o aumento do volume dos vazios devido ao aumento de d resulta em E_R maiores, de acordo com a Equação 3.12. Apesar de poderem ocorrer alterações nas distribuições $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ durante a verificação da condição d/D , estas não são significativas, tendo-se verificado nas simulações que as distribuições inicial e final são praticamente idênticas.

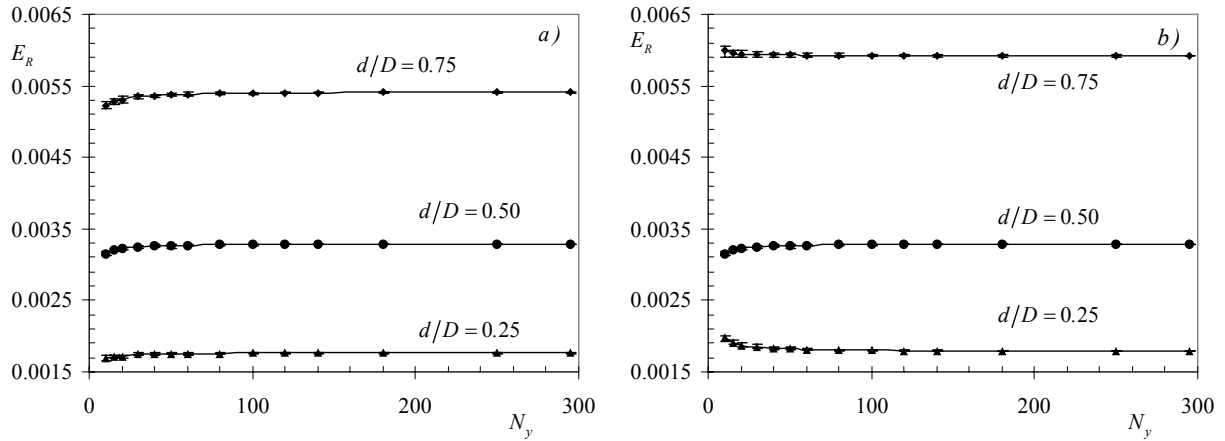


Figura 3.77 Comparação das curvas de E_R em função de N_y para três valores de d/D , usando a restrição $d_j < D_i$, para redes tipo 11 para: a) desprezando as calotes; b) incluindo as calotes.

No entanto, quando se aplicam as condições de não intersecção, é possível que as alterações que é necessário efectuar em $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ sejam mais pronunciadas. Na Figura 3.78 são apresentadas as curvas de E_R em função de N_y para as mesmas condições da Figura 3.77 mas considerando as condições de não intersecção. Observa-se um comportamento qualitativo similar ao da Figura 3.77, mas, com diferenças no distanciamento entre as diferentes curvas.

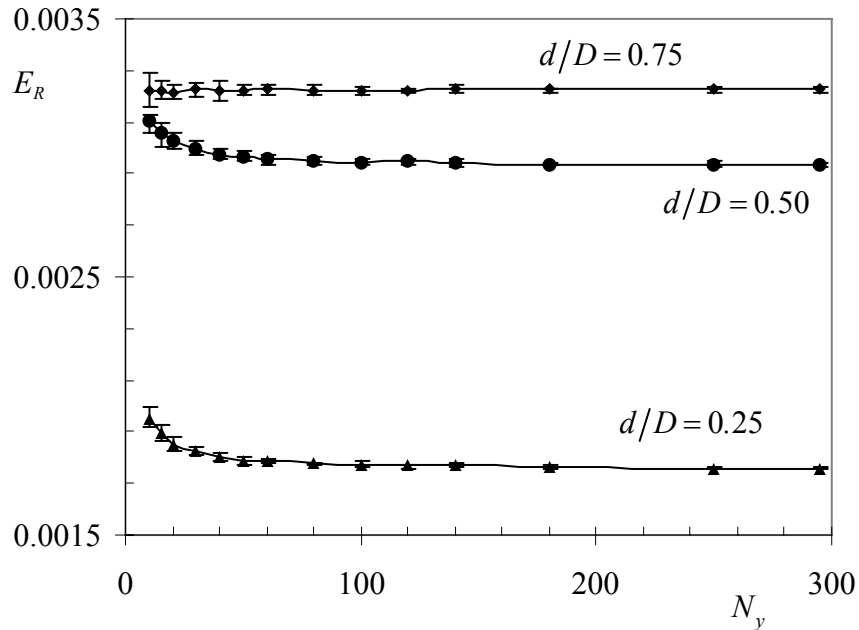


Figura 3.78 Comparação das curvas de E_R em função de N_y para três valores de d/D , usando a restrição de não intersecção, para redes tipo 11.

Entre $d/D = 0.25$ e $d/D = 0.50$ a variação é mais pronunciada do que a variação entre $d/D = 0.50$ e $d/D = 0.75$. Este comportamento pode ser atribuído às alterações que é necessário impor em $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$. Entre $d/D = 0.25$ e $d/D = 0.50$, a verificação exige a modificação de muitos valores de D_i e d_i para a verificação dos critérios. Ao passar para $d/D = 0.75$, o número de alterações aumenta mais devagar, não se observando deste modo uma variação tão acentuada em E_R .

3.8 Análise das Distribuições das Dimensões dos Elementos da Rede

A aplicação das restrições entre os diâmetros das câmaras e dos canais ao nível local pode implicar, como se descreveu na Secção 3.4.3, a determinação de mais do que um D_i ou d_j . Dos dois tipos de restrições implementadas, a mais restritiva é a de não intersecção dos canais à entrada de uma câmara. O algoritmo implementado altera preferencialmente a distribuição de valores de d_j , através do cálculo de novos valores recorrendo à função densidade de probabilidade definida no gerador da rede. A determinação de novos valores de D_i pode ser efectuada da mesma forma, mas, no caso de se estar a calcular um número excessivo de valores, um valor de D_i que verifica os critérios é determinado analiticamente. Esta situação implica a obtenção de distribuições das dimensões características finais diferentes das impostas inicialmente ao gerador da rede. Nas secções seguintes será analisada a influência dos diferentes parâmetros geométricos e estatísticos nas alterações resultantes da verificação das restrições entre os valores de D_i e d_j ao nível local.

Todas as simulações apresentadas foram obtidas para redes 200×200 . As distribuições das dimensões características dos elementos da rede são apresentadas na forma de histogramas, tendo-se definido quarenta classes baseadas em amostras de 50000 elementos, obtidas aleatoriamente das dimensões características dos elementos da rede. Para simplificar a comparação entre distribuições finais e iniciais, as curvas correspondentes às distribuições definidas nos dados introduzidos no computador são representadas a tracejado sempre que necessário, excepto quando a informação disponível na figura foi suficiente.

3.8.1 Distribuições de Diâmetros

3.8.1.1 Influência das Condições Impostas na Estrutura Local da Rede

As distribuições dos diâmetros das câmaras e dos canais são independentes das hipóteses impostas para as calotes. Apenas na determinação dos parâmetros geométricos ao nível global da rede (ver Secção 3.7.1) e na distribuição de comprimentos dos canais é que estas podem ser significativas (ver Secções 3.4.5 e 3.8.2). Deste modo, a atribuição dos valores de d_j é feita independentemente da posição relativa dos canais na rede, sendo necessário conhecer apenas os valores de D_i nos seus extremos. A distribuição de valores de d_j depende da existência ou não de canais horizontais, da remoção de câmaras e/ou canais e da aplicação das restrições entre os valores de D_i e d_j ao nível local. A influência do tipo de fronteiras da rede não é significativa como se conclui na Secção 3.7.1.2.

Na Figura 3.79 são comparadas as distribuições de valores de d_j para redes com e sem fronteiras periódicas, usando apenas a restrição $d_j < D_i$. Foram consideradas redes tipo 10 e 11, com canais horizontais e fronteiras periódicas $d/D = 0.75$. Foram utilizadas distribuições iniciais com desvios padrão elevados, $\sigma_D = 0.40$ e $\sigma_d = 0.50$, de modo a aumentar a possibilidade de não se verificar o critério $d_j < D_i$ e ocorrerem alterações nos valores dos diâmetros das câmaras e dos canais. Verifica-se que as distribuições finais sofrem modificações significativas, relativamente às iniciais deslocando-se para valores mais baixos de d_j . Como o algoritmo procura verificar os critérios entre os valores de D_i e d_j determinando valores mais baixos de d_j , este comportamento era esperado. Como as distribuições consideradas possuem uma zona comum, como se pode observar na Figura 3.61, ao atribuir os diâmetros aos canais o critério $d_j < D_i$ pode não se verificar localmente. Novos valores de d_j são determinados até que o critério $d_j < D_i$ seja verificado, através da função densidade de probabilidade ou por cálculo directo. As diferenças entre as duas distribuições finais para cada um dos tipos de rede não são significativas, demonstrando que a influência do tipo de fronteiras não é significativo.

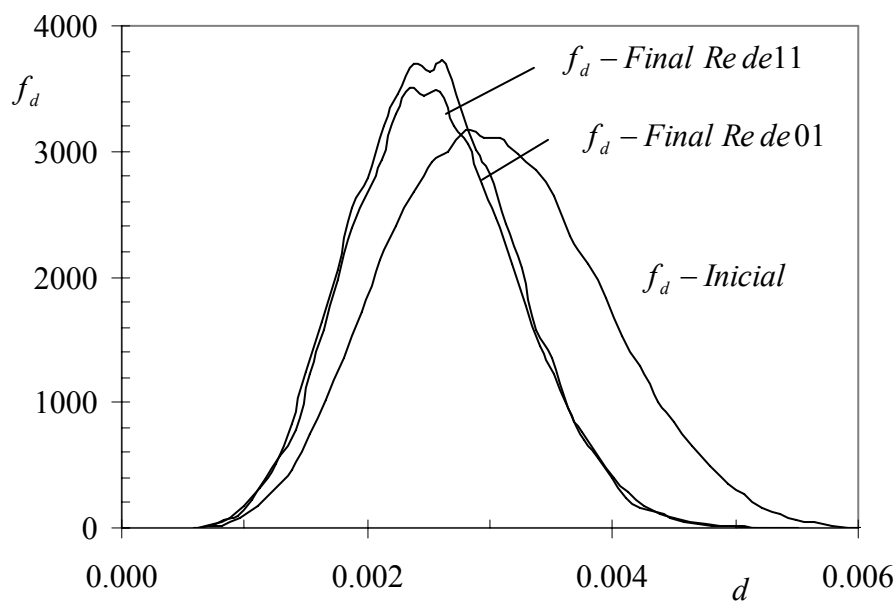


Figura 3.79 Comparação das distribuições de diâmetros dos canais para redes tipo 10 e 11 quando se assume apenas a restrição $d_j < D_i$ ao nível local.

Na Figura 3.80 é analisada a influência da existência ou não de canais horizontais na rede, para a restrição $d_j < D_i$. Foram consideradas redes tipo 10 e 11, tendo-se usado $d/D = 0.75$ com $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$. Observa-se que as distribuições finais são idênticas, o que comprova que a existência ou não de canais horizontais não é significativa nestas condições.

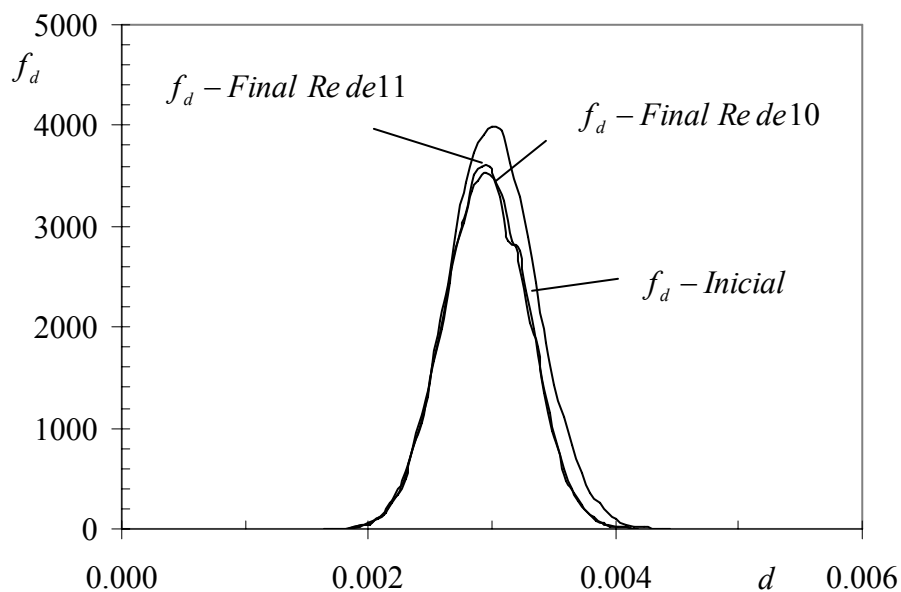


Figura 3.80 Comparação das distribuições de diâmetros dos canais redes tipo 10 e 11, para a restrição $d_j < D_i$.

Comparando as alterações das distribuições com as da Figura 3.79, observa-se que o aumento dos valores de σ_D e de σ_d resulta em alterações mais pronunciadas das distribuições de valores de D_i e d_j , situação esperada devido à menor zona de intersecção entre as funções densidade de probabilidade, como se pode observar na Figura 3.61.

No entanto, quando se considera a restrição de não intersecção a existência ou não de canais horizontais pode ser significativa. Em particular, o algoritmo pode também modificar a distribuição de valores de D_i . Na Figura 3.81 e na Figura 3.82 são comparadas as distribuições das câmaras e dos canais para rede do tipo 10, para os dois tipos de restrição entre os valores de D_i e d_j entre si, tendo-se usado $d/D = 0.75$, com $\sigma_D = 0.40$ e $\sigma_d = 0.50$. De acordo com o algoritmo proposto, as distribuições de valores de D_i e d_j deslocam-se em sentidos contrários, de acordo com as hipóteses impostas no gerador da rede. Quando é usada apenas a restrição $d_j < D_i$, apenas a distribuição de valores de d_j é que é modificada, visto que nesta situação apenas novos valores de d_j é que são determinados para verificar o critério (ver Secção 3.4.3).

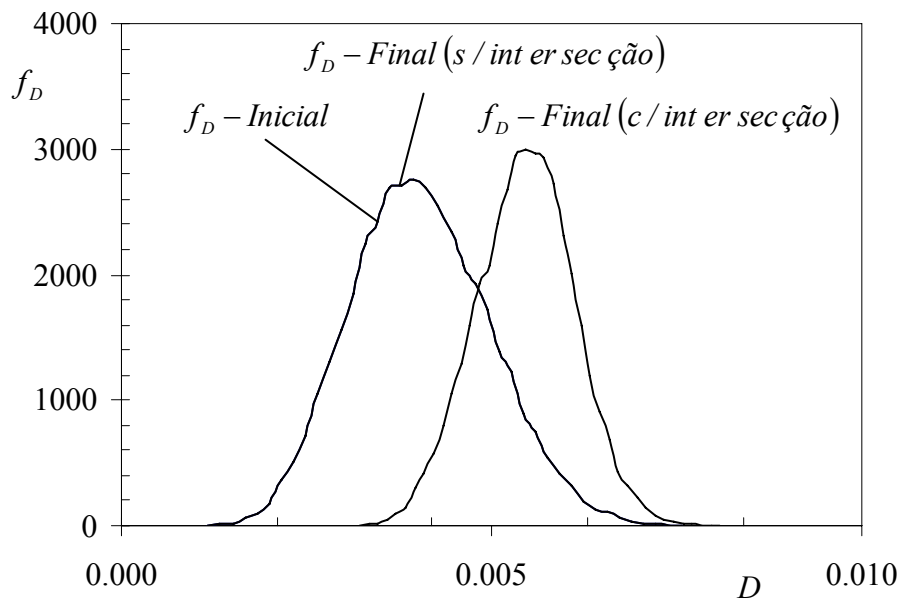


Figura 3.81 Comparação entre as distribuições iniciais e finais do diâmetros das câmaras para as duas restrições entre os valores de D_i e d_j para redes tipo 10 e $d/D = 0.75$.

As tendências observadas são o resultado da tentativa de verificar os critérios pela determinação de valores mais baixos de d_j e de valores mais elevados de D_i , em especial para este parâmetro através do cálculo directo do diâmetro da câmara que verifica o critério de não intersecção. Como o critério de não intersecção é mais restritivo, as alterações em $f_d(d_j)$ nessa situação são mais acentuadas, como se pode observar na Figura 3.82.

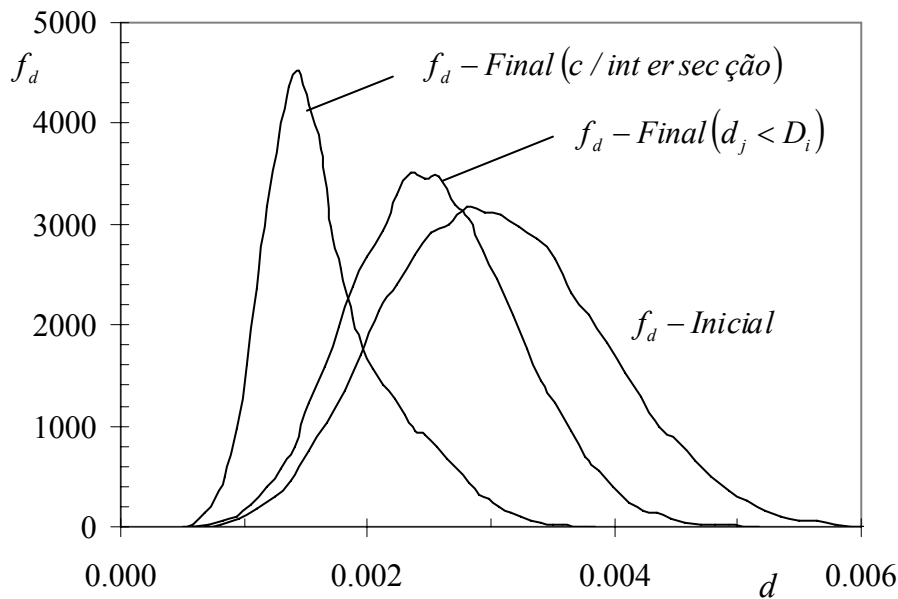


Figura 3.82 Comparação das distribuições iniciais e finais do diâmetros dos canais para as duas restrições entre os valores de D_i e d_j .

A presença ou não de canais horizontais na rede é mais significativa quando se considera a restrição de não intersecção à entrada dos canais. Este aspecto deve ser considerado simultaneamente com o valor do ângulo θ , visto que os critérios dominantes podem variar conforme o valor deste parâmetro. Na Figura 3.83 são comparadas as distribuições de valores de D_i e d_j para redes tipo 10 e 11, tendo-se usado $d/D = 0.75$, com $\sigma_D = 0.40$ e $\sigma_d = 0.50$. Observa-se que para a rede tipo 10, que não possui canais horizontais, as alterações na distribuição de valores de D_i são menos acentuadas, indicando que os critérios são de verificação mais simples. De acordo com as expressões apresentadas na Secção 3.4.3, para redes sem canais horizontais os critérios de não intersecção não são tão fortes como no caso de redes com canais horizontais. Estas conclusões são confirmadas comparando as distribuições dos diâmetros dos canais, em que se observam mais alterações da distribuição inicial para a rede tipo 11, revelando maior dificuldade na verificação dos critérios de não intersecção.

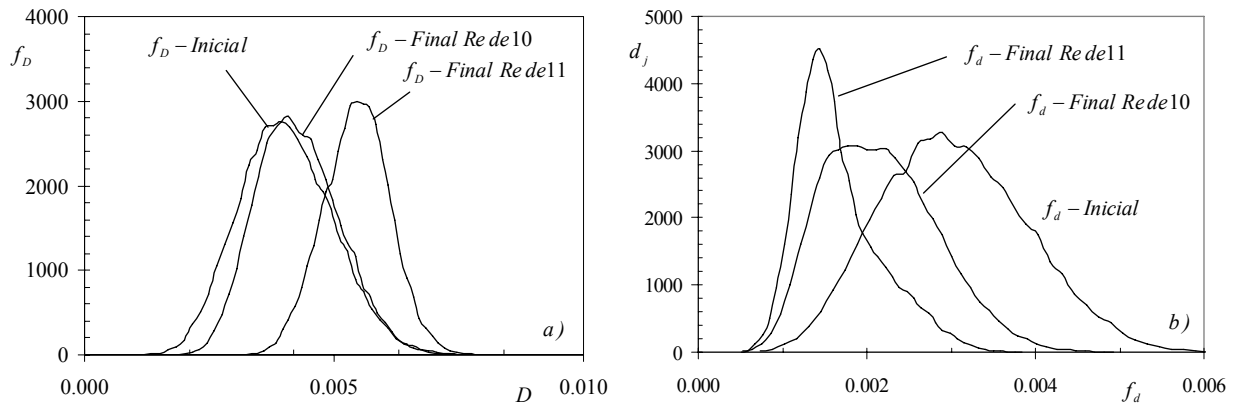


Figura 3.83 Comparação das distribuições iniciais e finais do diâmetros das câmaras e dos canais quando são usadas as restrições de não intersecção: a) $f_D(D_i)$; b) $f_d(d_j)$.

Na Figura 3.84 e na Figura 3.85 são comparadas as curvas de $f_D(D_j)$ e $f_d(d_j)$ para dois valores de θ : $\pi/4$ e $\pi/3$. Estes valores foram seleccionados com base nas restrições determinadas na Secção 3.4.8 entre os parâmetros geométricos da rede e a gama de valores de θ previstos a partir da analogia entre a tortuosidade e a estrutura da rede (ver Secção 3.5.5). Observa-se um comportamento distinto dos dois tipos de redes (com ou sem canais horizontais) em função de θ . Para a rede tipo 11 observam-se comportamentos diferentes entre as distribuições de valores de D_i e de d_j .

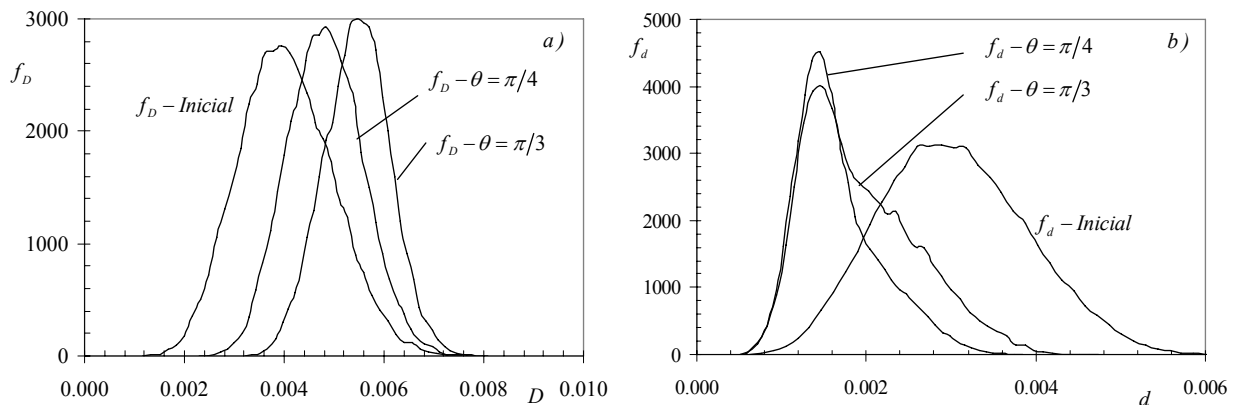


Figura 3.84 Comparação das distribuições iniciais e finais do diâmetros das câmaras e dos canais para redes tipo 11, quando se utiliza a restrição de não intersecção dos canais à entrada de uma câmara, para dois valores de θ a) $f_D(D_j)$, b) $f_d(d_j)$.

As distribuições de diâmetros dos canais finais são qualitativamente similares, embora se observe uma maior cauda para $\theta = \pi/3$. A distribuição de valores de D_i desloca-se

claramente para valores mais elevados. Entre $\theta = \pi/3$ e $\theta = \pi/4$, de acordo com as conclusões da Secção 3.4.8.1, os critérios de não intersecção dominantes são os associados à entrada de um canal horizontal e um dos oblíquos pelo mesmo lado da rede. Como estes são cada vez mais difíceis de ser verificados quanto maior for θ , é natural que mais valores de D_i sejam calculados analiticamente para $\theta = \pi/3$.

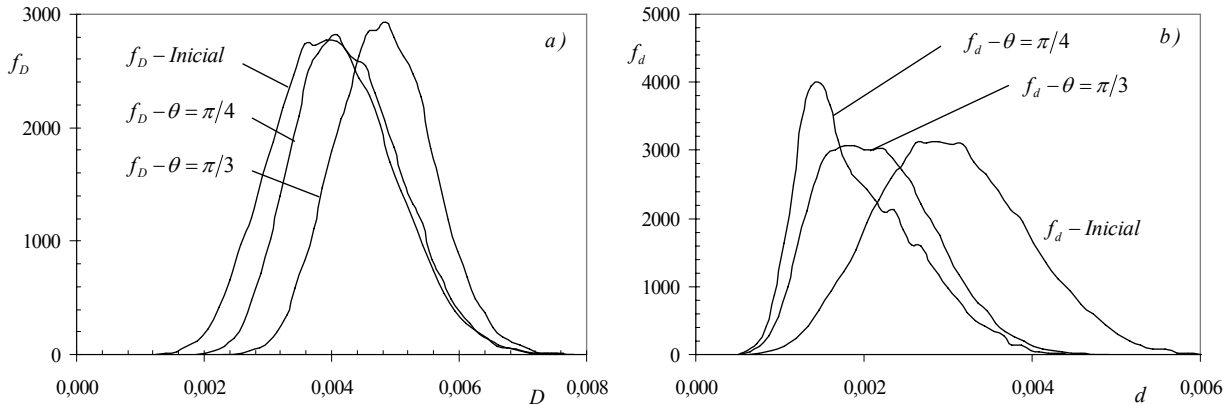


Figura 3.85 Comparação das distribuições iniciais e finais do diâmetros das câmaras e dos canais para redes tipo 11, quando se utiliza a restrição de não intersecção dos canais à entrada de uma câmara, para dois valores de θ a) $f_D(D_j)$, b) $f_d(d_j)$.

Para uma rede tipo 10, observa-se um comportamento distinto em função de θ . Para a função $f_D(D_j)$ observa-se um comportamento similar, mas as alterações da distribuição inicial não são tão acentuadas. Para $\theta = \pi/3$, como os critérios A1 e A2 são equivalentes, as distribuições de valores de D_i são similares, notando-se apenas diferenças na zona de valores baixos. Estas correspondem à necessidade de se calcularem novos valores de D_i quando localmente os critérios de não intersecção não se verificarem devido a valores baixos dos diâmetros das câmaras. Para $\theta = \pi/3$, os critérios dominantes são do tipo A2, sendo necessário calcular maior número de valores de D_i . As distribuições $f_d(d_j)$ possuem o mesmo comportamento já observado na Figura 3.84b, no entanto, como para $\theta = \pi/4$ os critérios de não intersecção A1 e A3 não são tão restritivos como os critérios A2, dominantes para uma rede tipo 11, as alterações não são tão marcadas nessa situação.

Os resultados mostram que as hipóteses consideradas para a estrutura da rede são decisivas para as distribuições das dimensões características da rede, em particular as diferentes restrições impostas entre os diâmetros das câmaras e dos canais associados entre si. Na modelização do escoamento através do meio poroso estes aspectos podem ser significativos.

Mesmo considerando que os parâmetros seleccionados para as redes usadas nesta secção foram escolhidos para realçar os efeitos das características da rede, de acordo com o modelo geométrico, estes podem ser representativos de um meio poroso real, em particular a razão d/D . Na secção seguinte a influência dos parâmetros das funções densidade de probabilidade é analisada em detalhe.

3.8.1.2 Influência dos Parâmetros Estatísticos das Distribuições Iniciais

De acordo com o algoritmo de geração da rede implementado, quando um dos critérios não se verifica procura-se primeiro determinar valores de d_j que verifiquem os critérios entre os diâmetros das câmaras e dos canais, com base na função $f_d(d_j)$ definida no gerador da rede. Apenas quando a restrição de não intersecção é considerada é que a distribuição de valores de D_i pode ser alterada, pois pode ser praticamente impossível verificar os critérios calculando apenas novos valores de d_j . Deste modo, a maior ou menor facilidade de se verificarem as restrições entre os valores de D_i e d_j ao nível local depende das características de $f_d(d_j)$ e $f_D(D_i)$, esta última apenas quando se consideram as restrições de não intersecção.

Como os critérios são diferentes, a influência dos parâmetros estatísticos vai ser naturalmente diferente. Em relação à restrição $d_j < D_i$, os critérios mais importantes deverão ser a razão entre os valores médios e os valores dos desvios padrão das duas distribuições. De acordo com as curvas de $f_d(d_j)$ e $f_D(D_j)$ apresentadas nas Figura 3.60 e Figura 3.61, este tem mais hipóteses de não ser verificado quando mais as curvas das distribuições se sobreponham. A zona de sobreposição aumenta com o aumento da razão d/D e dos desvios padrão das distribuições.

Na secção anterior já se tinha comparado nas Figura 3.79 e Figura 3.80 as alterações nas funções $f_d(d_j)$ em função dos valores de σ_D e σ_d , tendo-se concluído que para valores baixos do desvio padrão as alterações não são significativas. Na Figura 3.86 são comparadas as distribuições de valores de d_j em função de σ_D para $\sigma_d = 0.20$, e σ_d para $\sigma_D = 0.20$. Redes tipo 10 foram consideradas sem tomar em conta a influência das calotes. De notar que nesta situação a função $f_D(D_i)$ não é alterada. Como anteriormente, apenas quando os valores dos desvios padrão são elevados se observam diferenças apreciáveis entre as distribuições iniciais e finais de valores de d_j .

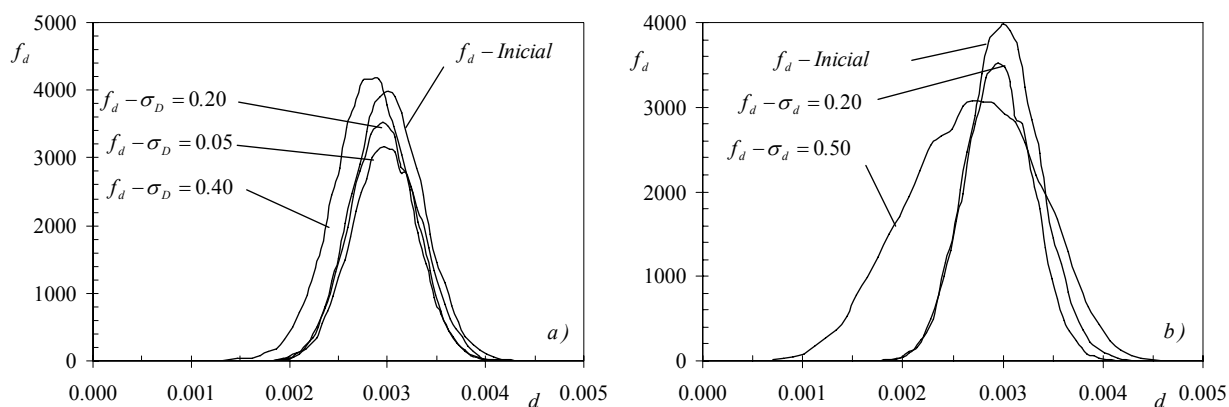


Figura 3.86 Comparação entre as distribuições iniciais e alteradas do diâmetros de canais, considerando apenas a restrição $d_j < D_i$, em função de: a) σ_D para $\sigma_d = 0.20$; b) σ_d para $\sigma_D = 0.20$.

As conclusões obtidas anteriormente para a restrição $d_j < D_i$ são extensíveis ao caso em que os canais não se podem intersectar à entrada de uma câmara. No entanto, além da influência de θ e da existência ou não de canais horizontais, aspectos analisados na secção anterior, há que tomar em conta também a influência das características das distribuições de valores de D_i e d_j . Os resultados obtidos mostram que dependendo das condições impostas ao gerador, não basta determinar valores sucessivamente mais baixos de d_j para as condições serem verificadas. Dependendo do diâmetro do canal associado, o valor máximo de d_j que verifica a condição pode ter uma probabilidade praticamente nula de ser calculado a partir da função densidade de probabilidade. Nesta situação, os valores dos parâmetros estatísticos, e desses os valores dos desvios padrão são importantes, em particular no caso em que for necessário calcular novos valores de D_i recorrendo à função densidade de probabilidade ou analiticamente.

Na Figura 3.87, na Figura 3.88 e na Figura 3.89 são comparadas as distribuições iniciais e finais dos valores de d_j e D_i em função de d/D , para dois valores de θ , usando as restrições de não intersecção. Foram consideradas redes tipo 10, com $\sigma_D = 0.40$ e $\sigma_d = 0.50$. Como os valores da razão d/D são definidos mantendo D constante, variando apenas d , é possível comparar directamente as funções $f_D(D_i)$. Observa-se que o aumento de d/D resulta em maiores alterações da função $f_D(D_i)$ definida inicialmente. De acordo com as expressões do critério de não intersecção apresentadas na Secção 3.4.3, quando mais próximos estiverem os valores médios de $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$, mais valores de D_i é necessário

determinar. Comparando as Figura 3.87 e Figura 3.88 é possível concluir também que as alterações são pouco dependentes do valor de θ .

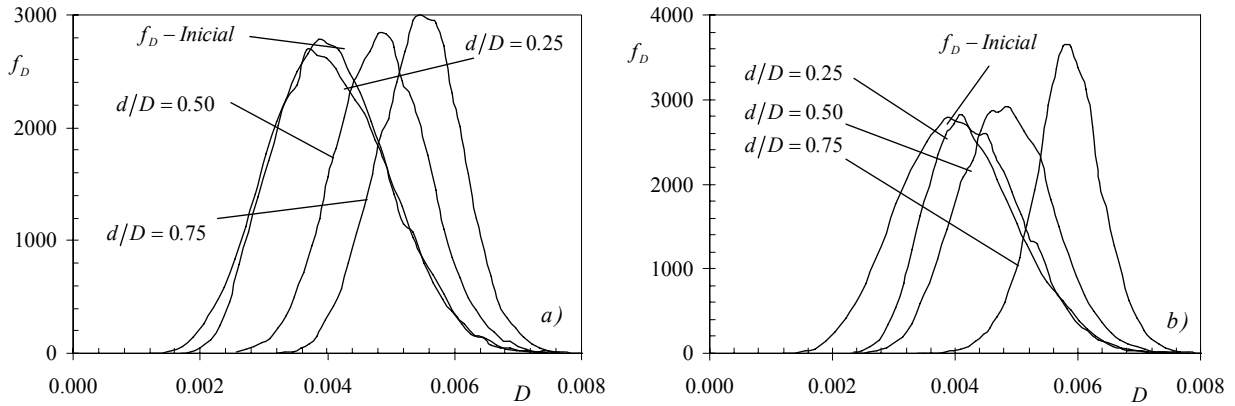


Figura 3.87 Comparação entre as distribuições iniciais e modificadas do diâmetro das câmaras em função de d/D , considerando as restrições de não intersecção, para: a) $\theta = \pi/4$; $\theta = \pi/3$.

As funções $f_d(d_j)$ podem ser comparadas entre si na Figura 3.88 e na Figura 3.89. Nesta última figura, os valores médios deslocam-se para valores mais elevados com o aumento de d/D . Visto ser d o único parâmetro livre, apenas a posição de $f_d(d_j)$ é que se modifica.

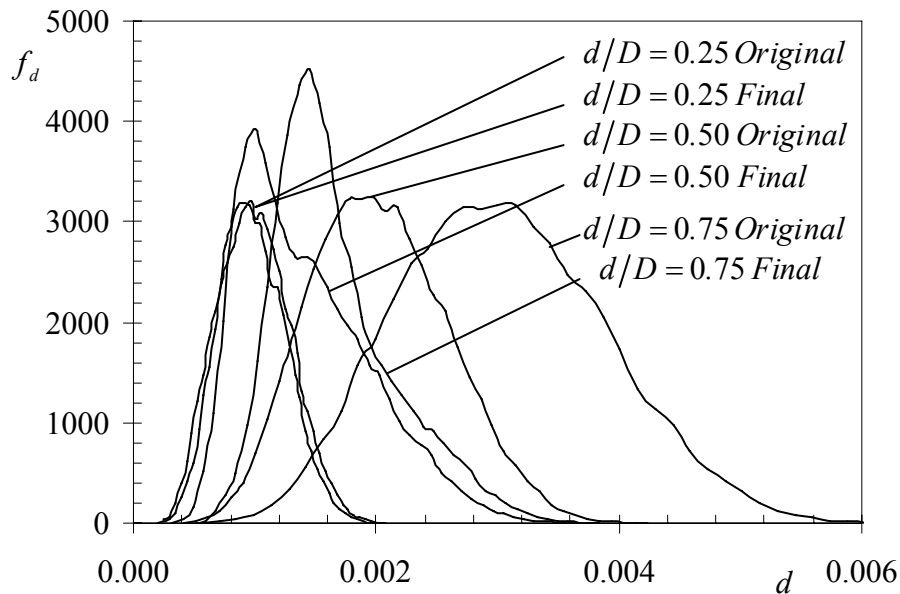


Figura 3.88 Comparação entre as distribuições iniciais e modificadas do diâmetro dos canais em função de d/D , considerando as restrições de não intersecção, para $\theta = \pi/4$.

Comparando as duas figuras observa-se que a influência de θ não é significativa entre as distribuições iniciais e finais do diâmetro dos canais. Nestas condições, foram as alterações

em $f_d(D_i)$ que permitiram nos dois casos a verificação dos critérios de não intersecção. Como os valores de D_i necessários para verificar o critério para $\pi/4$ são menores do que os necessários para $\pi/3$, as alterações da Figura 3.88 são mais pronunciadas.

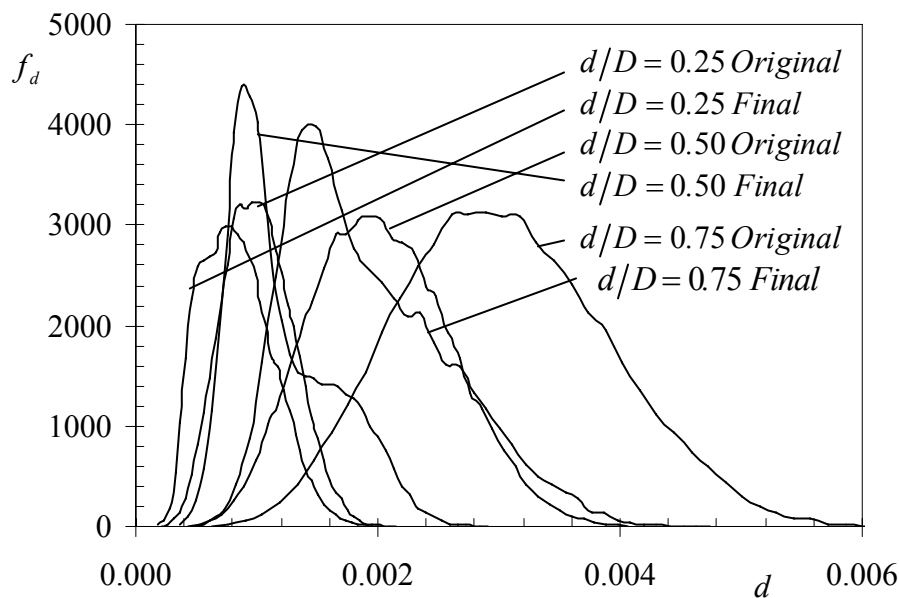


Figura 3.89 Comparação entre as distribuições iniciais e modificadas do diâmetro dos canais em função de d/D , considerando as restrições de não intersecção, para $\theta = \pi/3$.

Contrariamente ao esperado, o tempo necessário para a geração da rede quando se aplicam as restrições de não intersecção dos canais à entrada das câmaras não é proporcional aos valores dos desvios padrão, como no caso em que se considera apenas a restrição $d_j < D_i$. Este comportamento pode ser justificado pela necessidade de, em muitos casos em que as condições de não intersecção não são verificadas, haver a necessidade de se calcularem de novo os dois valores de d_j . Quando as funções densidade de probabilidade possuem valores do desvio padrão baixos e a razão d/D é elevada, muitas vezes apenas é possível verificar as condições determinando analiticamente um valor de D_i .

3.8.2 Distribuições de Comprimentos dos Canais

Comparando as Equações 3.6 e 3.8, observa-se que no caso geral os comprimentos dos canais oblíquos e horizontais são diferentes. Deste modo, a distribuição dos comprimentos dos canais, l_j , é formada por duas partes, correspondendo uma aos canais oblíquos, $l_j|_o$, e a outra

aos canais horizontais, $l_j|_h$. Esta última apenas existe quando se impõe a existência de canais horizontais associados às câmaras da rede. De acordo com o algoritmo proposto para a geração da rede, assume-se apenas o valor do comprimento médio dos canais oblíquos, sendo as distribuições de valores de $l_j|_o$ e de $l_j|_h$ determinadas a partir das distribuições de valores de D_i e de d_j e de θ .

3.8.2.1 Influência da Estrutura da Rede

Os parâmetros da estrutura da rede mais influentes nos valores dos comprimentos dos canais são θ e a inclusão ou não das calotes. Os restantes parâmetros associados à estrutura da rede, como por exemplo as restrições entre os diâmetros das câmaras e dos canais ao nível local não influenciam as distribuições de valores de $l_j|_o$ e $l_j|_h$, visto serem aplicadas antes da determinação das distribuições de comprimentos dos canais. No entanto, como a aplicação destas condições pode resultar em alterações das distribuições de valores de D_i e d_j , a sua influência é estudada em detalhe na Secção 3.8.2.2.

O caso em que as distribuições das câmaras e dos canais é pontual foi analisado na Secção 3.4.8.1, tendo-se concluído que quando $\theta = \pi/6$ os valores médios das distribuições de valores de $l_j|_o$ e $l_j|_h$ são iguais. Como se conclui nas secções anteriores, desde que os desvios padrão das distribuições de diâmetros das câmaras e dos canais sejam pequenos, as conclusões obtidas para distribuições pontuais são extensíveis ao caso geral. Como os valores de θ válidos para a rede se encontram na gama $[\pi/6, \pi/3]$, como se conclui na Secção 3.4.8.2, é esperado que o valor médio do comprimento dos canais horizontais seja normalmente superior ao dos canais oblíquos.

A influência da inclusão ou não das calotes foi analisada na Secção 3.4.8.3. Este parâmetro é função das distribuições das câmaras e dos canais, sendo a influência destas significativa no volume total de vazios da rede quando $d/D > 0.6$. Na Figura 3.90 são apresentadas as distribuições de valores de $l_j|_o$ e $l_j|_h$ para vários valores de θ , em que se compara a influência da inclusão ou não dos comprimentos das calotes, para a restrição $d_j < D_i$. Foram usadas redes 200×200 (redes com estas dimensões foram usadas ao longo desta secção) tipo 11, com $\sigma_D = 0.40$ e $\sigma_d = 0.50$, de modo a realçar a influência dos valores do desvio

padrão. Observa-se que quando maior for θ , maior a distância entre as duas distribuições, de acordo com o comportamento previsto pelas Equações 3.19 e 3.20. A distribuição $f_l(l_j|_o)$ é independente de θ em qualquer dos casos. A influência das calotes faz deslocar as distribuições para valores mais elevados, devido aos dois factores h_{ij} que é necessário tomar em conta nessa situação. No entanto, a forma das distribuições é idêntica. Como as distribuições $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ são independentes de θ , as curvas vão ter as mesmas características, só variando o valor médio de $f_l(l_j|_h)$.

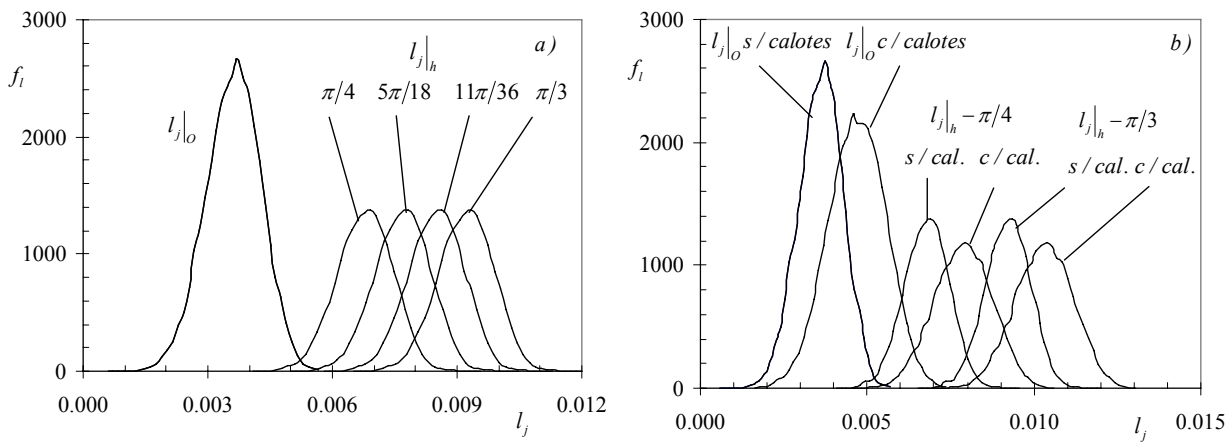


Figura 3.90 Distribuições de $f_l(l_j|_o)$ e $f_l(l_j|_h)$ para vários de θ para redes tipo 11 usando a restrição $d_j < D_i$: a) sem influência das calotes; b) com a influência das calotes.

Os resultados obtidos estão de acordo com os resultados da secção anterior, onde se conclui que as alterações nas distribuições $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ são pouco significativas quando se considera apenas a restrição $d_j < D_i$. Para as restrições de não intersecção, a situação é diferente, podendo agora θ influenciar também a distribuição $f_l(l_j|_o)$. De acordo com os resultados das secções anteriores, a existência ou não de canais horizontais é outro factor que deve ser tomado em conta.

Na Figura 3.91 são comparadas as distribuições $f_l(l_j|_o)$ e $f_l(l_j|_h)$, para os dois tipos de restrições entre os valores de D_i e d_j ao nível local. Foram usadas redes tipo 11 e 10, com $\sigma_D = 0.40$ e $\sigma_d = 0.50$. Como era esperado, para a restrição $d_j < D_i$ as distribuições são idênticas, mas para as restrições de não intersecção observa-se um comportamento dependente da existência ou não de canais horizontais.

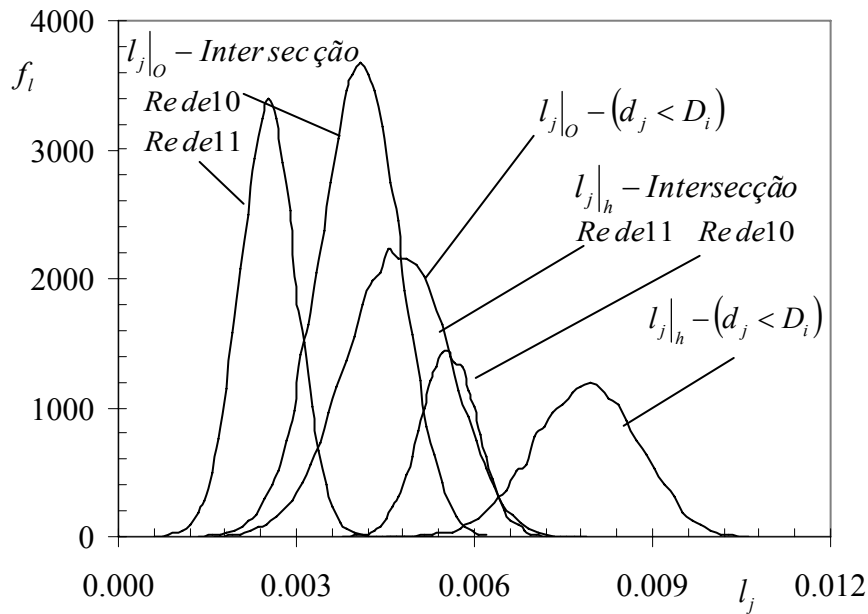


Figura 3.91 Distribuições dos comprimentos dos canais horizontais e oblíquos para diferentes tipos de restrições impostas entre os diâmetros das câmaras e dos canais associados entre si.

Em particular as curvas de $f_l(l_j|_o)$ e $f_l(l_j|_h)$ deslocam-se para valores mais baixos. Como a verificação dos critérios implica a determinação de valores mais elevados de D_i , de acordo com as Equações 3.6 e 3.8, os comprimentos dos canais oblíquos e horizontais diminuem, como se pode observar na Figura 3.91.

3.8.2.2 Influência dos Parâmetros Estatísticos das Distribuições Iniciais

De acordo com os resultados apresentados nas Secções 3.7.1 e 3.8, conclui-se que os parâmetros estatísticos mais significativos são a razão entre os diâmetros médios das câmaras e dos canais e os valores dos desvios padrão das distribuições de valores de D_i e d_j . Como a distribuição dos comprimentos dos canais depende também destas duas distribuições, as funções $f_l(l_j|_o)$ e $f_l(l_j|_h)$ também vão depender destas.

Na Figura 3.92 e na Figura 3.93 são comparadas as distribuições dos comprimentos dos canais oblíquos e horizontais para diferentes valores dos desvios padrão das distribuições $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$, quando se utiliza a restrição $d_j < D_i$. Cada um dos casos apresentados na figura segue a nomenclatura descrita na introdução da Secção 3.7. Foram consideradas redes tipo 11 com a inclusão dos efeitos das calotes. Observa-se que as curvas das distribuições tendem a ser cada vez mais largas quanto mais elevados são os valores do desvio padrão das

distribuições de diâmetros das câmaras, de acordo com a dependência das distribuições de comprimentos nesta. No entanto, as variações não são muito pronunciadas, revelando que as variações nas distribuições de valores de D_i e d_j também não devem ser importantes.

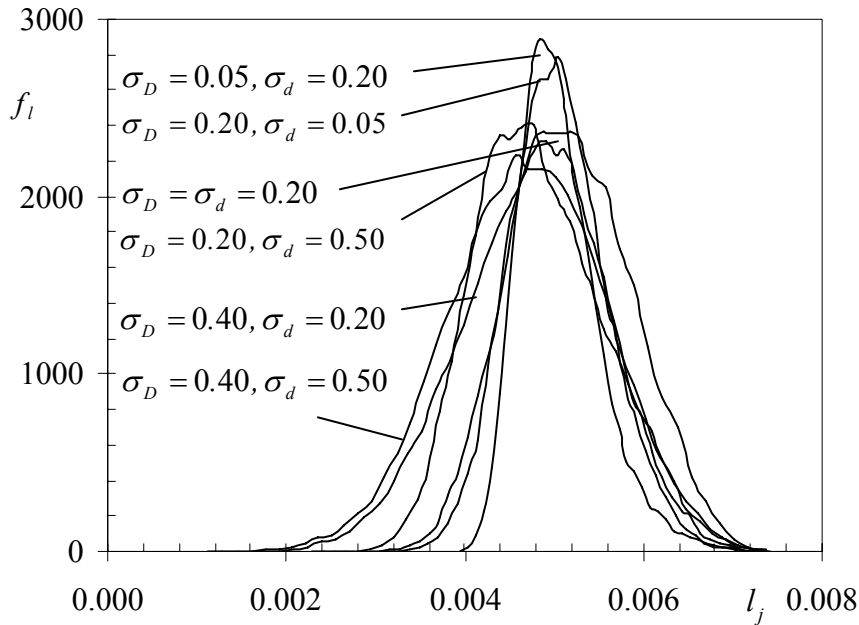


Figura 3.92 Influência dos valores dos desvio padrão das distribuições $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ quando se utiliza a restrição $d_j < D_i$ na distribuição $f_l(l_j|_o)$.

Na Figura 3.94 são comparadas as distribuições de $f_l(l_j|_o)$ quando se aplicam as restrições de não intersecção, para diferentes valores do desvio padrão. Foram consideradas redes tipo 10. Observa-se um comportamento irregular, não sendo possível isolar os efeitos das variações dos desvios padrão de $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ nas distribuições de comprimentos dos canais. As variações nas distribuições dos diâmetros das câmaras e dos canais quando se usam as restrições de não intersecção levam à obtenção de distribuições largas dos valores de l_j , o que se observa apenas quando os valores dos desvio padrão são elevados. Não foram estudadas as distribuições $f_l(l_j|_h)$, mas, sendo o seu cálculo similar aos das distribuições dos comprimentos dos canais oblíquos, é esperado que o seu comportamento seja idêntico ao observado ao das funções $f_l(l_j|_o)$.

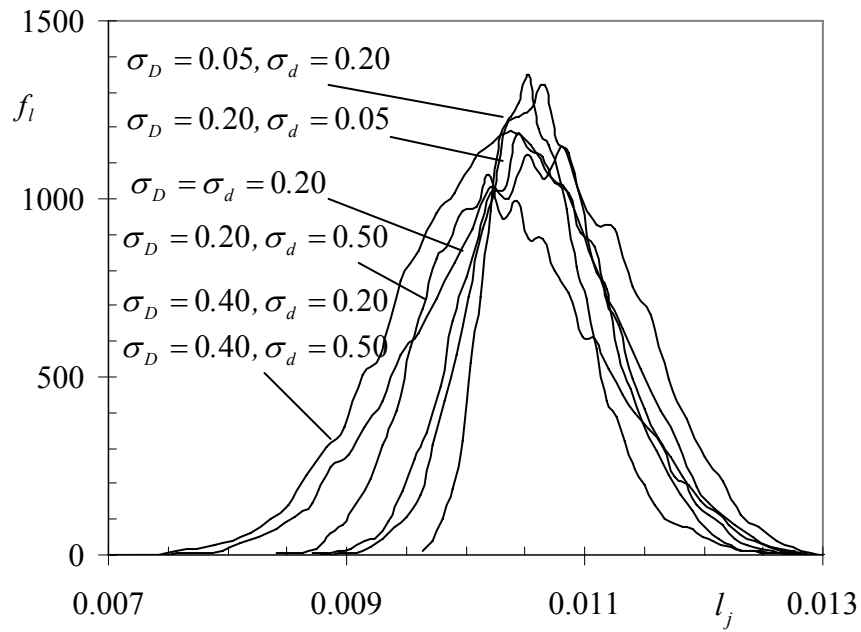


Figura 3.93 Influência dos valores dos desvio padrão das distribuições $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ quando se utiliza a restrição $d_j < D_i$ na distribuição $f_l(l_j|_h)$.

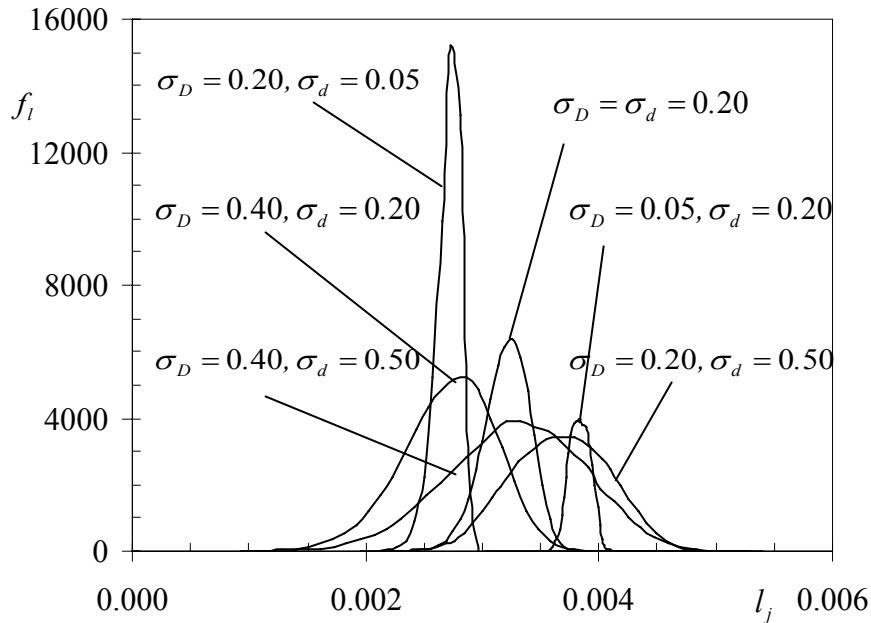


Figura 3.94 Influência dos valores dos desvio padrão das distribuições $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ quando se utilizam as restrições de não intersecção na distribuição $f_l(l_j|_o)$.

3.9 Conclusões

Neste capítulo foi descrito o modelo de redes proposto neste trabalho para descrever a estrutura local de um meio poroso. Cuidado especial foi tomado na descrição das relações entre os elementos da rede e nas restrições que podem ser impostas entre os elementos da

rede. Um modelo geométrico baseado na análise geométrica da estrutura local de leitos de enchimento de esferas iguais possuindo estruturas regulares foi desenvolvido para determinar as distribuições dos diâmetros das câmaras e dos canais. Boa concordância foi obtida entre os valores previstos pelo modelo geométrico e dados experimentais apresentados na literatura, mesmo tomando em conta as diferenças entre os modelos propostos neste trabalho e na literatura.

Na forma actual, o modelo geométrico não permite a determinação dos valores de C nem de θ directamente da análise geométrica dos leitos de enchimento regulares. Por outro lado, de acordo com as hipóteses impostas no modelo geométrico, apenas é possível obter dois valores distintos de D em função da porosidade, o que limita a aplicabilidade deste sobretudo para valores de ε na vizinhança de 0.4. A utilização de outras estratégias de determinação dos valores médios, como por exemplo: a igualdade entre a porosidade e a área interfacial da rede e das células fundamentais dos leitos de enchimento regulares, ou a geração no computador do leito de enchimento; podem ser opções a considerar como trabalho futuro.

A análise de sensibilidade efectuada no gerador revela que os parâmetros macroscópicos que permitem caracterizar a rede são função das condições impostas para a estrutura desta e entre as dimensões características dos elementos que a formam. Em particular, conclui-se que a existência ou não de canais horizontais e as restrições entre os diâmetros das câmaras e dos canais ao nível local são os factores mais importantes. Em relação a este último aspecto, observou-se que, dependendo do tipo de restrição imposta localmente entre os valores de D_i e d_j , pode ser necessário alterar as funções $f_D(D_i)$ e $f_d(d_j)$ inicialmente impostas ao gerador, o que mostra que os valores destas não são independentes mas sim correlacionados entre si (Bryant *et al.*, 1993a e 1996). Como os valores de D_i e d_j previstos pelo modelo geométrico não verificam as restrições de não intersecção na gama de valores de porosidade usualmente encontrados em leitos de enchimento, torna a restrição $d_j < D_i$ a única válida. Por outro lado, esta permite simplificar e acelerar significativamente a geração da rede, em particular quando a rede possui canais horizontais.

Outras estratégias para a determinação da espessura equivalente da rede podem ser consideradas. Particularmente interessante parece ser a hipótese de impor que o valor da área interfacial (entenda-se área de contacto sólido/fluido) entre o meio poroso e a rede seja igual. Em certas situações, como por exemplo quando o escoamento se encontra em regime laminar (controlado pelas forças viscosas) ou na modelização do transporte de massa a influência da

adsorção, transporte de massa ou reacção química nas partículas for significativa, esta estratégia pode ser mais adequada. Neste caso, E_R e l_O devem ser calculados simultaneamente.

A imposição de um valor constante de θ implica que a estrutura da rede é espacialmente regular. Na maior parte dos modelos de redes propostos na literatura foram consideradas estruturas com esta característica (Koplik, 1982; Dias e Payatakes, 1986; Toledo *et al.*, 1992; Thauvin *et al.*, 1998; Wang *et al.*, 1999b). Num meio poroso real é de se esperar que a estrutura real possua uma distribuição de valores de θ . Diferentes estratégias podem ser consideradas para tornar a estrutura geométrica da rede mais irregular, sendo algumas apresentadas na literatura (Constantinides e Payatakes, 1989 e 1996).

No modelo de redes os efeitos de parede apenas foram considerados através da imposição de valores diferentes para o número de coordenação para as câmaras nos lados da rede. Na prática, observa-se que os valores de porosidade na zona próxima da parede são superiores ao valor observado no interior do meio poroso (Stanek, 1992; Liu e Masliyah, 1996). Na forma actual o modelo de redes não toma em conta este aspecto. Alguns autores propuseram algumas estratégias de inclusão destes efeitos em modelos de redes (Chu e Ng, 1989; Avilés e Levan, 1991). De acordo com os resultados obtidos na Secção 3.7.1 para as dimensões da rede que asseguram que os resultados são estatisticamente válidos, é de se esperar que os efeitos de parede sejam desprezáveis.

Nos capítulos seguintes o modelo de redes em conjunto com o modelo geométrico vai ser usado na descrição do escoamento e do transporte de massa num meio poroso. A comparação das previsões do modelo com dados experimentais permitirá obter conclusões mais seguras sobre a validade dos modelos de rede e geométricos propostos neste trabalho.

4. Modelização e Simulação do Escoamento

4.1 Introdução

No capítulo anterior apresentou-se o modelo de redes proposto para descrever a estrutura de um meio poroso. As relações entre os dois tipos de elementos foram tomadas em conta na geração da rede, tendo-se desenvolvido um modelo geométrico que permite a determinação dos parâmetros das distribuições das dimensões características dos seus elementos. Verificou-se boa concordância entre os valores previstos pelo modelo e os valores apresentados na literatura, mesmo tomando em conta as diferentes formas de obtenção dos valores dos parâmetros da rede (Payatakes *et al.*, 1973a; Chan e Ng, 1986).

Neste capítulo o escoamento de um fluido incompressível em estado estacionário num meio poroso vai ser modelizado usando o modelo de redes. De modo a permitir a comparação das previsões do simulador hidrodinâmico com dados experimentais, o modelo geométrico é utilizado para estimar os parâmetros da rede equivalente, com base nas características do meio poroso. A necessidade de se utilizar um modelo simplificado da estrutura porosa real de um meio poroso está associada às enormes dificuldades em resolver directamente as equações de balanço de massa e de quantidade de movimento ao nível microscópico. A aplicação das condições fronteira, em particular a condição de não deslizamento na interface do sólido com o fluido, é apenas possível se a estrutura desta for conhecida com detalhe suficiente, o que acontece somente em meios porosos com características especiais, como por exemplo

monólitos (Irandooust e Anderson, 1988). Apesar de na literatura ser possível encontrar trabalhos em que é utilizada a estrutura real do meio poroso (Manz *et al.*, 1999; Dwyer *et al.*, 1999), as capacidades de cálculo limitam as dimensões dos meios porosos e os fenómenos de transporte que é possível descrever. Deste modo, a maior parte dos estudos assume estruturas regulares para representar a estrutura do meio poroso, de forma a simplificar a resolução das equações de balanço que descrevem o comportamento deste e permitir a comparação das previsões com dados experimentais.

Salvo algumas excepções (Thauvin e Mohanty, 1998; Wang *et al.*, 1999b), os modelos de redes apresentados na literatura são válidos apenas para escoamento em regime laminar (Dullien, 1995; Sahimi, 1995). Nestas condições, as equações que descrevem o comportamento dos elementos da rede são lineares, simplificando a resolução do sistema de equações de balanço. Para condições de escoamento não linear, o sistema de equações é não linear, aumentando consideravelmente as capacidades de cálculo necessárias. Para modelos muito simplificados da estrutura do meio poroso, é possível determinar analiticamente expressões que caracterizam o comportamento do meio poroso para regimes de escoamento não lineares. Um exemplo típico desta estratégia é a equação de Ergun, baseada na aplicação do conceito de raio hidráulico para o escoamento através de um meio poroso (ver Secção 2.3.4.3). A maior parte dos modelos propostos na literatura envolve a definição de constantes empíricas, a determinar com base em dados experimentais, limitando as condições em que estes são aplicáveis.

Esta questão é de particular importância pois as condições de operação da maior parte dos meios porosos existentes em processos industriais implicam escoamento não linear. Em comparação com o escoamento através de tubos, observa-se experimentalmente a existência de um regime de escoamento intermédio entre laminar e turbulento. Este facto foi atribuído por alguns autores, não à transição para um regime de escoamento turbulento, mas sim ao aumento de importância das forças inerciais no escoamento, passando estas a ser da mesma ordem de grandeza das forças viscosas (Dybbs e Edwards, 1984). Esta e outras características do escoamento podem ser introduzidas de forma mais eficiente num modelo de redes, no qual a estrutura mais simples dos elementos facilita a análise do seu comportamento hidrodinâmico. Outras vantagens podem ser apontadas, sendo as mais relevantes para o modelo proposto neste trabalho apresentadas de seguida.

- É possível simular a ocorrência de diferentes regimes de escoamento nos elementos da rede, resultando na possibilidade de se observarem regimes de escoamento distintos ao

nível macroscópico. A influência das características geométricas e das condições operatórias na transição entre regimes de escoamento podem ser incluídas directamente no modelo.

- A influência das contracções e expansões que ocorrem num leito de enchimento pode ser contabilizada de forma correcta. Na literatura esta característica é tomada em consideração utilizando capilares com constrições, i.e., raio variável (Dias e Payatakes, 1986a), ou recorrendo a modelos de redes formados por dois ou mais tipos de elementos (Koplik, 1982; Wang *et al.*, 1999). Esta foi a estratégia seleccionada, visto simplificar a descrição do escoamento na rede de elementos, como se irá ver mais à frente.
- É possível obter directamente as características locais dos perfis de velocidade e de pressão na rede e relacioná-los com as características geométricas da rede e dos seus elementos. Como a estrutura real do meio poroso não é usada directamente nas simulações, mas sim filtrada usando o modelo geométrico, os perfis obtidos pelo simulador hidrodinâmico não podem ser comparados directamente com os observados experimentalmente em meios porosos possuindo as mesmas características. No entanto, considera-se que é possível comparar os valores dos parâmetros macroscópicos que caracterizam o escoamento, como por exemplo a permeabilidade, o que implica que as características médias dos perfis de velocidade e pressão entre a rede e o meio poroso real são iguais.

No desenvolvimento e implementação do simulador hidrodinâmico foram consideradas algumas hipóteses, podendo estas ser relaxadas em trabalhos posteriores, com o objectivo de se determinar os limites de aplicabilidade do modelo e permitir a sua utilização na descrição de outros fenómenos de transporte.

- O escoamento é incompressível, unifásico, isotérmico e encontra-se em estado estacionário. As propriedades de transporte, em particular a viscosidade e a densidade do fluido são consideradas constantes. Os elementos da rede encontram-se saturados pelo fluido. Apesar de no escoamento de gases esta hipótese ser verificada naturalmente, na situação em que ocorre o escoamento de líquidos, esta restrição implica que o escoamento não se dá sob a forma de filmes ou filamentos na superfície das partículas, situação que deve ser simulada de forma distinta do modelo proposto (Sáez *et al.*, 1986).

- Assume-se que a mistura do fluido nas câmaras é perfeita, o que assegura que a pressão no seu interior é uniforme. A influência das câmaras no escoamento faz-se sentir através das ligações com os canais da rede e pela mistura das correntes que entram na câmara.
- Os canais operam em regime pistão. Esta hipótese implica que o perfil de velocidades nos canais é uniforme e unidimensional. Mesmo tomando em conta que existe um perfil radial de velocidades num canal, verifica-se que a utilização do valor médio do perfil de velocidades é suficiente para descrever a resistência ao escoamento através de tubos, em particular possuindo geometria cilíndrica. Desta forma, a perda de carga num canal pode ser determinada com base num factor de fricção, função dos regimes de escoamento no canal.
- A última hipótese exige também que os efeitos das entradas e das saídas dos canais nos seus perfis de velocidade sejam desprezáveis. De igual modo, as linhas de fluxo à entrada e à saída dos canais são paralelas entre si, simplificando a modelização do comportamento hidrodinâmico das câmaras (ver Secção 4.3.2).

As hipóteses impostas na descrição do escoamento implicam que o perfil de velocidades e de pressões no interior da rede se encontram associados aos canais da rede e aos ramos da rede respectivamente. O modelo implementado para a descrição do escoamento é descrito de seguida.

4.2 Modelização do Escoamento

A modelização do escoamento do fluido através da rede de câmaras e canais efectua-se escrevendo as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento nas câmaras e canais da rede. Ao escrever as equações de balanço nos canais, a influência das ligações entre estas e as câmaras pode ser tomada em conta. A formulação do modelo baseia-se na analogia entre circuitos hidráulicos e eléctricos (Dias e Payatakes, 1986a), pelo que é conveniente associar aos nós e ramos do circuito as câmaras e os canais da rede, respectivamente. A forma como os ramos são definidos em função dos elementos geométricos da rede depende das hipóteses assumidas para o comportamento das interligações entre as câmaras e os canais, como se irá ver mais à frente.

Aplicando a analogia com um circuito eléctrico, é obtido um sistema de equações em que as incógnitas são as pressões absolutas no interior das câmaras. A natureza do sistema de

equações depende das características do escoamento através dos canais da rede. Nas secções seguintes são descritos os modelos propostos para descrever o comportamento dos elementos da rede e a forma como estes foram implementados no simulador hidrodinâmico.

4.2.1 Descrição do Modelo

A estratégia para a descrição do escoamento é independente da estrutura da rede, mas requer que sejam conhecidas as suas características, em especial as distribuições das dimensões características dos elementos que a constituem. Deste modo, o gerador da rede e o simulador hidrodinâmico foram desenvolvidos em separado, embora tenham de ser usados sequencialmente na descrição do escoamento através da rede.

As variáveis primárias na descrição do escoamento são o caudal volumétrico em cada canal, q_j , e a pressão absoluta em cada câmara, P_i . As variáveis análogas são a intensidade de corrente eléctrica num ramo e o potencial eléctrico em cada nó do circuito eléctrico respectivamente. Na Figura 4.1 é apresentado um exemplo de um circuito eléctrico equivalente a uma rede com canais horizontais e fronteiras periódicas (ver Figura 3.4). Como se assumiu que o escoamento se encontra em estado estacionário, a aplicação do análogo permite usar as metodologias desenvolvidas na análise de circuitos eléctricos (Desoer e Kuhn, 1969), simplificando a implementação do modelo e permitindo a utilização de algoritmos eficientes para a sua resolução.

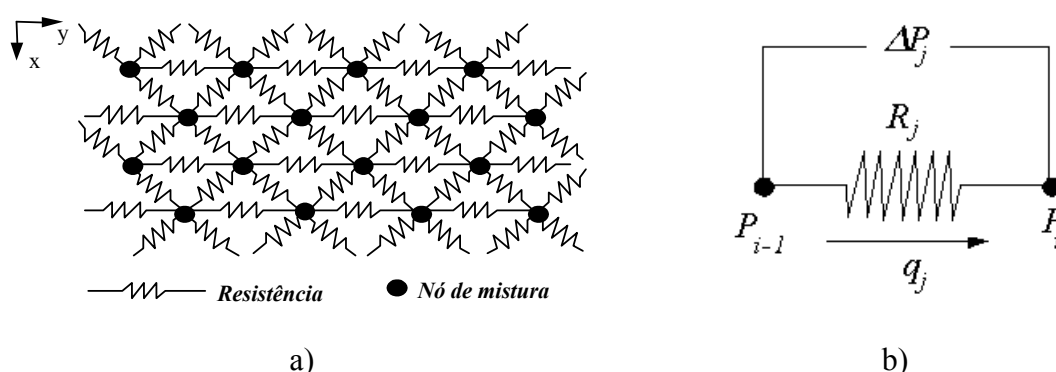


Figura 4.1 Análogo eléctrico usado na descrição do escoamento: a) circuito eléctrico equivalente a uma rede com canais horizontais e fronteiras periódicas; b) analogia para o escoamento num canal.

As equações de balanço material nos nós da rede podem ser escritas na forma

$$\sum q_j^E = \sum q_j^O \quad (4.1)$$

em que q_j^E e q_j^O representam os caudais volumétricos nos canais de entrada e de saída de uma câmara respectivamente. O comportamento dos ramos da rede é descrito pela seguinte equação, similar à lei de Ohm mas que toma em conta a possibilidade de existirem termos não lineares de escoamento

$$\Delta P_j = R_j q_j + \Delta P_j^s - R_j q_j^s \quad (4.2)$$

O termo ΔP_j representa a queda de pressão num ramo da rede, equivalente à diferença de potencial observada entre os nós nos extremos de um ramo da rede. R_j representa a resistência ao escoamento do fluido através do ramo da rede, incluindo este termo a influência da fricção do fluido nas paredes do canal e das interligações entre as câmaras e os canais. Este termo depende das características geométricas dos canais. Este é o termo dominante na descrição do escoamento através do meio poroso, pelo que particular atenção vai ser prestada na sua determinação (ver Secções 4.3.1 e 4.3.2).

Os outros dois termos da Equação 4.2 representam fontes de tensão, ΔP_j^s , e fontes de corrente, q_j^s , podendo ser referidas algumas situações em que estes são significativos.

- Os termos de fonte de tensão encontram-se quase sempre relacionados com a influência no escoamento de campos de força exteriores ao meio poroso, sendo a situação usual a acção da gravidade se o sentido de escoamento é ascendente ou descendente. Outra situação em que estes termos podem ser significativos ocorre quando as propriedades físico-químicas do fluido são alteradas, como é o caso do escoamento de gases para quedas de pressão elevadas ou se ocorrem reacções químicas com variação do número de moles ou com carácter exotérmico. Fontes de tensão adicionais surgem também em escoamentos multifásicos devido à pressão capilar nas interfaces fluido/fluido (Payatakes e Dias, 1986a).
- Os termos de fonte de corrente estão associados a variações locais do caudal volumétrico de fluido, como por exemplo entradas laterais de fluido ou ocorrência de reacção química com dissolução da fase sólida ou precipitação de sólidos.

No modelo hidrodinâmico o escoamento ocorre por imposição de um gradiente macroscópico de pressões, imposto entre os canais de entrada e saída da rede. Este termo é considerado através da definição de um termo de fonte de tensão associado aos canais de entrada de fluido

na rede. Outras fontes de tensão adicionais podem ocorrer nas interligações entre os canais e as câmaras, como se conclui no Apêndice B.3. De acordo com as hipóteses assumidas para o escoamento na rede, as fontes de tensão associadas aos efeitos da gravidade, ocorrência química ou a variações das propriedades do fluido não foram consideradas, sendo assim os termos q_j^s nulos, com excepção dos associados à entrada de fluido na rede, nos quais é aplicado o gradiente de pressões macroscópico. Deste modo, a Equação 4.2 pode ser simplificada, obtendo-se a seguinte expressão

$$\Delta P_j = R_j q_j + \Delta P_j^s \quad (4.3)$$

As equações de balanço material e de conservação de quantidade de movimento, definidas pelas Equações 4.1 e 4.3 respectivamente, devem ser resolvidas em simultâneo para determinar os caudais volumétricos e as pressões absolutas nos canais e câmaras da rede respectivamente. Os dois tipos de equações encontram-se associados entre si através do termo R_j , que representa a resistência de um ramo da rede ao escoamento. A aplicação do análogo permite simplificar a implementação do modelo e reduzir o número de equações a resolver simultaneamente, como se pode ver na secção seguinte.

4.2.2 Implementação do Modelo

Na modelização do comportamento de qualquer sistema físico o número de incógnitas e de equações linearmente independentes que é possível escrever deve ser igual. Usando o modelo de redes, as variáveis são os valores das pressões absolutas e dos caudais volumétricos que se observam nas câmaras e nos canais respectivamente, num total de $N_{Cam} + N_{Can}$. Como para cada câmara é possível escrever a respectiva equação de balanço material e para os canais uma equação na forma da Equação 4.3, o número total de equações é igual ao das incógnitas, pelo que o sistema possui uma solução única.

As leis dos nós e das malhas podem ser aplicadas ao análogo eléctrico da rede para se simplificar a resolução do sistema de equações e reduzir o número de equações a resolver simultaneamente (Desoer e Kuhn, 1969). As equações de balanço material nas câmaras, definidas pela Equação 4.1, podem ser expressas na seguinte forma matricial (lei dos nós)

$$\mathbf{A}\mathbf{q} = 0 \quad (4.4)$$

em que $\mathbf{q}$ é um vector de N_{Can} elementos contendo os valores da intensidade de corrente em cada ramo e $\mathbf{A}$ é a matriz das incidências reduzidas, de dimensão $N_{Cam} \times N_{Can}$. Os elementos a_{ij} da matriz $\mathbf{A}$ podem tomar um de três valores em função do sentido de escoamento no canal j em relação à câmara i : -1 se o sentido for o de entrada na câmara, +1 se o sentido for o de saída da câmara e 0 se o canal e a câmara não estiverem ligados entre si.

De acordo com a definição de $\mathbf{A}$, esta matriz é equivalente a uma tabela de dupla entrada, encontrando-se os índices das câmaras e dos canais nas linhas e colunas da matriz respectivamente. Se a rede contiver um número elevado de câmaras e canais, a matriz $\mathbf{A}$ vai ser esparsa, dependendo a estrutura desta das condições impostas ao gerador da rede (ver Apêndice B.4).

De igual modo, é possível escrever a lei das malhas para o análogo. Esta lei diz que a diferença de potencial num ramo fechado de um circuito eléctrico deverá ser nula. A aplicação desta condição permite obter a seguinte expressão matricial

$$\Delta \mathbf{P} = \mathbf{A}^T \mathbf{P} \quad (4.5)$$

em que $\Delta \mathbf{P}$ é um vector com N_{Can} elementos, contendo as diferenças de potencial de cada ramo do circuito eléctrico, $\mathbf{P}$ é um vector com N_{Cam} elementos, contendo os potenciais nos nós do circuito e $\mathbf{A}^T$ é a transposta da matriz de incidências.

A Equação 4.3 pode ser escrita na forma

$$q_j = G_j (\Delta P_j - \Delta P_j^s) \quad (4.6)$$

em que

$$G_j = \frac{1}{R_j} \quad (4.7)$$

é a condutância de um ramo. A Equação 4.6 pode ser escrita na forma matricial

$$\mathbf{q} = \mathbf{G} (\Delta \mathbf{P} - \Delta \mathbf{P}^s) \quad (4.8)$$

em que $\Delta \mathbf{P}^s$ é um vector com N_{Can} elementos, contendo as fontes de tensão em cada um dos ramos da rede e $\mathbf{G}$ é uma matriz diagonal de dimensões $N_{Can} \times N_{Can}$, contendo os valores da condutância de cada um dos ramos do circuito equivalente.

Substituindo a Equação 4.8 na Equação 4.5 e rearranjando, obtém-se um sistema de equações em que as incógnitas são os potenciais nos nós da rede, na forma

$$\mathbf{Y}\mathbf{P} = \mathbf{q}^s \quad (4.9)$$

em que a matriz $\mathbf{Y}$ é definida pela expressão

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{G}\mathbf{A}^T \quad (4.10)$$

Esta matriz $\mathbf{Y}$ é designada por matriz das admitâncias, sendo uma matriz quadrada de dimensão $N_{Cam} \times N_{Cam}$. Os elementos y_{ij} podem ser determinados a partir da matriz $\mathbf{G}$, tendo em consideração a sua posição em relação à diagonal da matriz.

- Os elementos da diagonal, y_{ii} , são determinados somando a condutância de todos os ramos da rede associados ao nó i , representando a admitância própria do ramo i .
- Os elementos que não pertencem à diagonal, y_{ij} , são iguais ao simétrico do valor da condutância do ramo que liga as câmaras i e j , representando a admitância mútua entre dois nós da rede.
- Todos os restantes elementos são nulos.

De acordo com a estrutura do modelo de redes implementado, o número máximo de canais associados a uma câmara é seis. Deste modo, cada linha da matriz $\mathbf{Y}$ possui no máximo sete valores não nulos, visto que a diagonal principal se encontra associada às câmaras. Este valor é função da distribuição de números de coordenação das câmaras da rede, determinada essencialmente pela existência ou não de canais horizontais. De acordo com a segunda regra, como os elementos y_{ij} e y_{ji} são iguais, $\mathbf{Y}$ é uma matriz simétrica. Esta propriedade de $\mathbf{Y}$ é importante na selecção do método numérico para a resolução do sistema de equações, em particular quando um número elevado de câmaras é usado na rede.

O vector $\mathbf{q}^s$ de dimensão N_{can} representa a influência das fontes de tensão e de corrente no escoamento, e pode ser determinado usando a expressão (Desoer e Kuhn, 1969)

$$\mathbf{q}^s = \mathbf{AG}\Delta\mathbf{P}^s \quad (4.11)$$

O sistema de equações definido pela Equação 4.9 permite determinar os valores dos potenciais nos nós da rede, correspondentes às pressões absolutas no interior das câmaras, conhecida a matriz das condutâncias $\mathbf{G}$ e o vector $\mathbf{q}^s$.

O algoritmo implementado determina o perfil de caudais impondo uma diferença de potencial entre a entrada e a saída do fluido, equivalente à imposição de um gradiente de pressões externo, ΔP_T , sendo este imposto como uma fonte de tensão aplicada nos canais de entrada de fluido na câmara. De notar que esta forma de cálculo é precisamente contrária à estratégia geralmente utilizada nas equações de previsão da queda de pressão propostas na literatura, em que ΔP_T é determinado a partir do conhecimento do valor do caudal volumétrico total através da rede, q_T .

O problema da descrição do escoamento através da rede de câmaras e canais reduz-se então ao cálculo da matriz das admitâncias, $\mathbf{Y}$. No cálculo desta é necessário determinar os valores das condutâncias e das fontes de tensão associadas a cada um dos ramos da rede, o que é possível apenas se as características geométricas da rede forem conhecidas, em particular as distribuições das dimensões características dos elementos da rede.

Neste trabalho considerou-se que cada um dos valores de condutância da rede é a soma de dois termos, representando a acção das forças viscosas nas paredes dos canais e a influência das expansões e das contracções formadas pelas interligações entre as câmaras e os canais. Deste modo, torna-se necessário analisar o comportamento dos dois tipos de elementos da rede (ver Secção 4.3). As fontes de tensão que é necessário ter em conta dependem das condições impostas ao simulador hidrodinâmico. Apenas as fontes de tensão derivadas da imposição da diferença de potencial global na rede são sempre tomadas em conta. A influência da gravidade é tomada em conta ramo a ramo.

4.3 Modelização da Hidrodinâmica dos Elementos da Rede

Admite-se neste trabalho que a resistência de um ramo da rede, R_j , é a soma de dois termos, na forma

$$R_j = R_j^F + R_j^E \quad (4.12)$$

em que R_j^F representa a resistência do canal devido às forças de fricção nas paredes do canal e R_j^E representa a resistência das expansões e contracções dos canais devido à entrada e saída do fluido das câmaras. Como os dois termos se encontram associados a elementos da rede diferentes, são analisados em separado nas secções seguintes.

Em relação aos termos de fontes de tensão dos ramos da rede, apenas os termos associados à influência da gravidade no escoamento e das saídas e entradas do fluido das câmaras é que são tomadas em conta pelo simulador hidrodinâmico. Estes termos estão associados apenas aos ramos da rede, sendo desprezadas as fontes de tensão associadas aos nós.

4.3.1 Modelização da Hidrodinâmica dos Canais

De acordo com as hipóteses consideradas para o escoamento do fluido nos canais, a equação de Bernoulli pode ser aplicada para descrever o comportamento de um canal qualquer da rede, como se pode observar na Figura 4.2. Considerando que o gradiente de pressões principal é exercido segundo o eixo dos xx , obtém-se

$$P_{N1} + \rho g x_1 + \frac{\rho v_{N1}^2}{2} = P_{N2} + \rho g x_2 + \frac{\rho v_{N2}^2}{2} + \Delta P_F \quad (4.13)$$

em que os índices 1 e 2 representam as condições de entrada e saída do canal respectivamente, g a aceleração da gravidade e ΔP_F a perda de carga por efeito da fricção do fluido em escoamento nas paredes de um canal da rede. Como o escoamento se encontra em estado estacionário e o diâmetro do canal é constante, $v_{N1} = v_{N2}$, simplificando-se a expressão anterior para a forma

$$P_{N1} - P_{N2} = \rho g (x_1 - x_2) + \Delta P_F \quad (4.14)$$

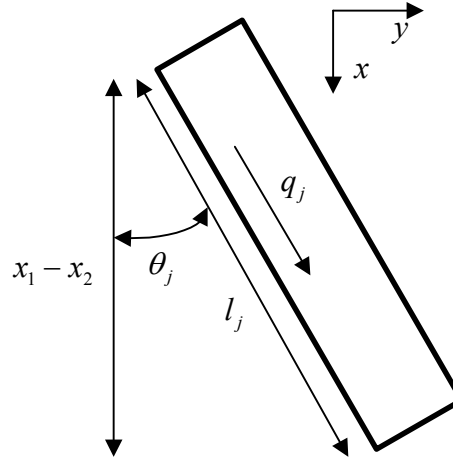


Figura 4.2 Esquema de um canal genérico da rede, com definição dos eixos coordenados e das variáveis mais importantes na descrição do escoamento através deste.

O termo do lado esquerdo da Equação 4.14 representa a diferença de potencial, ΔP_j^F , entre a entrada e a saída do canal. O primeiro termo do lado direito representa a fonte de tensão devido à acção da gravidade, ΔP_j^s , representando $x_1 - x_2$ a diferença de cotas entre a entrada e a saída do canal. Este termo depende da orientação do canal em relação à vertical, sendo definido pela expressão seguinte

$$\Delta P_j^s = \rho g l_j \cos \theta_j \quad (4.15)$$

em que θ_j representa a orientação do canal j . De acordo com as características geométricas do modelo de redes implementado neste trabalho, para os canais horizontais ΔP_j^s é nulo.

O segundo termo representa a perda de carga devida à fricção do fluido nas paredes do canal, e com base na analogia com um circuito eléctrico pode ser expresso na forma

$$\Delta P_F = R_j^F q_j \quad (4.16)$$

em que a resistência R_j^F é função das condições de escoamento no canal, e substituindo na Equação 4.14

$$\Delta P_j^F = \Delta P_j^s + R_j^F q_j \quad (4.17)$$

O termo R_j^F pode ser escrito na seguinte forma geral (Lim e Ti, 1998)

$$R_j^F = \frac{8\rho f_j l_j q_j}{\pi^2 d_j^5} \quad (4.18)$$

em que f_j é o factor de fricção para o escoamento através do canal. Este parâmetro é função do número de Reynolds nos canais, Re_j , definido pela expressão

$$Re_j = \frac{\rho v_j d_j}{\mu} = \frac{4\rho q_j}{\pi \mu d_j} \quad (4.19)$$

em que v_j é a velocidade média do fluido no canal j da rede. Como os canais são cilíndricos, é possível definir três zonas distintas para o escoamento, em que é necessário definir expressões diferentes para f_j (ver por exemplo, Shames, 1982).

Se $Re_j < 2300$, o escoamento encontra-se em regime laminar e f_j é dado por

$$f_j = \frac{64}{Re_j} \quad (4.20)$$

Substituindo a expressão anterior na Equação 4.18, obtém-se

$$R_j^F = \frac{128\mu l_j}{\pi d_j^4} \quad (4.21)$$

isto é, a resistência ao escoamento dos canais da rede para regime laminar é função apenas das suas características geométricas. Outras expressões para o cálculo de f_j em diferentes geometrias podem ser encontrados em White (1992) e Patzek e Silin (2001).

Se $Re_j > 5000$, o regime de escoamento no canal é turbulento, passando R_j^F a ser uma função não linear de q_j . Admitindo que a parede dos canais é lisa, foram utilizadas duas expressões conforme o valor de Re_j . Para a gama de valores de Re_j entre 5000 e 100000, foi usada a equação de Blasius

$$f_j = \frac{0.3164}{Re_j^{0.25}} \quad (4.22)$$

Para valores de Re_j superiores a 100000, a equação de Colebrook-White foi seleccionada

$$\frac{1}{\sqrt{f_j}} = 2\log(Re_j \sqrt{f_j}) - 0.8 \quad (4.23)$$

A última equação é uma expressão implícita em f_j , pelo que o valor do factor de fricção deve ser obtido numericamente. Na Secção 4.5.1 mostra-se que em condições normais de escoamento, quase nunca é necessário determinar o f_j recorrendo à Equação 4.23, sendo a sua inclusão justificada pela necessidade de se definirem expressões para toda a gama de valores de Re_j .

Para a zona de transição entre regime laminar e turbulento, considerada normalmente para valores de Re_j entre 2300 e 5000, não existem expressões gerais que permitam o cálculo de f_j , devido à grande dispersão dos valores experimentais disponíveis (Shames, 1982). No entanto, para ser possível modelizar o escoamento numa rede de câmaras e canais para a situação em que existam canais com valores de Re_j nesta gama, é necessário dispor de uma expressão contínua de f_j em função de Re_j , pelo que foram consideradas duas estratégias, descritas em detalhe no Apêndice B.2. Na primeira f_j é aproximado por uma interpolação linear entre os valores do factor de fricção para os extremos superior e inferior das zonas de escoamento laminar, $Re_j = 2300$ e turbulento, $Re_j = 5000$, respectivamente

Esta aproximação assegura a continuidade de f_j nos extremos da zona de transição, mas a primeira derivada é descontínua. Dependendo do algoritmo utilizado para a resolução do sistema de equações, a existência de descontinuidades deste tipo pode trazer problemas numéricos, em especial se existirem muitos canais da rede em que as condições de escoamento se encontram próximas dos limites entre os diferentes regimes de escoamento (Bending e Hutchison, 1973).

Outra forma de determinar f_j foi desenvolvida de modo a assegurar a continuidade da função e da primeira derivada nos extremos da zona de transição, usando polinómios de Tchebyshev (Conte e DeBoor, 1984). Neste caso os valores limites de Re_j são determinados simultaneamente com os coeficientes dos polinómios.

As duas aproximações são comparadas na Figura 4.3. Observa-se que as duas curvas são semelhantes, ocorrendo as maiores diferenças nos limites de definição da aproximação linear.

A zona de transição definida pelo polinómio de Tchebyshev é mais larga que a aproximação linear, reduzindo em especial a zona de regime laminar. O simulador hidrodinâmico permite a utilização de qualquer uma das aproximações, tendo sido preferida a segunda por assegurar a continuidade da função $f_j(Re_j)$ e das suas primeiras derivadas em toda a gama de valores de números de Reynolds. No entanto, a aproximação linear simplifica a descrição analítica do escoamento, como se vai ver na Secção 4.4.3.

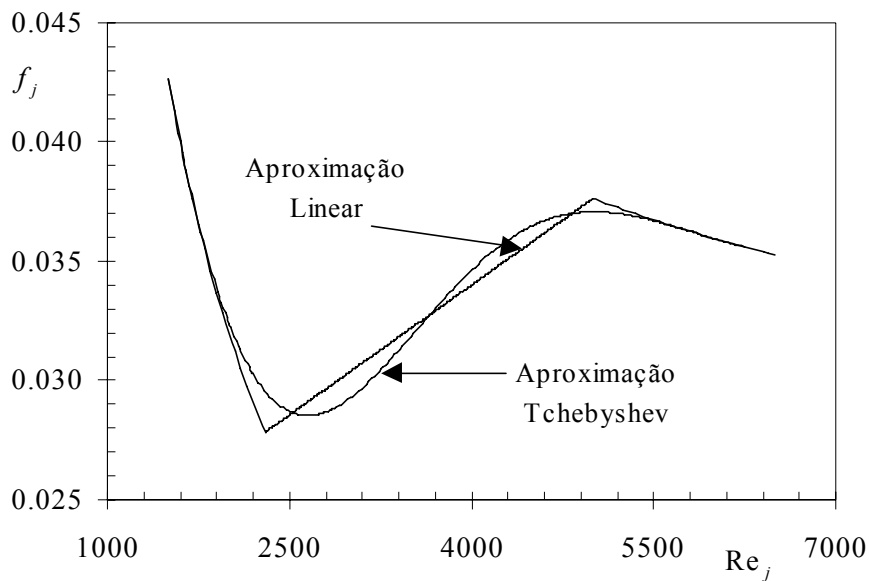


Figura 4.3 Comparação das curvas de f_j em função de Re_j na zona de transição para as duas formas de aproximação propostas.

4.3.2 Modelização da Hidrodinâmica das Câmaras

Nesta secção vai ser descrita a forma como os termos de resistência das expansões e contracções dos canais devido à entrada e saída do fluido das câmaras, R_j^E , são determinados através da análise do comportamento hidrodinâmico das câmaras. Para simplificar o algoritmo de descrição do escoamento, em particular a determinação da matriz $\mathbf{Y}$, R_j^E está sempre associado aos ramos da rede. Deste modo, as câmaras representam apenas nós de mistura, de acordo com a analogia eléctrica considerada neste trabalho. No entanto, no cálculo de R_j^E devem ser tomadas em conta as características das câmaras associadas ao ramo respectivo. Com excepção das linhas de entrada e saída de fluido da rede, qualquer ramo da rede possui a estrutura apresentada na Figura 4.4. Como normalmente existem duas câmaras associadas a um ramo, é necessário somar as contribuições de cada um dos lados para determinar R_j^E .

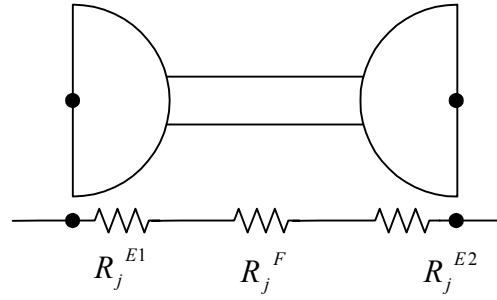


Figura 4.4 Representação esquemática da resistência de um ramo e análogo eléctrico utilizado.

O valor de R_j^E é a soma de duas contribuições

$$R_j^E = R_j^{EL} + R_j^{ET} \quad (4.24)$$

O primeiro termo, R_j^{EL} , representa a contribuição das forças viscosas e o segundo termo, R_j^{ET} , representa a contribuição das forças inerciais. Nas secções seguintes são obtidas expressões que permitem determinar o valor de cada um destes termos.

4.3.2.1 Resistência das interligações em Regime Linear

Koplik (1982) resolveu analiticamente o problema do escoamento para velocidades baixas do fluido (*creeping flow*) considerando uma geometria idêntica à utilizada neste trabalho. Este autor demonstrou que R_j^{EL} pode ser calculado, com um erro desprezável, admitindo que o canal j possui um prolongamento adicional para o interior da câmara igual a $2d_j/\pi$. Substituindo na Equação 4.21, e tomando em atenção que cada ramo possui duas câmaras nos seus extremos, R_j^{EL} é expresso na forma

$$R_j^{EL} = \frac{512\mu}{\pi^2 d_j^3} \quad (4.25)$$

Tal como na expressão obtida para escoamento laminar através de um canal da rede, o termo R_j^{EL} é função das características geométricas dos canais, embora neste caso apenas do seu diâmetro. Observa-se que a dependência no valor do diâmetro dos canais é diferente da observada para o escoamento através destes, sendo menos sensível a variações de d_j .

4.3.2.2 Resistência das interligações em Regime Não Linear

O segundo termo, R_j^{ET} , representa a contribuição das forças inerciais e o seu valor pode ser determinado analisando o escoamento na câmara, em particular nas ligações entre as câmaras e os canais dos ramos da rede. Teoricamente é possível descrever o escoamento resolvendo as equações de conservação de massa e de quantidade de movimento escritas para as câmaras e os canais da rede, como se mostra no Apêndice B.3. No entanto, no estado actual de desenvolvimento, este tipo de modelo não pode ser usado no simulador, pois, em certas condições prevê que o comportamento dos ramos da rede é tal que estes não se opõem ao escoamento do fluido, sendo portanto fontes de tensão.

Deste modo, neste trabalho foi desenvolvido um modelo mais simples em que se impõe que os R_j^{ET} sejam sempre positivos, o que implica que os ramos da rede exercem sempre resistência ao escoamento de fluido.

Na literatura (Shames, 1982; White, 1992) é comum calcular a perda de carga adicional associada a acidentes em tubagens, como é o caso de expansões ou contracções bruscas da área de secção recta, através de um parâmetro K_j . Este é função das características geométricas e de escoamento dos elementos, devendo ser definidas constantes distintas conforme as ligações entre a câmara e o canal se comportam como uma expansão ou uma contracção. No escoamento através de um sistema de tubagens, é comum assumir que os valores de K_j são constantes e não dependem das características geométricas e de escoamento nos acidentes. Valores típicos de K_j para os acidentes mais comuns em sistemas de tubagens, como por exemplo válvulas, expansões e contracções, encontram-se tabelados na literatura (Shames, 1982; White, 1992). Para o escoamento através da rede, as constantes de expansões e contracções súbitas do escoamento mais comuns são 1.0 e 0.5 respectivamente. Os valores das constantes são válidas para escoamento turbulento perfeitamente desenvolvido e quando a razão entre as áreas de secção recta nas duas partes do acidente for elevada, como por exemplo na entrada de fluido de um tubo para um reservatório de grandes dimensões.

Na determinação de R_j^{ET} é necessário tomar em conta que existem dois acidentes associados a cada ramo da rede e que são distintos os seus comportamentos hidrodinâmicos. Apesar dos valores de K_j serem função das características geométricas e do escoamento na rede ao nível local, assume-se um valor constante para as expansões e as contracções, sendo estes definidos

nos dados iniciais a introduzir no simulador hidrodinâmico. Deste modo, R_j^{ET} é calculado a partir da seguinte expressão

$$R_j^{ET} = \frac{8\rho q_j}{\pi^2 d_j^4} \sum_{k=1}^2 K_j^k \quad (4.26)$$

em que os parâmetros K_j^k correspondem à influência das expansões e contracções do escoamento. Apesar de existirem na literatura expressões que permitem estimar K_j^k em função dos diâmetros dos elementos da rede associados entre si, estas são válidas apenas para saídas ou entradas de fluido envolvendo apenas uma câmara e um canal. Assim, estas não são aplicáveis à estrutura da rede considerada neste trabalho. Deste modo, $\sum K_j$ é determinado por ajuste dos valores previstos pelo simulador hidrodinâmico com dados experimentais obtidos da literatura (ver Secção 4.7.3), permitindo assim incluir directamente na simulação do escoamento a estrutura da rede.

Assumindo que os efeitos das ligações entre as câmaras e os canais são independentes uns dos outros, e que os efeitos da mistura do fluido na câmara são desprezáveis, é possível estimar $\sum K_j$ com base em expressões teóricas e/ou correlações propostas na literatura. De acordo com Shames (1982) e Graebel (2000), para uma rede em que as distribuições dos diâmetros das câmaras e dos canais são pontuais, $\sum K_j$ pode ser expresso na forma

$$\sum K_j = \left[1 - \left(\frac{d_j}{D_i} \right)^2 \right]^2 + \left(\frac{1}{C_{Cj}} - 1 \right)^2 \quad (4.27)$$

em que C_{Cj} é o coeficiente de contracção, podendo este parâmetro ser calculado a partir da seguinte expressão

$$C_{Cj} = 0.602 + 0.370 \left(\frac{d_j}{D_i} \right)^2 \quad (4.28)$$

em função da razão entre o diâmetro médio das câmaras e dos canais. De notar que a expressão de K_j associada à saída do fluido das câmaras para os canais assume que a perda de carga associada às variações de velocidade do fluido ao variar a área de secção recta é desprezável.

A expressão obtida para $\sum K_j$ é função de d/D , podendo o valor desta razão ser determinado em função da porosidade usando os modelos geométricos descritos na Secção 3.5. Na Figura 4.5 são comparados os valores de $\sum K_j$ em função de ε para os modelos simplificados T1S e T2S, para as duas expressões $\theta = f(\varepsilon)$. Como todos os modelos geométricos prevêem valores similares de d e D para a gama de valores de porosidade, as conclusões obtidas com os modelos simplificados são extensíveis aos modelos T1 e T2. É possível observar-se a existência de um valor mínimo, situado na gama de valores de porosidade em que a razão entre os diâmetros médios dos canais e das câmaras tende para um, correspondente ao modelo ORT.

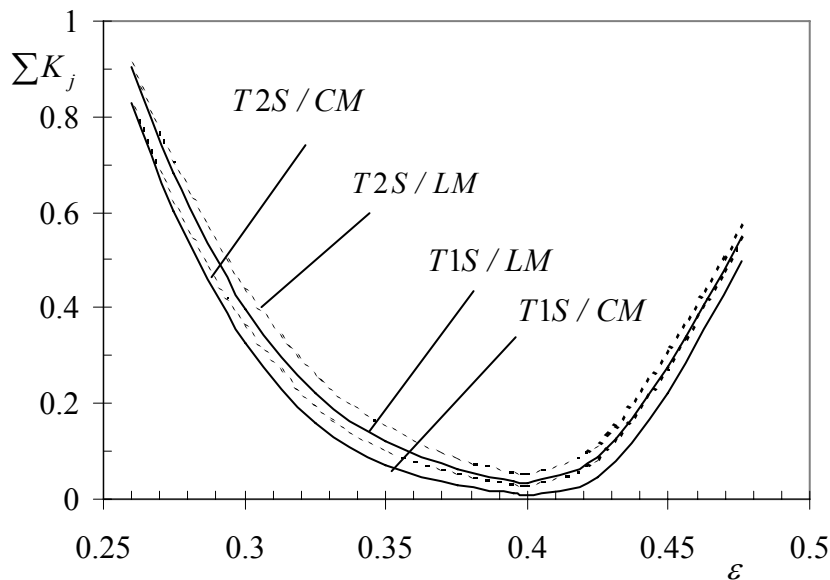


Figura 4.5 Valores previstos de $\sum K_j$ em função de ε para os modelos simplificados T1S e T2S.

Quando $d/D \approx 1$, correspondendo a $\varepsilon \approx 0.4$, a variação da área de secção recta nas expansões e contracções é desprezável, tendendo a perda de carga associada a estas também para zero. Nessas condições, os termos significativos da resistência dos ramos da rede ao escoamento passam a ser os termos associados à fricção do fluido nas paredes dos canais e a resistência laminar nas conexões entre as câmaras e os canais.

Este modelo simplificado verifica a condição de resistência nula quando o caudal tende para zero. Para velocidades de escoamento baixas, os termos de resistência devido à fricção do fluido nas paredes dos canais são dominantes, como era de se esperar para regime laminar de escoamento. Desprezar os valores de R_j^{ET} é equivalente a desprezar a influência das câmaras,

hipótese assumida na maior parte dos estudos apresentados na literatura, muitas vezes porque se assumiu que o volume associado às câmaras era desprezável e estas actuam como simples nós de mistura do fluido (Sahimi, 1995). A implementação desta simplificação permite determinar as condições para as quais os termos não lineares de R_j^{ET} são significativos e a influência destes nos valores previstos dos parâmetros macroscópicos do escoamento, o que é feito na Secção 4.5.1.

Por outro lado, como os valores das constantes K_j são sempre positivos, os valores de R_j^{ET} representam sempre termos de resistência ao escoamento. Esta situação é contrária ao modelo completo (ver Apêndice B.3), em que os valores de K_j podem ser negativos, devendo R_j^{ET} ser tratado como uma fonte de tensão. A modelização do escoamento na rede é mais simples para este modelo simplificado, visto que R_j^{ET} pode ser associado à condutância de cada um dos ramos da rede e não através do vector das fontes de tensão, de cálculo mais complexo.

4.3.2.3 Discussão dos Vários Modelos de Determinação de R_j^{ET}

Os modelos desenvolvidos nas secções anteriores mostram que quando a velocidade num canal tende para zero, R_j^{ET} tende para zero, passando R_j^{EL} a ser o factor dominante na resistência ao escoamento nas ligações entre as câmaras e os canais. Este comportamento dos valores de R_j^{ET} era esperado, visto qualquer dos modelos prever uma dependência linear de R_j^{ET} em função da velocidade nos canais, resultando numa queda de pressão através do canal proporcional a v_j^2 . Por outro lado, as expressões obtidas são função da densidade e não da viscosidade do fluido, indicativo que os termos R_j^{ET} representam a influência das forças inerciais no escoamento. Esta situação é característica de escoamento não linear, em que os termos inerciais são dominantes no escoamento. Para regime puramente viscoso, os termos não lineares devem tender para zero, devendo os termos de resistência ao escoamento ser independentes do caudal nos elementos da rede, de acordo com a Equação 4.25 para R_j^{EL} e com a Equação 4.21 para o escoamento num tubo.

No modelo de escoamento proposto, os termos associados às forças viscosas dependem apenas dos valores dos diâmetros dos canais. Como nas câmaras a mistura do fluido é perfeita, os efeitos viscosos são desprezáveis. O processo de mistura resulta em variações da

velocidade do fluido, descrita de forma mais conveniente como um termo inercial. Como os termos viscosos e inerciais são função de diferentes propriedades do fluido, é necessário então definir dois termos distintos para calcular a resistência ao escoamento das ligações entre as câmaras e os canais. Como o termo R_j^{EL} corresponde ao valor limite da resistência para caudais baixos, o termo R_j^{ET} corresponde de facto a um termo correctivo que contabiliza os efeitos não lineares do escoamento. Como se admite que a velocidade do fluido não varia ao longo dos canais, apenas os termos viscosos são significativos, não sendo necessário tomar em conta a influência das forças inerciais nestes.

Comparando as Equações 4.18 e 4.24, observa-se uma diferença no número de termos existentes em cada uma delas. Esta diferença está relacionada com a forma como o factor de fricção f_j é definido. Para o escoamento por fricção num tubo, a função de $f_j(Re_j)$ é única, tomando diferentes formas conforme o regime de escoamento observado no canal. Neste modelo, a inclusão de dois termos na fórmula de definição da resistência R_j^E permite verificar a situação limite de escoamento a baixas velocidades, definindo expressões analíticas para cada um dos termos da Equação 4.24. A definição de uma única expressão de f_j para um ramo da rede é formalmente diferente, visto ser necessário incluir os termos associados às ligações entre as câmaras e os canais. Apesar das diferenças entre as duas equações, como a Equação 4.18 é a forma quase universal de calcular a resistência num tubo, foi a forma seleccionada neste trabalho para a determinação de R_j^F .

4.3.3 Determinação da Resistência Associada a um Ramo

Visto que nas secções anteriores foram propostas diferentes formas de cálculo dos termos R_j^{ET} , podem ser definidas diferentes estratégias para determinar R_j , de acordo com a Equação 4.12. Comum a todas elas é a forma de cálculo de R_j^F . De acordo com as conclusões da Secção 4.3.2.3, foram considerados dois modelos.

No modelo mais simples, o termo R_j^E é desprezado, tomando-se apenas em conta a influência da fricção do fluido nas paredes nos canais. Quando se pretende considerar os efeitos das ligações entre as câmaras e os canais, o termo R_j^E é incluído, sendo consideradas as suas duas parcelas, R_j^{EL} e R_j^{ET} .

4.3.3.1 Modelo FRIC

Este modelo é o mais simples, e toma em consideração apenas a resistência ao escoamento derivada do escoamento nos canais. Deste modo, R_j^{EL} e R_j^{ET} são nulos sendo apenas necessário tomar em conta as expressões apresentadas na Secção 4.3.1 para descrever o comportamento dos canais. Este é também o modelo pré-definido no simulador hidrodinâmico, caso tenha sido imposto um diâmetro nulo às câmaras da rede, implicando que as câmaras actuam apenas como nós de mistura do fluido.

4.3.3.2 Modelo ICAM

Neste modelo os valores de K_j são valores constantes independentes das características geométricas e do escoamento ao nível local. Como são necessárias duas constantes K_j , uma para a entrada e outra para a saída da câmara, a seguinte expressão pode ser escrita para a queda de pressão no canal devido às expansões e contracções do canal

$$\Delta P_j^a = \frac{8\rho q_j^2}{\pi^2 d_j^4} (K_j^{in} + K_j^{out}) \quad (4.29)$$

em que K_j^{in} e K_j^{out} representam as constantes para uma entrada e uma saída de uma câmara qualquer da rede respectivamente. Ao contrário do modelo completo, agora os termos de R_j^{ET} são expressos em função das condições de escoamento nos canais. A partir da definição de resistência ao escoamento dada pela Equação 4.3, pode ser escrita a seguinte expressão geral para o somatório dos termos R_j^{ET} para qualquer ramo da rede

$$\sum R_j^{ET} = \frac{8\rho q_j^2}{\pi^2 d_j^4} (K_j^{in} + K_j^{out}) \quad (4.30)$$

Na análise ou projecto de sistemas de tubagens, é usual assumir que as diferenças entre as áreas antes e depois do acidente são tais que são usados os valores limite das constantes, em particular, $K_j^{in} = 1.0$ e $K_j^{out} = 0.5$. Assumindo que estes valores são válidos, pode ser usada a seguinte expressão para determinar o termo R_j^{ET} para qualquer ramo da rede

$$R_j^{ET} = \frac{12\rho q_j^2}{\pi^2 d_j^4} \quad (4.31)$$

No simulador hidrodinâmico foi considerada a possibilidade de as constantes poderem tomar valores diferentes dos apresentados, de modo a permitir um ajuste mais adequado entre os valores previstos pelo simulador e os dados experimentais.

A análise das expressões do modelo completo (ver Apêndice B.3) mostra que R_j^{ET} é função das condições de escoamento e das características geométricas locais da rede. Por outro lado, na literatura é possível encontrar expressões que permitem determinar os valores de K_j^{in} e K_j^{out} em função dos diâmetros característicos dos elementos antes e depois dos acidentes da tubagem, tomando em conta a natureza do escoamento nestes (Munsoon *et al.*, 1998), ou das condições de escoamento nos canais (Hooper, 1984). Este autor propôs a utilização de expressões para K_j^{in} e K_j^{out} envolvendo a soma de dois termos, que procuram descrever o escoamento no acidente para os regimes de escoamento laminar e turbulento perfeitamente desenvolvido. Cada um destes é função do número de Reynolds para o escoamento no canal e inclui uma constante. O termo correspondente ao escoamento laminar é formalmente idêntico à expressão do factor de fricção para o escoamento de um fluido através de um tubo cilíndrico, definida pela Equação 4.20, com uma constante diferente. Estas são obtidas por ajuste de dados experimentais, apresentando este autor os valores das constantes para diferentes acidentes usuais em sistemas envolvendo tubagens.

Wang *et al.* (1999) analisaram também o escoamento através de um meio poroso usando uma rede possuindo dois tipos de elementos. Estes autores tomaram em conta os efeitos das ligações entre os vários elementos, considerando que além da queda de pressão através dos canais da rede deveriam ser tomados em consideração os efeitos das expansões, contracções e mudanças de sentido de escoamento do fluido nas câmaras. Expressões baseadas nos mesmos princípios em que se baseou este modelo foram consideradas por estes autores, tendo sido incluída a influência das dimensões características das câmaras e canais na determinação das quedas de pressão nas expansões e contracções. O termo associado às mudanças de sentido do escoamento está associado à mistura nas câmaras, tendo sido contabilizado através da definição de uma expressão envolvendo um termo empírico, função do factor de fricção nos canais e das velocidades do fluido nos canais da rede.

A resistência total de um ramo da rede, R_j , é obtida somando os diferentes termos de resistência ao escoamento, obtendo-se a seguinte expressão geral

$$R_j = R_j^F + R_j^{EL} + R_j^{ET} = \frac{8\rho f_j q_j l_j}{\pi^2 d_j^5} + \frac{512\mu}{\pi^2 d_j^3} + \frac{8\rho q_j \sum K_j}{\pi^2 d_j^4} \quad (4.32)$$

em que $\sum K_j$ é o somatório de K_j^{in} e K_j^{out} . O primeiro termo representa a influência do escoamento nos canais e os dois últimos a influência das ligações entre câmaras e canais, formada por dois termos de modo a distinguir a influência das forças viscosas e inerciais. Em condições de regime laminar nos canais, o primeiro termo da equação anterior pode ser expresso pela Equação 4.21, sendo possível associar os dois primeiros termos e obter a seguinte expressão

$$R_j = R_j^F + R_j^{EL} + R_j^{ET} = \frac{128\mu}{\pi^2 d_j^4} (\pi l_j + 4d_j) + \frac{8\rho q_j \sum K_j}{\pi^2 d_j^4} \quad (4.33)$$

Os valores de $\sum K_j$ podem ser estimados usando correlações disponíveis na literatura (ver Secção 4.3.2.2), aplicável apenas quando as câmaras da rede possuem um canal de entrada e saída de fluido, ou por ajuste de dados experimentais do escoamento não linear através de um meio poroso (ver Secção 4.7).

4.3.3.3 Comparação dos Modelos ICAM e FRIC

Apesar do teste final de cada um dos modelos de cálculo das resistências dos ramos da rede apenas se poder efectuar comparando os resultados previstos pelo simulador com dados experimentais, nesta secção os modelos ICAM e FRIC para o cálculo de R_j são analisados, comparando qualitativamente as características do escoamento através de um meio poroso com o comportamento de R_j em função do caudal através do canal. Além deste aspecto, também é possível determinar as condições em que é válida a utilização de expressões simplificadas dos vários modelos, em particular quando é que as forças inerciais são significativas em comparação com as forças viscosas.

Como se pretende comparar apenas a resistência de um ramo da rede, de acordo com a Figura 4.4, é necessário considerar somente um conjunto de valores para D_i , d_j , l_j e θ . Os valores seleccionados não foram escolhidos aleatoriamente, mas, estão de acordo com os valores

obtidos experimentalmente para as dimensões características dos elementos da rede (Payatakes *et al.*, 1973a; Chan e Ng, 1988). O conjunto de valores vai ser também utilizado como base na análise do comportamento do simulador hidrodinâmico em função das características geométricas e estruturais da rede, a efectuar na Secção 4.4.3.1. Os valores médios das funções de distribuição de tamanho da rede utilizados são apresentados na Tabela 4.1. Na Secção 4.4.3.1 serão definidos outros parâmetros conforme os aspectos particulares que se pretendam estudar em maior detalhe.

Tabela 4.1 Valores médios dos parâmetros utilizados no caso de estudo.

Parâmetro	D (m)	d (m)	l_0 (m)	θ (rad)
Valor Usado	4.0×10^{-3}	2.0×10^{-3}	5.0×10^{-3}	$\pi/4$

Na Figura 4.6 são comparadas as curvas de R_j em função do valor do número de Reynolds para o canal, Re_j , para os modelos FRIC e ICAM, tendo-se usado neste último caso, cinco valores distintos de $\sum K_j$: 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0 e 3.5. É possível observar que para valores baixos de Re_j o comportamento dos dois modelos é qualitativamente similar, tendendo ambos os modelos para valores constantes de R_j . Nestas condições, o escoamento encontra-se em regime laminar, sendo a resistência dos ramos da rede independentes das condições de escoamento neste. A diferença entre os valores da resistência dos ramos da rede é igual a R_j^{EL} , o que é incluído em ICAM mas não em FRIC.

Para valores elevados de Re_j observa-se um comportamento distinto entre os dois modelos. Em particular, a zona de transição no modelo ICAM é suave e ocorre numa gama de valores de Re_j entre 10 e 1000. Nesta forma de representação, é comum considerar que o escoamento se encontra em escoamento não linear perfeitamente desenvolvido quando a curva R_j em função de Re_j é linear, em coordenadas logarítmicas. Observa-se que quanto maior for $\sum K_j$, mais rápida é a transição para escoamento não linear, o que pode ser atribuído à maior importância dos termos inerciais de R_j . No modelo FRIC, a zona de transição é abrupta e é possível observar duas zonas distintas para escoamento não linear, devido ao facto de se terem utilizado expressões distintas de f_j conforme o valor de Re_j nos canais.

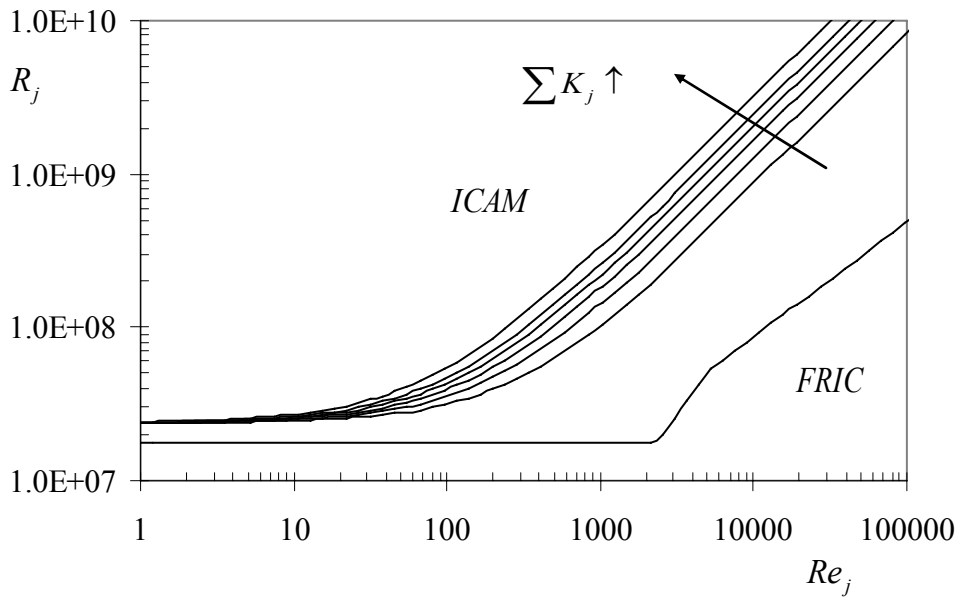


Figura 4.6 Curvas de resistência associadas a um ramo, R_j , em função do número de Reynolds do canal, Re_j , para os modelos FRIC e ICAM, variando $\sum K_j$ neste último modelo.

Uma forma análoga de representação dos resultados de R_j em função de Re_j consiste na determinação de um factor de fricção equivalente, f_{eq} . Aplicando a definição de R_j^F , Equação 4.18 (Lim e Ti, 1998), a seguinte expressão geral para f_{eq} pode ser escrita

$$f_{eq} = R_j \frac{\pi^2 d_j^5}{8 \rho q_j l_j} \quad (4.34)$$

A função f_{eq} representa o valor do factor de fricção necessário para se obter a mesma resistência ao escoamento se a fricção nos canais da rede fosse o factor dominante na resistência dos ramos da rede. Na Figura 4.7 são apresentadas as curvas de f_{eq} em função de Re_j para os modelos ICAM e FRIC, observando-se comportamento qualitativamente similar entre estes para escoamento laminar. Na zona de transição o comportamento é qualitativamente similar ao observado na Figura 4.6, observando-se uma zona de transição suave. Para valores de Re_j elevados, o valor de f_{eq} tende para um valor constante, enquanto que para o modelo FRIC se observam novamente duas zonas distintas.

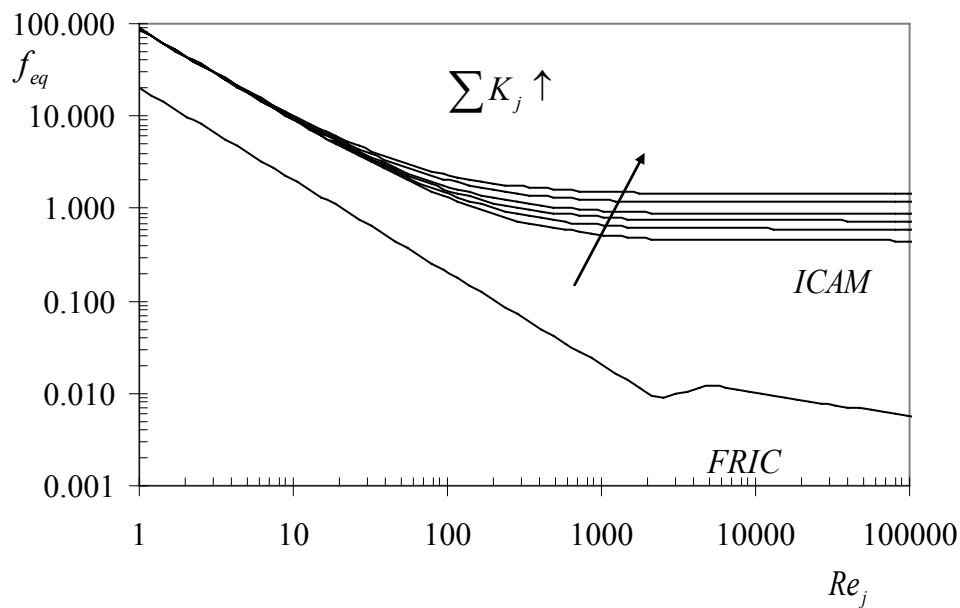


Figura 4.7 Curvas do factor de fricção equivalente, f_{eq} , em função do número de Reynolds do canal, Re_j , para os modelos FRIC e ICAM, variando $\sum K_j$ neste último modelo.

No modelo ICAM, se a velocidade do fluido através dos canais for elevada, o valor de R_j para um ramo da rede é controlado pelos termos inerciais, proporcionais a v_j^2 . Nestas condições, os valores de f_{eq} em função de Re_j devem tender para uma constante, o que se verifica. De notar que, como os valores das dimensões características dos canais não variam, é indiferente utilizar v_j ou q_j nesta análise. Esta relação de proporcionalidade não é verificada no modelo FRIC, em que diferentes relações de proporcionalidade entre ΔP_j em função de q_j levam ao aparecimento de zonas com comportamento distinto.

Comparando as curvas de f_{eq} em função de Re_j com o comportamento observado para o escoamento através de um meio poroso, observa-se um comportamento qualitativo similar. Em particular, o comportamento nas zonas de regime de transição e não linear são idênticas. Como o comportamento global da rede é o resultado do comportamento dos elementos da rede, é de se esperar que o modelo ICAM seja o mais adequado na modelização do escoamento através de um meio poroso.

4.3.3.4 Influência dos Parâmetros da Rede

Nos modelos ICAM e FRIC o parâmetro mais importante é o diâmetros dos canais, dado que em qualquer caso, R_j é inversamente proporcional a d_j^4 na zona de escoamento linear. A mesma dependência é observada para os termos inerciais. Apenas quando o escoamento nos canais está na zona de transição é que se perde esta proporcionalidade, dependendo da expressão de f_j usada. De acordo com os resultados apresentados na secção anterior, em condições de escoamento não linear os termos inerciais são dominantes, podendo-se considerar que a influência do diâmetro do canal é válida para toda a gama de valores do número de Reynolds no modelo ICAM.

O comprimento dos canais, l , apenas influencia R_j^F . De acordo com as expressões apresentadas na Secção 4.3.1, R_j^F é directamente proporcional ao valor de l . Deste modo, apenas para escoamento em regime laminar ou puramente viscoso é que variações em l influenciam R_j . Em condições de escoamento não linear, a influência das variações locais de l é desprezável, visto que os termos inerciais são dominantes nestas condições. No entanto, qualquer que seja o modelo de escoamento considerado, o valor de d_j é o factor dominante, visto que a dependência nesse parâmetro é maior.

Por outro lado, apesar do modelo de descrição do comportamento hidrodinâmico de um meio poroso poder ser utilizado independentemente da sua natureza, devido às hipóteses consideradas na implementação do modelo geométrico, este será utilizado em particular em leitos de enchimento de partículas. Como as paredes dos canais são formadas pelas partículas que formam o meio poroso, é natural admitir que o valor médio do comprimento dos canais é igual ao diâmetro médio das partículas, D_p . Na realidade, devido à estrutura irregular do leito de enchimento, não existe somente um único valor mas sim uma distribuição de valores, definida em torno de um valor médio da mesma ordem de grandeza de D_p , não sendo de esperar no entanto uma distribuição larga de valores.

Se esta hipótese for válida, então o valor da resistência ao escoamento de um leito de enchimento aumentará com o aumento do diâmetro médio das partículas que o constituem, se ε for constante. No entanto, observa-se experimentalmente a situação oposta. O aumento de D_p provoca o aumento de d , resultando numa diminuição do valor da resistência dos ramos

da rede. Como o segundo efeito é mais forte que o primeiro, o resultado final é a redução da resistência macroscópica do leito de enchimento, como seria de esperar.

Uma situação diferente ocorre quando a distribuição dos diâmetros dos canais, d_j , possui um valor elevado do desvio padrão. De acordo com o algoritmo de geração da rede, a distribuição dos comprimentos dos canais, l_j , possui também um valor elevado de desvio padrão. No entanto, devido à dependência linear entre R_j e l_j , a influência dos canais com comprimento mais elevado vai ser compensada pelos canais com menor comprimento. Por outro lado, em relação ao diâmetro dos canais, são os canais com os valores mais baixos de d_j que contribuem principalmente para a resistência macroscópica ao escoamento através de um meio poroso.

4.3.4 Cálculo do Vector de Fontes de Corrente

Como já se referiu na Secção 4.2.2, o vector q^s permite considerar as fontes de tensão e de corrente associadas aos ramos da rede. Como no modelo proposto se admite que as fontes de corrente não têm influência no escoamento, este vector pode ser obtido directamente por aplicação da Equação 4.8. Independentemente do modelo, o vector ΔP^s inclui os efeitos da gravidade e do gradiente de pressões macroscópico imposto na rede e que representa a força motora para o escoamento do fluido. Os dois efeitos são incluídos no modelo de escoamento de forma distinta. O gradiente de pressão macroscópico é incluído no simulador na forma de fontes de tensão aplicadas nos canais de entrada do fluido.

O modelo tem a possibilidade de incluir ou não as fontes de tensão devido à acção da gravidade no escoamento. Os valores destes termos são independentes das condições de escoamento, mas dependem do modelo de cálculo de R_j^{ET} considerado. Para o modelo ICAM, é usada a seguinte equação para calcular o termo Δp_j^s , sendo a influência das câmaras considerada indirectamente

$$\Delta p_j^s = \rho g \left(l_j + \sum_{k=1}^2 \frac{D_i^k}{2} \right) \cos \theta \quad (4.35)$$

Para o modelo FRIC, como a influência das câmaras não é tomada em conta, a Equação 4.15 deve ser considerada no cálculo de Δp_j^s .

4.3.4.1 Rede com Distribuição Pontual de Tamanhos

Nas duas secções anteriores foi descrito o modelo geral válido qualquer que seja a distribuição de tamanhos dos elementos que constituem a rede. Para a situação em que esta distribuição é pontual, ou seja, as dimensões características dos elementos da rede são constantes, a estrutura da rede permite a inclusão dos termos das fontes de tensão devido à acção da gravidade numa forma simples.

O modelo de redes implementado implica uma distância constante entre os centros das câmaras ligadas por canais oblíquos ou horizontais. De acordo com a Equação 4.15, os termos de tensão nos canais dependem apenas de l_j . Como as distribuições das dimensões características da rede são pontuais, os valores das fontes de tensão associados a cada um dos elementos da rede são iguais. Pelas mesmas razões, os termos das fontes de tensão associados às câmaras são iguais.

É possível então tomar em conta estas fontes de tensão corrigindo a diferença de potencial imposta à rede, evitando a determinação dos valores dos termos de tensão para cada um dos elementos da rede. Utilizando as Equações 4.15 e 4.35, a expressão seguinte pode ser escrita para a diferença de potencial corrigida, ΔP_T^C , aplicada na rede

$$\Delta P_T^C = \Delta P_T + (N_x + 1)\rho g(l + D)\cos\theta \quad (4.36)$$

A expressão anterior é válida para o modelo ICAM, em que todos os efeitos são tomados em consideração. Para o modelo FRIC, a Equação 4.36 pode ser simplificada, obtendo-se a seguinte expressão

$$\Delta P_T^C = \Delta P_T + (N_x + 1)\rho g l \cos\theta \quad (4.37)$$

4.4 Implementação do Algoritmo de Simulação

A resolução do sistema de equações definido na forma matricial pela Equação 4.9 permite obter os valores dos potenciais nos nós da rede, equivalentes às pressões absolutas exercidas no interior das câmaras. A estratégia mais adequada para resolver o sistema de equações depende sobretudo da natureza do sistema e do modelo seleccionado para o cálculo de R_j , em particular quando as condições de escoamento são não lineares. Nas secções seguintes é

apresentado e analisado o algoritmo implementado e a forma como são tratados os resultados obtidos nas simulações.

4.4.1 Caso geral

Após determinar os elementos da matriz Y e do vector q^s , o perfil de pressões no interior das câmaras é obtido resolvendo o sistema de equações dado pela Equação 4.9. De modo a obter a solução de forma eficiente, é importante tomar em conta as suas propriedades.

Independentemente das condições impostas ao gerador da rede e ao simulador hidrodinâmico, o sistema de equações é simétrico e esparso. Cada linha da matriz dos coeficientes Y possui no máximo sete elementos não nulos, ocorrendo esta situação para uma rede com canais horizontais e fronteiras periódicas. Como as dimensões características dos elementos da rede são descritas por funções densidade de probabilidade, os resultados obtidos pelo simulador hidrodinâmico são estatisticamente válidos desde que as redes possuam um número elevado de elementos. O número de elementos a partir dos quais os resultados são estatisticamente válidos depende sobretudo das características da estrutura geométrica da rede e das funções densidade de probabilidade usadas (Constantinides e Payatakes, 1989). As condições em que os resultados das simulações são válidos são discutidas nas Secções 4.5.3, 4.5.4, 4.5.5 e 4.5.6. Como para redes com elevado número de elementos quase todos os elementos de Y são nulos, o algoritmo a implementar deve tomar em conta este aspecto, de modo a evitar efectuar um número excessivo de cálculos com elementos nulos (Pruess *et al.*, 1992).

A natureza do sistema de equações a resolver depende do modelo seleccionado para o cálculo de R_j e das condições impostas ao simulador hidrodinâmico, em particular as condições limite entre os vários regimes de escoamento. Se os valores de R_j forem independentes de q_j , característico do regime laminar de escoamento, o sistema de equações é linear. Suchomel *et al.* (1998a) mostraram que a matriz de coeficientes do sistema, além de simétrica e esparsa, também é positiva definida, o que permite utilizar métodos iterativos eficientes para a resolução do sistema de equações linear. Neste caso foi utilizada a rotina *DSRIS* da biblioteca científica *ESSL* (IBM), que usa o método de *generalized steepest descent* que toma em conta a natureza simétrica da matriz de coeficientes.

O valor limite de Re_j a partir do qual o sistema deixa de ser linear é dependente do modelo seleccionado para o cálculo dos valores de R_j . Para o modelo FRIC, o valor limite depende

da função de interpolação utilizada para o cálculo de f_j na zona de transição, sendo 2300 para a função de interpolação linear e 1586 para o polinómio de Tchebyshev. Para o modelo ICAM não é possível atribuir um valor rigoroso para o valor limite de Re_j . Ao contrário dos limites impostos para o modelo FRIC, os valores limite podem ser definidos pelo utilizador no simulador hidrodinâmico, podendo o valor mais adequado depender das condições de escoamento e das características geométricas da rede. Se $Re_j < 1$ o comportamento dos dois modelos é equivalente (ver Figura 4.6) pelo que se assume que abaixo desse valor os valores de R_j^{ET} podem ser desprezados.

Caso os termos inerciais sejam significativos, o sistema de equações é não linear, sendo resolvido usando um método de ponto fixo. Como os termos de resistência não linear, R_j^{ET} , são função de q_j , é necessário definir uma estimativa inicial dos valores dos caudais nos canais da rede. Uma vez não ser possível na prática saber se o sistema de equações é ou não linear a partir do valor imposto de ΔP_T , das características geométricas da rede e do modelo de cálculo de R_j seleccionado, o algoritmo assume para a primeira iteração que o escoamento se dá em escoamento laminar em todos os elementos da rede. Desse modo os valores de R_j^{ET} são nulos e o sistema de equações é linear. Após a determinação dos valores dos caudais nos canais, a partir dos valores de Re_j é possível determinar se as condições para a ocorrência de escoamento em regime laminar são verificadas em todos os ramos da rede. Caso afirmativo, o simulador hidrodinâmico termina o processo iterativo.

Caso contrário, os valores obtidos de q_j são utilizados para recalcular os valores de R_j , usando agora as expressões completas do modelo de cálculo R_j seleccionado. Deste modo, os valores de R_j^{ET} representam termos de correcção aos valores previstos pelo modelo FRIC, sendo estes cada vez mais importantes quanto maior for o caudal volumétrico através da rede. A partir dos valores corrigidos de R_j , um novo sistema de equações lineares é obtido, que permite determinar os valores corrigidos de q_j . Deste modo, os valores de R_j vão sendo corrigidos de forma sucessiva iteração a iteração, resolvendo-se sempre sistemas de equações lineares em cada uma destas.

O critério de paragem do método implementado é definido pela expressão

$$\frac{\sum_{j=1}^{N_{can}} (q_j^k - q_j^{k-1})^2}{\sum_{j=1}^{N_{can}} (q_j^k)^2} < \varepsilon_{tol} \quad (4.38)$$

em que k se refere ao número da iteração e ε_{tol} é a tolerância máxima imposta ao processo iterativo, sendo este valor imposto pelo utilizador. Na Figura 4.8 é apresentado o diagrama de fluxo do algoritmo implementado no simulador hidrodinâmico, válido independentemente do regime de escoamento ou do modelo de cálculo de R_j assumido.

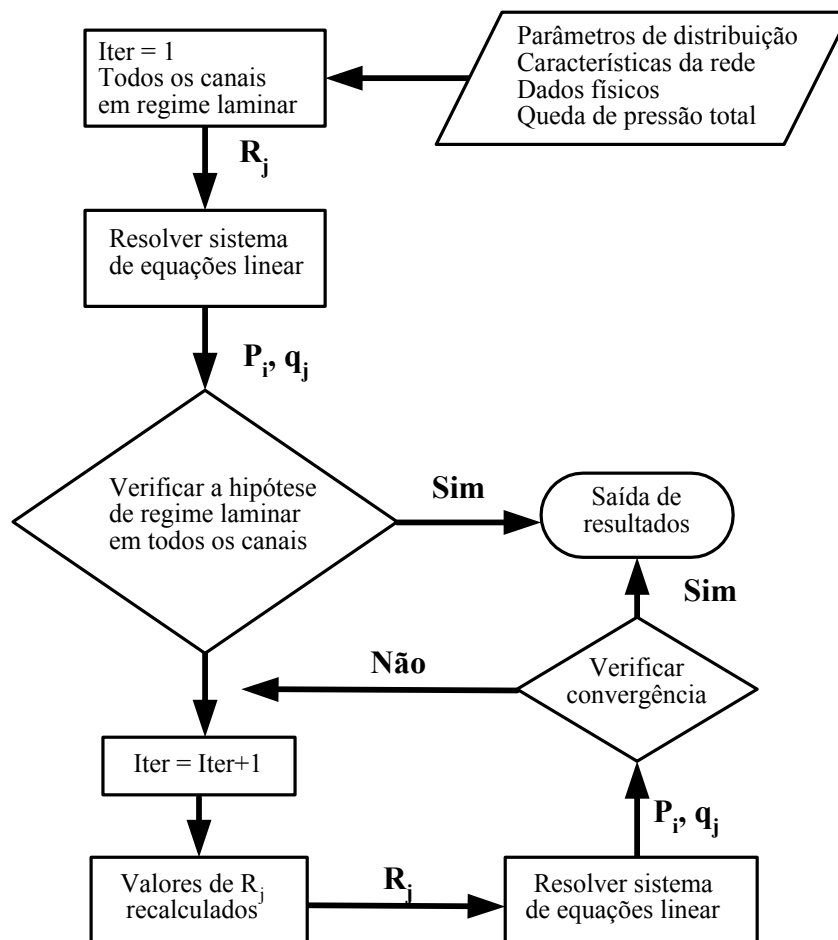


Figura 4.8 Diagrama de fluxo do algoritmo geral implementado.

Um algoritmo similar foi utilizado por Sorbie *et al.* (1989) na modelização do escoamento de fluidos não newtonianos em regime puramente viscoso através de meios porosos, utilizando uma rede bidimensional só com canais. Neste problema, os termos não lineares ocorrem também em regime laminar, visto a viscosidade do fluido ser função das características de escoamento nos canais. Como estimativa inicial, Sorbie *et al.* (1989) utilizaram o perfil de escoamento para fluidos newtonianos em regime laminar, corrigindo sucessivamente os

valores de viscosidade conforme as características de escoamento nos canais. O desempenho do algoritmo proposto foi satisfatório em todos os casos analisados por estes autores.

Sahimi (1993) e Wang *et al.* (1999a) analisaram o escoamento não linear de fluidos através de um meio poroso usando modelos de redes, tendo resolvido o sistema de equações não lineares pelo método de Newton-Raphson. Apesar deste método ser aquele com as características de convergência mais rápidas (Chapra e Canale, 1992), necessita de uma boa estimativa inicial para convergir. Na maior parte dos casos não é possível obter uma boa estimativa do campo de escoamento ao nível local, devido à forte dependência do escoamento na estrutura da rede, limitando a aplicabilidade deste método. Shah e Yortsos (1995) utilizaram um método de sobrerelaxação sucessiva, para a modelização do escoamento de fluidos não newtonianos através de um meio poroso. Este não necessita de uma estimativa tão boa como no método de Newton-Raphson para a sua implementação e é mais robusto.

A simplicidade da implementação do método de iteração de ponto fixo foi outra das razões consideradas na selecção do método de resolução do sistema de equações de balanço não linear. Apesar do método de Newton-Raphson ser mais eficiente numericamente (Chapra e Canale, 1992), é de implementação mais complexa, requerendo a determinação da matriz jacobiana da matriz de coeficientes do sistema de equações. Por outro lado, como ambos os métodos requerem a resolução de um sistema de equações lineares em cada uma das iterações e se observou bom comportamento numérico no método de iteração de ponto fixo, foi preferido este.

4.4.1.1 Questões na Implementação do Algoritmo de Simulação

O sistema de equações lineares obtido em cada iteração do algoritmo é resolvido por um método iterativo, que requer uma estimativa inicial da solução. Duas situações distintas podem ocorrer em relação à estimativa inicial a introduzir na rotina de resolução do sistema de equações lineares.

Como na primeira iteração ainda não é conhecida nenhuma estimativa do perfil de pressões nas câmaras, assume-se que este é uma função linear de x no sentido principal de escoamento, sendo a pressão absoluta no interior nas câmaras da mesma linha uniforme. Esta hipótese implica que a diferença de pressão entre duas linhas quaisquer da rede é sempre a mesma. A segunda situação ocorre quando o processo iterativo requer mais do que uma

iteração para convergir. Como um perfil de pressões já se encontra disponível da iteração anterior, este é utilizado directamente na rotina para a resolução do sistema.

Observou-se em todos os casos analisados pelo simulador hidrodinâmico que a resolução do sistema de equações correspondente à primeira iteração é a que requer mais tempo de CPU. Nas restantes simulações, o tempo necessário para a obtenção da solução do sistema de equações de balanço material é bastante inferior, mesmo em situações em que o escoamento através da rede é não linear. Apesar de ser possível ocorrerem modificações apreciáveis do campo de escoamento ao longo do processo iterativo, as características do campo de escoamento obtido na primeira iteração já são representativos das características do campo de escoamento na rede.

Outro aspecto importante na descrição do escoamento é a forma como devem ser calculados os elementos da matriz dos coeficientes e do vector dos termos independentes. A rotina de resolução do sistema de equações lineares utiliza apenas os elementos não nulos do sistema de equações. Esta requer que, além dos valores destes, também seja dada a posição dos mesmos na matriz de coeficientes. Para que a determinação destes seja eficiente, é necessário saber como é que a estrutura da rede e as hipóteses consideradas na sua geração podem ser tomadas em conta. No Apêndice B.4 estes aspectos são analisados em detalhe.

4.4.2 Tratamento dos Resultados das Simulações

A resolução do sistema de equações que descreve o escoamento tem como resultado os valores da pressão absoluta nas câmaras, podendo depois ser determinados os valores dos caudais nos canais, através da relação entre o caudal e a diferença de pressões entre as câmaras da rede.

Na Secção 4.7.3, os resultados obtidos pelo simulador vão ser comparados com dados experimentais publicados na literatura. Como é mais fácil caracterizar experimentalmente o escoamento através de um meio poroso analisando o seu comportamento macroscópico, na literatura são quase sempre apresentados os valores de permeabilidade, das constantes de McDonald, ou outros parâmetros que permitem caracterizar os diferentes regimes de escoamento e a transição entre estes (McDonald *et al.*, 1979; Kim, 1985; Comiti e Renaud, 1989; Kececioglu e Jiang, 1994).

O valor da permeabilidade, k , pode ser calculado não tendo em conta os valores de R_j^{ET} e impondo escoamento laminar nos canais da rede. Estas condições podem ser obtidas no simulador hidrodinâmico impondo uma queda de pressão suficientemente baixa, de modo que a que todos os valores de Re_j sejam inferiores ao valor imposto como limite entre os regimes de escoamento linear e não linear. De acordo com a comparação entre os valores de R_j efectuada na Figura 4.6, os valores limite de Re_j entre 0.1 e 1 são valores adequados para assegurar que os efeitos das forças inerciais são desprezáveis, embora para o modelo FRIC, valores até 2300 possam ser usados. No entanto, devido ao termo R_j^{EL} , os valores de k previstos pelo modelo ICAM são diferentes dos previstos pelo modelo FRIC. Para a rede bidimensional, a permeabilidade pode ser calculada a partir da seguinte expressão

$$k = \frac{q_T \mu L_X}{A_N \Delta P_T} = \frac{q_T \mu L_X}{L_Y E_R \Delta P_T} \quad (4.39)$$

O valor de q_T , caudal total de fluido que atravessa a rede, pode ser determinado somando os caudais volumétricos nos canais de saída da rede. A Equação 4.39 é obtida directamente da equação de Darcy (ver Secção 2.3.2.1). Como esta equação é definida em termos da velocidade superficial do fluido, igual ao caudal volumétrico sobre a área de secção recta total disponível para o escoamento, fica claro porque se torna necessário definir um valor para a espessura da rede, embora este parâmetro não seja necessário para descrever o campo de escoamento na rede.

As constantes A e B da equação de McDonald são determinadas a partir das curvas da queda de pressão em função do caudal volumétrico total através da rede. A sua determinação pode ser efectuada mais facilmente representando os resultados usando as duas formas propostas por Ergun (1952) (ver Secção 2.3.4.3), sendo estas também as mais usadas na literatura (Bird *et al.*, 1960). Estas baseiam-se na definição de três grupos adimensionais: F_V , F^* e Re^* , definidos pelas expressões

$$F^* = \frac{\Delta P_T D_P \varepsilon^3}{L_X \rho v_T^2 (1 - \varepsilon)} \quad (4.40)$$

$$F_V = \frac{\Delta P_T D_P^2 \varepsilon^3}{L_X \mu v_T (1 - \varepsilon)^2} \quad (4.41)$$

$$Re^* = \frac{\rho v_T D_P}{\mu(1-\varepsilon)} \quad (4.42)$$

Os parâmetros adimensionais F_V e F^* representam respectivamente um factor de fricção e uma queda de pressão para o escoamento através de um meio poroso, e Re^* é um número de Reynolds modificado pela inclusão da porosidade do meio poroso. Para as duas formas de representação, a Equação de MacDonald pode ser escrita na forma

$$F^* = \frac{A}{Re^*} + B \quad (4.43)$$

$$F_V = A + BRe^* \quad (4.44)$$

Em qualquer dos casos, a representação dos resultados ou dados experimentais em termos de F_V e F^* em função de Re^* permite estimar as constantes A e B da equação de MacDonald analisando o comportamento nas zonas de escoamento linear e não linear perfeitamente desenvolvido. Para a forma F^* em função de Re^* um ajuste linear na zona de escoamento linear permite determinar A e o valor limite para valores elevados de Re^* permite determinar B . Situação oposta ocorre para a forma F_V em função de Re^* , em que B é obtido através de um ajuste linear na zona de escoamento não linear e o valor limite na zona de escoamento linear é igual ao valor de A . Ergun (1952) recomendou a utilização da segunda forma por ser mais fácil a determinação de ambas as constantes, em particular B . Na Secção 4.5.2 ambas as estratégias são analisadas e comparadas com o objectivo de se determinar qual é a mais adequada na representação dos resultados e na determinação dos valores das constantes A e B .

A permeabilidade e a constante A da equação de MacDonald são dois parâmetros que caracterizam o escoamento linear através de um meio poroso. Tomando em conta as equações de definição, é fácil mostrar que ambos os parâmetros estão relacionados pela expressão (ver Apêndice B.5 para a dedução da mesma)

$$A = \frac{1}{k} \frac{D_P^2 \varepsilon^3}{(1-\varepsilon)^2} \quad (4.45)$$

A expressão anterior prevê que os valores da permeabilidade e da constante A da Equação de MacDonald são inversamente proporcionais. Este resultado era esperado visto que quanto

maior a resistência de um meio poroso menor é a sua permeabilidade mas mais elevado é A , de acordo com a Equação 4.43, em que quanto maior A mais elevado é F_v , parâmetro equivalente a um factor de fricção modificado.

No entanto, a Equação 4.45 prevê que a constante A é função do diâmetro médio equivalente das partículas que formam o meio poroso (em particular o leito de enchimento). Este resultado é contrário ao esperado de que A deve ser essencialmente independente das características das partículas que formam o meio poroso e dependente apenas da porosidade e das dimensões características dos elementos que caracterizam o meio a um nível local. Nas secções seguintes esta questão será analisada

4.4.3 Rede Uniforme

O algoritmo descrito na secção anterior é independente das características geométricas da rede e do regime de escoamento. No entanto, no projecto de processos ou unidades envolvendo meios porosos pode não ser possível aplicá-lo, por não se disporem de capacidades de cálculo suficientes para a sua implementação ou não existirem dados respeitantes à estrutura do meio poroso em estudo. Por outro lado, em vez dos valores de queda de pressão é mais comum conhecerem-se os valores dos caudais volumétricos numa unidade de processo. O método proposto permite resolver este problema através da determinação da curva da queda de pressão em função do caudal, o que exige a execução de um conjunto elevado de simulações para a obtenção desta.

Dispor de um modelo que permita a obtenção das características do escoamento sem a necessidade de se resolverem sistemas de equações tem portanto interesse prático, sendo esta a estratégia preferida no projecto de unidades ou processos envolvendo meios porosos. De acordo com a geometria da rede e com o modelo hidrodinâmico considerado neste trabalho, é possível determinar analiticamente o comportamento para uma rede com as características seguintes:

- as distribuições de dimensões características dos elementos da rede são pontuais, ou seja, o diâmetro das câmaras e dos canais é constante, assim como o comprimento dos canais;
- o número de coordenação é igual para todas as câmaras da rede, implicando que as fronteiras da rede têm de ser periódicas.

Se uma rede verificar as condições anteriores diz-se uma *rede uniforme* e o seu comportamento hidrodinâmico pode ser determinado analiticamente. Para se chegar às expressões pretendidas, o escoamento numa rede uniforme é analisado partindo de uma rede com uma só linha de câmaras, até ao ponto em que se pode deduzir uma expressão geral pelo método da indução matemática. Na obtenção das expressões, as fontes de tensão associadas às câmaras da rede são desprezadas, visto que, como se mostrou na Secção 4.3.4.1., numa rede uniforme estas podem ser associadas ao gradiente macroscópico de pressões.

Na Figura 4.9 é apresentada uma câmara genérica da linha de entrada de fluido na rede. Devido à hipótese de a rede ser uniforme, qualquer das câmaras vai possuir pelo menos dois canais, independentemente destas possuírem ou não canais horizontais associados.

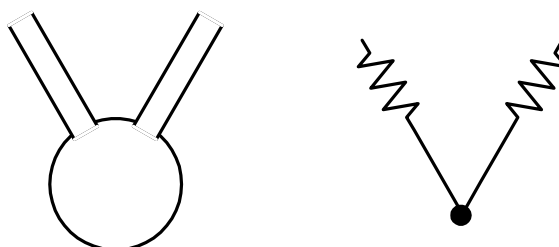


Figura 4.9 Exemplo de uma câmara e do respectivo análogo eléctrico com dois canais na linha de entrada do fluido na rede.

Como se assume que a pressão na zona antes da entrada é constante e uniforme, e ambos os canais estão ligados a um nó comum, a queda de pressão é igual em ambos os canais. Por outro lado, R_j é uma função monótona crescente de q_j para todos os modelos o que implica que o caudal volumétrico nos dois canais tem de ser o mesmo.

Esta conclusão é válida apenas para uma câmara na linha de entrada de fluido. Para mostrar que os caudais volumétricos em todos os canais de entrada do fluido na rede são iguais, é necessário tomar em conta a linha de câmaras a seguir à linha do topo. De modo a simplificar a análise, sem perda de generalidade, vai-se considerar a estrutura apresentada na Figura 4.10, com o correspondente análogo eléctrico.

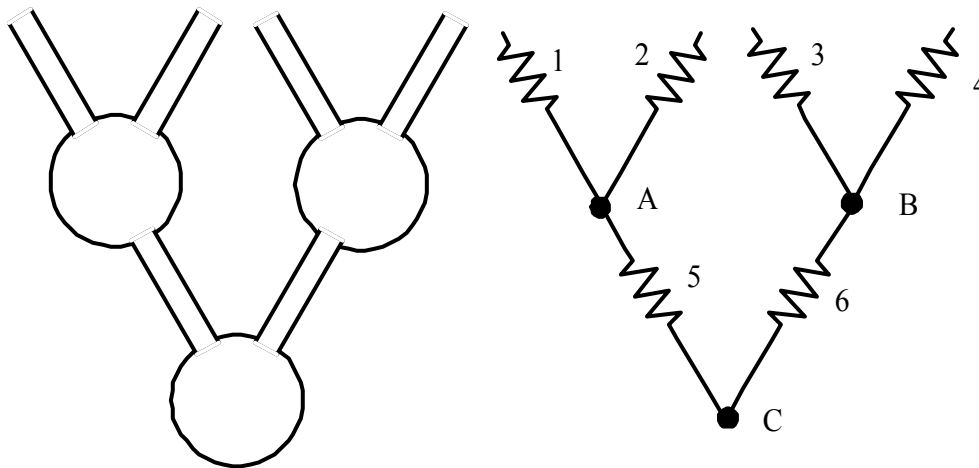


Figura 4.10 Estrutura local da rede e análogo eléctrico utilizado para mostrar que os caudais nos canais de entrada são todos iguais.

De acordo com o resultado anterior, os caudais nos canais de entrada devem verificar as condições $q_1 = q_2$ e $q_3 = q_4$, implicando $R_1 = R_2$ e $R_3 = R_4$. Se for assumido que os valores das resistências R_1 e R_3 são diferentes, os caudais volumétricos em cada um dos pares de canais de entrada deverá ser diferente. Como a resistência num ramo da rede é proporcional ao caudal volumétrico através deste e as características geométricas destes estão fixadas, assumir que $q_1 \neq q_3$ implica que $P_A \neq P_B$. Em particular, quanto maior for o caudal num canal, maior será a perda de carga neste e menor será a pressão absoluta no seu extremo final. Por exemplo, $q_1 < q_3$ implica $P_A > P_B$. A partir dos balanços materiais efectuados nas câmaras A e B , é possível concluir que $q_5 < q_6$, implicando que $R_6 > R_5$ e maior queda de pressão associada ao ramo da rede com índice 6. Logo, a pressão na câmara C vai depender do trajecto que o fluido toma entre a entrada e esta. Como nos extremos dos canais 5 e 6, associados à câmara C , a pressão tem de ser igual, a situação considerada é fisicamente impossível.

A única forma dos valores previstos de P_C serem iguais é admitir que $q_1 = q_3$, o que implica que os caudais nos canais de entrada da rede da Figura 4.10 são iguais. Como não se assumiu qualquer hipótese para o posicionamento relativo dos canais na rede, a conclusão é válida para todos os canais oblíquos de entrada do fluido da rede. Como a queda de pressão nos canais de entrada é a mesma em todos, a pressão absoluta nas câmaras na linha de entrada é também a mesma.

A estrutura simplificada da rede representada na Figura 4.10 não é representativa das redes que são usadas na simulação do escoamento e do transporte de massa num meio poroso. No

entanto, a sua estrutura geométrica simplificada permite tirar conclusões acerca da influência da presença de canais horizontais no escoamento através de uma rede uniforme e prever quais serão as características qualitativas e quantitativas do campo de escoamento numa rede uniforme, importante para a aplicação do método de indução matemática.

Em relação à influência da presença de canais horizontais, partindo-se da Figura 4.10, vai-se adicionar um canal horizontal a ligar as câmaras A e B , como se mostra na Figura 4.11.

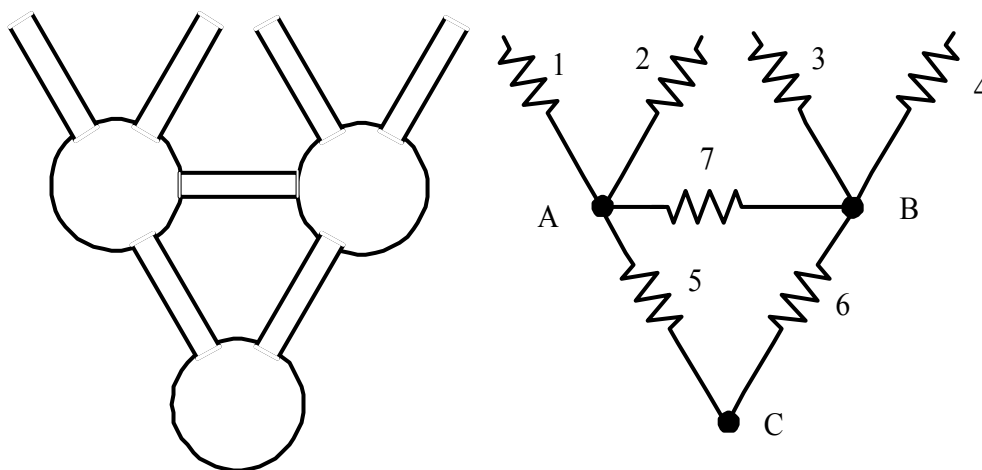


Figura 4.11 Estrutura simplificada da rede de câmaras e canais utilizada para determinar a influência dos canais horizontais no escoamento através de uma rede uniforme.

Admitindo que q_7 não é igual a zero e que o fluido se desloca de A para B , da equação de balanço material aplicado na câmara B , q_6 vai ser superior a q_5 , resultando numa pressão absoluta à saída do canal 6 inferior à pressão absoluta na saída do canal 5. Este excesso na queda de pressão no canal 6 pode ser compensado reduzindo q_3 e q_4 , o que implica que $q_1 > q_3$ (não esquecer que os caudais em cada um dos pares de canais oblíquos na linha com duas câmaras apresentada na Figura 4.10 são iguais). Deste modo, $P_A < P_B$, visto que o caudal do fluido nos canais 1 e 2 é maior. Esta relação implica que o escoamento através do canal 7 deverá ser da câmara B para a câmara A , o que contradiz a hipótese feita atrás de que o escoamento se faz no sentido contrário. Assumir o sentido contrário para o escoamento no canal 7 conduz também a uma contradição, pelo que apenas a situação em que q_7 é igual a zero é que é fisicamente correcta. Assim, os canais horizontais na rede apenas influenciam o escoamento através dos valores dos parâmetros geométricos da rede, como por exemplo a sua espessura equivalente.

Apesar da célula fundamental usada na geração da rede possuir características distintas das estruturas das redes apresentadas na Figura 4.10 e na Figura 4.11, estas também podem ser usadas para gerar uma rede uniforme com quaisquer dimensões. Deste modo, a análise do escoamento numa rede uniforme é possível partindo da entrada do fluido até à saída do fluido analisando sucessivamente partes da rede com a estrutura apresentada na Figura 4.10 e Figura 4.11,

Com base nas conclusões obtidas nos estudos anteriores, já é possível definir quais são as características principais para o escoamento de um fluido através de uma rede uniforme.

- As pressões absolutas no interior das câmaras na mesma linha da rede são iguais. Como consequência, os caudais nos canais horizontais são nulos.
- O caudal nos canais oblíquos da rede é constante e independente da posição relativa do canal na rede. Como consequência, a diferença de pressões entre duas câmaras em linhas de câmaras contíguas é constante e independente da sua posição na rede.
- Para redes com fronteiras não periódicas, como se pode observar na Figura 3.4, as condições de entrada não são uniformes, em particular nos lados da rede. Apesar de ser possível obter o mesmo valor de queda de pressão para a câmara com um canal de entrada, não é possível, por balanço material, ter caudais iguais nos canais de saída, resultando num perfil de caudais e pressões não uniforme.

O método de indução matemática vai ser agora utilizado para mostrar que, desde que a rede seja uniforme, o campo de escoamento possui as propriedades listadas atrás. Ao aplicar este método no problema em consideração, mostra-se primeiro que o escoamento numa rede uniforme com uma linha de câmaras verifica as condições apresentadas. Se a primeira condição for verdadeira, assume-se que uma rede com N_x linhas também se comporta do mesmo modo, e procura-se mostrar que também é o caso de uma rede com $N_x + 1$ linhas.

Na Figura 4.12 é apresentado um exemplo de uma rede com apenas uma linha de câmaras. De acordo com a análise efectuada anteriormente para linha de canais de entrada de fluido na câmara, os caudais nos canais das linhas em que o fluido entra e sai da rede têm de ser iguais. Deste modo, os valores da pressão absoluta nas câmaras têm de ser iguais, resultando em caudais nulos nos canais horizontais.

Assume-se agora que os caudais nos canais de entrada podem ser diferentes. Como a queda de pressão é proporcional ao caudal, a pressão absoluta nas câmaras da linha de entrada vai ser tanto menor quanto maior o caudal nos canais que estão associados a estas. Como os caudais de saída são função dos caudais de entrada por efeitos de balanço material, os maiores valores de queda de pressão vão-se encontrar associados às câmaras com valores menores de pressão absoluta. Deste modo, observam-se valores distintos de queda de pressão diferentes conforme o trajecto do fluido, o que contraria a hipótese de pressão de saída da rede uniforme. Apenas quando os caudais na rede são iguais é que a perda de carga é independente do trajecto, implicando também que esta tem de ser igual nas duas linhas de canais da rede apresentada na Figura 4.12.

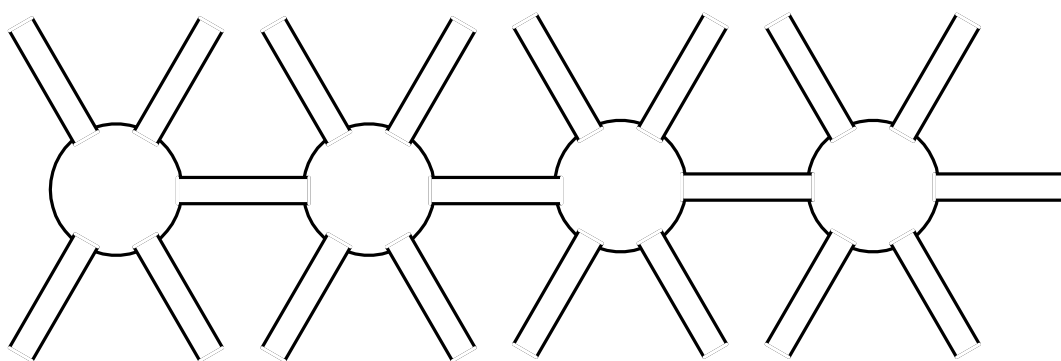


Figura 4.12 Rede com uma linha de câmaras.

Assume-se agora que as características do escoamento que acabaram de ser descritas são aplicáveis a uma rede com N_x linhas e vai-se analisar qual é a influência da inclusão de mais uma linha na rede. Deste modo, a rede passa a possuir $N_x + 1$ linhas.

Assumindo que os caudais na linha de canais oblíquos entre as linhas de câmaras de índices N_x e $N_x + 1$ podem ser diferentes, então os valores das pressões absolutas nas câmaras da linha de índice $N_x + 1$ não vão ser todos iguais, dependendo dos caudais dos canais associados a cada uma delas. Os valores das pressões absolutas são inversamente proporcionais ao caudal total que entra em cada uma das câmaras. No entanto, nos canais de saída, por balanço material, obtém-se caudais mais elevados, resultando em quedas de pressão maiores para os canais de saída do fluido da rede. Como a pressão exterior na saída é constante, apenas quando os caudais de saída forem iguais é que os valores de pressão à saída de todos os canais vão ser iguais. A equação de conservação de massa escrita para cada uma das câmaras implica que cada câmara recebe a mesma quantidade de fluido. Isto associado à

condição de igual pressão nas câmaras da linha $N_x + 1$, implica iguais caudais de entrada, o que está de acordo com a hipótese enunciada para uma rede com N_x linhas de câmaras.

Como as duas condições do método de indução matemática foram verificadas, se a rede for uniforme então as características do escoamento através da rede listadas atrás são válidas e independentes das dimensões da rede. Numa rede com N_x linhas existem sempre $N_x + 1$ linhas de canais oblíquos, visto que existe uma linha de canais adicionais entre a última linha de câmaras e a saída do fluido. Esta característica da rede observa-se independentemente da natureza da rede. Como a queda de pressão entre cada linha de câmaras é constante e o comportamento hidrodinâmico nos canais da linha extra do fundo da rede é idêntico ao das outras linhas de canais, a seguinte expressão pode ser escrita

$$\Delta p_j = \frac{\Delta P_T}{N_x + 1} \quad (4.46)$$

em que Δp_j é a queda de pressão entre os extremos de dois canais da rede. Como os caudais nos canais oblíquos são iguais e nos canais horizontais são nulos, o caudal volumétrico nos canais, q_j , pode ser calculado a partir da expressão

$$q_j = \frac{q_T}{2N_y} \quad (4.47)$$

A expressão traduz também o facto de, numa rede uniforme, o fluido se distribuir uniformemente na rede. Usando a Equação 4.3 e substituindo nesta as Equações 4.47 e 4.46, é possível obter a seguinte expressão geral

$$\Delta P_T = (N_x + 1)R_j q_j \quad (4.48)$$

A equação anterior pode ser obtida da análise da estrutura geral da rede e pela aplicação da analogia com um circuito eléctrico. Entre duas linhas, a diferença de potencial é fixada e existem $2N_y$ resistências iguais em paralelo. Por definição, estas resistências podem ser substituídas por uma resistência equivalente, R_{eq} , definida pela expressão

$$\frac{1}{R_{eq}} = \frac{2N_y}{R_j} \quad (4.49)$$

em que foi usado o facto de R_j ser igual para todos os canais oblíquos entre as duas linhas de câmaras. De acordo com a equação anterior, para uma rede uniforme é possível utilizar R_{eq} , podendo a perda de carga entre duas linhas de câmaras contíguas ser escrita na forma

$$\Delta p_j = R_{eq} q_T = R_j \frac{q_T}{2N_y} \quad (4.50)$$

Como a queda de pressão total na rede, ΔP_T , é a soma da queda de pressão em todas as linhas de canais oblíquos, a seguinte relação pode ser escrita entre Δp_j e ΔP_T

$$\Delta P_T = \sum_{j=1}^{N_x+1} \Delta p_j = (N_x + 1) \Delta p_j = (N_x + 1) R_j \frac{q_T}{2N_y} \quad (4.51)$$

Da equação anterior é possível concluir que o comportamento de uma rede uniforme pode ser descrito a partir do comportamento de um ramo da rede associado a um canal oblíquo da rede. Utilizando as expressões de cálculo da resistência de um ramo da rede apresentadas na Secção 4.3.3 é possível determinar expressões analíticas para a queda de pressão através de uma rede de câmaras e canais, conhecido q_T . Para a situação oposta em que é conhecido ΔP_T , a resistência de um ramo é função de q_j . A Equação 4.51 continua a ser válida, mas, q_j é determinado resolvendo uma equação algébrica, que pode ou não ser linear conforme as características do escoamento através dos canais.

Uma das características interessantes deste caso limite é que todos os canais oblíquos se encontram no mesmo regime de escoamento. Deste modo, a análise do comportamento previsto para R_j em função das características geométricas dos ramos da rede, efectuada na Secção 4.3.3.3, pode ser utilizada para caracterizar qualitativamente o escoamento numa rede uniforme.

4.4.3.1 Cálculo dos Parâmetros Conhecido o Valor de Caudal Volumétrico Total

Se q_T for conhecido é possível aplicar directamente a Equação 4.51 no cálculo de ΔP_T , devendo as expressões de cálculo de R_j considerar o modelo seleccionado e as características do escoamento através deste.

Para o modelo FRIC, três regimes de escoamento devem ser tomados em consideração, de acordo com o modelo descrito na Secção 4.3.1. Para cada um dos regimes de escoamento, as

expressões que permitem o cálculo de q_T são apresentadas na Tabela 4.2. Para o regime de transição foi utilizada a função de interpolação linear, pois como os valores previstos pelas duas expressões de interpolação na zona de transição prevêem valores idênticos de f_j , esta permite a obtenção de expressões mais simples. Para regime turbulento, apenas é considerada a Equação 4.22 na determinação de f_j , que é a única explícita no factor de fricção.

Tomando em conta estes aspectos, são apresentadas na Tabela 4.2 as expressões que permitem determinar ΔP_T conhecidos q_T e os valores médios do diâmetro e do comprimento dos canais da rede, usando a Equação 4.51.

Tabela 4.2 Cálculo de ΔP_T para o modelo FRIC em função do regime de escoamento nos canais.

Regime de Escoamento	$\Delta P_T =$
Laminar	$64 \frac{N_x + 1}{N_y} \frac{\mu l}{\pi d^4} q_T$
Transição	$\frac{2\rho l(N_x + 1)}{N_y^2 \pi^2 d^5} \left(0.0195 + 7.26 \times 10^{-6} \frac{\rho q_T}{N_y \pi \mu d} \right) q_T^2$
Turbulento	$0.633 \frac{N_x + 1}{N_y^2} \frac{\rho l}{\pi^2 d^5} \left(\frac{2\rho}{N_y \pi \mu d} \right)^{-0.25} q_T^{1.75}$

Para o modelo ICAM vão existir duas transições, uma associada aos canais e definida da mesma forma que no modelo FRIC e outra associada às ligações entre as câmaras e os canais. Para esta última situação, é possível definir duas zonas, uma para escoamento linear, equivalente ao regime laminar nos canais e outra para escoamento não linear, traduzida pela dependência dos valores de R_j^{ET} nos valores de q_j . Apesar de ser possível definir seis combinações entre os diferentes regimes de escoamento nos elementos da rede, de acordo com os resultados apresentados na Secção 4.3.3.3, apenas quatro combinações são válidas para o escoamento através da rede de câmaras e canais. Em particular, é possível ter escoamento em regime laminar nos canais e comportamento não linear para o escoamento através das ligações entre as câmaras e os canais da rede. Contudo, não é possível obter escoamento não linear nos canais e comportamento linear do escoamento através das ligações, como se pode concluir da Figura 4.6, comparando as curvas de R_j em função de Re_j previstas para os modelos FRIC e ICAM.

Na Tabela 4.3 são apresentadas as expressões obtidas para cada uma das combinações possíveis de regime de escoamento com base no modelo ICAM. De notar que a indicação dos regimes da Tabela 4.3 se refere primeiro ao regime observado no canal seguido do regime observado nas ligações entre câmaras e canais.

Tabela 4.3 Cálculo de ΔP_T para o modelo ICAM em função do regime de escoamento nos canais.

Regime Escoamento	$\Delta P_T =$
Laminar/Linear	$64 \frac{N_x + 1}{N_y} \frac{\mu}{\pi^2 d^4} (\pi l + 4d) q_T$
Laminar/Não Linear	$\frac{N_x + 1}{N_y \pi^2 d^4} \left[64 \mu (\pi l + 4d) + \frac{2 \rho q_T}{N_y} \sum K_j \right] q_T$
Transição/Não Linear	$\frac{N_x + 1}{N_y \pi^2 d^3} \left\{ 256 \mu + \frac{\rho}{N_y d} \left[2 \sum K_j + \frac{0.039 l}{d} \right] q_T + \frac{1.45 \times 10^{-5} \rho^2 l}{N_y^2 \pi d^3 \mu} q_T^2 \right\} q_T$
Turbulento/Não Linear	$\frac{N_x + 1}{N_y \pi^2 d^3} \left\{ 256 \mu + \frac{\rho}{N_y d} \left[\frac{0.633 l}{d} \left(\frac{2 \rho q_T}{N_y \pi \mu d} \right)^{-0.25} + 2 \sum K_j \right] q_T \right\} q_T$

4.4.3.2 Cálculo dos Parâmetros Conhecido o Valor da Queda de Pressão Total

A situação oposta à descrita na secção anterior envolve a determinação de q_T conhecido ΔP_T . Esta estratégia é similar à situação observada no algoritmo geral implementado neste trabalho. De acordo com a Equação 4.51, no cálculo de R_j é necessário conhecer q_j . Como as expressões de R_j em função de q_j são não lineares, excepto para regime laminar, o caudal através de um ramo da rede é obtido resolvendo a seguinte equação

$$\frac{\Delta P_T}{N_x + 1} = R_j(q_j) q_j \quad (4.52)$$

Como $q_T = 2N_y q_j$, a resolução da equação anterior é suficiente para determinar as características do escoamento na rede uniforme. No caso geral, a Equação 4.52 pode ser expressa na forma

$$0 = a_0 + a_1 q_j + a_2 q_j^2 + a_3 q_j^3 + a_4 q_j^{1.75} \quad (4.53)$$

em que a_0 , a_1 , a_2 , a_3 e a_4 dependem do modelo considerado para o cálculo de R_j e das hipóteses consideradas para o escoamento em cada um destes.

A constante a_0 está associada à perda de carga através do meio poroso e é independente do modelo considerado, sendo definida pela expressão

$$a_0 = -\frac{\Delta P_T}{N_x + 1} \quad (4.54)$$

As restantes constantes dependem do modelo utilizado no cálculo de R_j e das condições de escoamento nos elementos da rede, tendo-se seguido a mesma estratégia da secção anterior. Na Tabela 4.4 e Tabela 4.5 são apresentadas as expressões de cada uma das constantes da Equação 4.53, com excepção de a_0 , para os vários modelos de cálculo de R_j considerados neste trabalho.

Tabela 4.4 Expressões das constantes a_1 , a_2 , a_3 e a_4 para o modelo FRIC.

Constante	Regime Escoamento		
	Laminar	Transição	Turbulento
a_1	$\frac{128\mu l}{\pi d^4}$	----	----
a_2	----	$\frac{0.156\rho l}{\pi^2 d^5}$	----
a_3	----	$\frac{1.16 \times 10^{-4} \rho^2 l}{\pi^3 d^6 \mu}$	----
a_4	----	----	$\frac{0.3164\rho l}{\pi^2 d^5} \left(\frac{4\rho}{\pi d \mu} \right)^{-0.25}$

Tal como no algoritmo geral, o conhecimento do valor de ΔP_T não permite saber à partida qual o regime de escoamento observado nos canais da rede e o comportamento das interligações entre as câmaras e os canais. De modo a calcular q_j assume-se inicialmente quais são os regimes de escoamento que podem ocorrer e resolve-se a Equação 4.53. De seguida, Re_j é determinado e comparado com as gamas de valores correspondentes aos regimes de escoamento assumidos. Se as condições não forem verificadas, deve-se assumir

outro conjunto de regimes de escoamento até que o valor de q_j verifique todas as condições impostas.

Tabela 4.5 Expressões das constantes a_1 , a_2 , a_3 e a_4 para o modelo ICAM.

Regime	Constantes			
	a_1	a_2	a_3	a_4
Laminar/ Linear	$\frac{128\mu l}{\pi^2 d^4}(\pi l + 4d)$	----	----	----
Laminar/ Não Linear	$\frac{128\mu l}{\pi^2 d^4}(\pi l + 4d)$	$\frac{8\rho}{\pi^2 d^4} \sum K_j$	----	----
Transição/Não Linear	$\frac{512\mu}{\pi^2 d^3}$	$\frac{8\rho}{\pi^2 d^5} \left(\sum K_j \frac{d}{l} + 0.0195 \right)$	$\frac{1.16 \times 10^{-4} \rho^2 l}{\pi^3 \mu d^6}$	----
Turbulento/Não Linear	$\frac{512\mu}{\pi^2 d^3}$	$\frac{8\rho}{\pi^2 d^4} \sum K_j$	----	$\frac{2.53\rho l}{\pi^2 d^5} \left(\frac{4\rho}{\pi d \mu} \right)^{-0.25}$

4.4.3.3 Expressões teóricas dos parâmetros macroscópicos para redes uniformes

As expressões obtidas nas duas subsecções anteriores para ΔP_T e q_T em função das características geométricas da rede e dos seus elementos podem ser usadas para determinar expressões analíticas para k e as constantes A e B . A sua dedução, que é feita em detalhe no Apêndice B.5, requer também a utilização das expressões para os parâmetros geométricos que caracterizam a rede de elementos a nível macroscópico, como por exemplo L_X e E_R , obtidas para o modelo de redes e apresentadas no Capítulo 3. Nesta secção será também analisado o comportamento qualitativo previsto pelo modelo de redes quando os parâmetros que caracterizam a rede de elementos são determinados pelo modelo geométrico (ver Secção 3.5), em particular a possível dependência no valor de D_p .

A permeabilidade, desprezando o volume associado às calotes e assumindo redes grandes, para redes uniformes com $C = 4$ e $C = 6$ pode ser expressa pelas expressões (ver Apêndice B.5)

$$k \approx \frac{\pi}{16} \frac{[(l+D)\cos\theta]^2 d^2 \varepsilon}{\left[\frac{2}{3} \frac{D^3}{d^2} + 2l(\sin\theta+1) + (2\sin\theta-1)D \right] (\pi d + 4d)}, \quad C=6 \quad (4.55)$$

$$k \approx \frac{\pi}{32} \frac{[(l+D)\cos\theta]^2 d^2 \varepsilon}{\left(\frac{1}{3} \frac{D^3}{d^2} + l \right) (\pi d + 4d)}, \quad C=4 \quad (4.56)$$

As expressões obtidas dependem apenas das características da rede e dos seus elementos. Ao contrário do esperado, a permeabilidade não depende somente dos valores médios das dimensões características dos elementos da rede: d , D e l ; mas também é função da estrutura geométrica da rede através do parâmetro θ . A dependência esperada de k proporcional a d^2 (Dullien, 1992; Guyon, 2005) ainda se pode observar mas depende dos valores dos restantes parâmetros geométricos. É possível observarem-se dependências da permeabilidade em função dos outros parâmetros diferentes e função dos valores relativos dos diferentes parâmetros. Estas previsões do modelo devem-se à inclusão de um segundo tipo de elementos na rede, sendo analisadas em detalhe na Secção 4.5.6.2.

Usando o modelo geométrico é possível determinar qual é a dependência da permeabilidade em função de D_p e de ε . Os valores médios das dimensões características dos elementos da rede são proporcionais ao valor de D_p , sendo as constantes de proporcionalidade função apenas da porosidade. Por outro lado, para os modelos T1S e T2S o parâmetro θ é uma função apenas de ε . Substituindo as relações gerais por exemplo na Equação 4.56 válida para uma rede uniforme com $C=4$ obtém-se a seguinte expressão após simplificação

$$k \approx \frac{\pi}{32} \frac{[(K_l + K_D)\cos\theta]^2 K_d^2 \varepsilon}{\left(\frac{1}{3} \frac{K_D^3}{K_d^2} + K_l \right) (\pi K_l + 4K_D)} D_p^2 \quad (4.57)$$

Observa-se que o modelo de redes/geométrico prevê uma dependência linear de k em função de D_p^2 . Para uma rede uniforme com $C=6$ a dedução é em tudo idêntica e igual dependência é observada. Este resultado está de acordo com o comportamento esperado de um meio poroso, que é de quanto maior é D_p maior será a permeabilidade do meio poroso.

Para a constante A as expressões obtidas para k permitem simultaneamente obter também expressões para esse parâmetro e esclarecer as questões sobre a dependência de A em função

de D_p . Usando as Equações 4.45, 4.55 e 4.56, novamente para redes grandes e não tomando em conta o volume associado às calotes, obtém-se as seguintes expressões

$$A \approx \frac{16}{\pi} \frac{\left[\frac{2}{3} \frac{D^3}{d^2} + 2l(\sin \theta + 1) + (2 \sin \theta - 1)D \right] (\pi l + 4d)}{[(l + D) \cos \theta]^2 d^2} \left(\frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon} \right)^2 D_p^2, \quad C = 6 \quad (4.58)$$

$$A \approx \frac{32}{\pi} \frac{\left[\frac{1}{3} \frac{D^3}{d^2} + l \right] (\pi l + 4d)}{[(l + D) \cos \theta]^2 d^2} \left(\frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon} \right)^2 D_p^2, \quad C = 4 \quad (4.59)$$

Usando as relações de proporcionalidade previstas pelo modelo geométrico para as expressões obtidas para redes uniformes, as seguintes expressões são obtidas após simplificação

$$A \approx \frac{16}{\pi} \frac{\left[\frac{2}{3} \frac{K_D^3}{K_d^2} + 2K_l(\sin \theta + 1) + (2 \sin \theta - 1)K_D \right] (\pi K_l + 4K_d)}{[(K_l + K_D) \cos \theta]^2 K_d^2} \left(\frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon} \right)^2, \quad C = 6 \quad (4.60)$$

$$A \approx \frac{32}{\pi} \frac{\left[\frac{1}{3} \frac{K_D^3}{K_d^2} + K_l \right] (\pi l + 4d)}{[(K_l + K_D) \cos \theta]^2 K_d^2} \left(\frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon} \right)^2, \quad C = 4 \quad (4.61)$$

Notar que se assume que θ é apenas uma função de ε . A relação anterior mostra que ambas as expressões são independentes de D_p . Este resultado está de acordo com as propostas de MacDonald *et al.* (1979) de que este parâmetro deverá permitir descrever o comportamento do escoamento através de um meio poroso independentemente das características das partículas que o constituem.

Em relação à constante B , as seguintes expressões são obtidas para redes uniformes, assumindo-se que as redes são grandes (pelo menos no sentido principal de escoamento) e desprezando o volume associado às calotes

$$B \approx 288 \frac{\sum K_j}{d^4} \frac{(2D^3 + 6d^2l + 3d^2l_h)^2}{[(l + D) \cos \theta]^3} \frac{D_p \varepsilon}{(1 - \varepsilon)}, \quad C = 6 \quad (4.62)$$

$$B \approx 288 \frac{\sum K_j}{d^4} \frac{(2D^3 + 6d^2l)^2}{[(l+D)\cos\theta]^3} \frac{D_p \varepsilon}{(1-\varepsilon)}, \quad C = 4 \quad (4.63)$$

em que $l_h = 2l(\sin\theta + 1) + (2\sin\theta - 1)D$. As expressões são similares, apenas diferindo num dos termos do numerador pela inclusão do comprimento dos canais horizontais, l_h , quando a rede uniforme tem um número de coordenação médio igual a 6. Como foi feito para a constante A , aplicando as constantes de proporcionalidade é possível mostrar que B também deverá ser independente de D_p . Por exemplo, para $C = 4$ a seguinte expressão é obtida

$$B \approx 288 \frac{\sum K_j}{K_d^4} \frac{(2K_d^3 + 6K_d^2 K_l)^2}{[(K_l + K_D - 2K_h)\cos\theta]^3} \left(\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} \right), \quad C = 4 \quad (4.64)$$

A expressão obtida está de acordo com a ideia de que, tal como A , B é também um parâmetro adimensional que descreve o comportamento de um meio poroso independentemente das características que o constituem. Por outro lado, a Equação 4.64 prevê que B é uma função linear de $\sum K_j$. Representando B uma medida qualitativa da resistência ao escoamento do fluido, como quanto maior for $\sum K_j$ maior será a resistência do fluido então B vai aumentar também, em acordo com a previsão feita pela Equação 4.64.

4.5 Análise de Sensibilidade

As características geométricas e as distribuições das dimensões dos elementos da rede influenciam o comportamento do simulador hidrodinâmico. A análise de sensibilidade permite determinar quais são as condições em que os valores previstos pelo simulador hidrodinâmico são representativos e qual é a influência das características geométricas da rede e dos seus elementos.

Nas Secções 3.6 e 3.7 foi analisada a influência das características geométricas e das distribuições dos tamanhos dos elementos da rede nos valores geométricos da rede. Como o número de parâmetros e condições a analisar é muito elevado, apenas foram estudados aqueles considerados mais significativos. Como se assume que o comportamento hidrodinâmico de um meio poroso real é função das características locais da sua estrutura, considerou-se neste trabalho que os parâmetros mais significativos para a estrutura da rede também o são para a caracterização do comportamento hidrodinâmico. Deste modo, a estratégia seguida nas Secções 3.6 e 3.7 foi também a aplicada nesta secção, embora com

algumas alterações. Em particular, deve-se determinar qual dos modelos para o cálculo da resistência dos ramos da rede é o mais adequado (ver Secção 4.5.1), e qual é a melhor forma de caracterizar o comportamento hidrodinâmico da rede ao nível macroscópico e como estes parâmetros são determinados eficientemente (ver Secção 4.5.2).

Os resultados apresentados nesta secção têm por base os valores dos parâmetros apresentados na Tabela 4.1, tendo-se usado para os conjuntos de valores do desvio padrão os casos considerados na Secção 3.7. Na maior parte das simulações efectuadas assumiu-se que $\theta = \pi/4$ e $l = 0.007m$, sendo apenas referido o valor destes parâmetros quando um valor diferente tiver sido considerado.

4.5.1 Análise dos Modelos para o Cálculo de R_j

Um dos aspectos fundamentais na descrição do escoamento através da rede e consequentemente de um meio poroso real, é encontrar a forma mais correcta para determinar o valor da resistência dos ramos da rede ao escoamento. O objectivo desta secção é determinar qual dos dois modelos propostos (ver Secção 4.3.3) é o mais adequado para a descrição do comportamento hidrodinâmico da rede, quando comparado com o comportamento qualitativo observado num meio poroso real.

Assumindo que as conclusões são independentes das características da rede, foram efectuadas simulações em redes tipo 00 com $N_x = N_y = 100$, sem remoção de canais e/ou câmaras, para $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$. Apenas se impôs a condição de $d_j < D_i$, $d/D = 0.5$ com $\varepsilon = 0.4$, sendo os restantes parâmetros estatísticos obtidos da Tabela 4.1. Para permitir a comparação qualitativa dos resultados obtidos com a equação de MacDonald, assumiu-se que o diâmetro médio das partículas era igual ao comprimento médio dos canais, o que, de acordo com os valores previstos pelo modelo geométrico, é uma aproximação razoável da realidade. Como as distribuições das dimensões características dos elementos são aleatórias, várias simulações foram efectuadas para diferentes sementes do gerador de números aleatórios, de modo a permitir a obtenção de valores médios válidos. Nesta secção são apresentados os valores médios de 12 simulações.

Na Figura 4.13 são apresentadas as curvas de ΔP_T em função de q_T para os modelos ICAM e FRIC, tendo-se usado $\sum K_j = 1.5$ para o modelo ICAM. De notar que, de acordo com os resultados da Figura 4.6, o comportamento qualitativo do modelo ICAM não depende de

$\sum K_j$. Observam-se diferenças significativas entre os valores previstos pelos dois modelos. Em particular, observa-se que para igual valor de ΔP_T , o caudal previsto pelo modelo FRIC é superior, sobretudo na zona de escoamento não linear. De acordo com a Figura 4.6, nessa zona de escoamento os valores de R_j são muito inferiores aos obtidos com o modelo ICAM. Desta forma, a resistência total da rede ao escoamento é menor, traduzindo-se em valores de q_T superiores no modelo FRIC para iguais valores de ΔP_T . As conclusões são independentes do valor de $\sum K_j$ assumido para o modelo ICAM, visto que as curvas de R_j em função de Re_j para os ramos da rede possuem o mesmo comportamento qualitativo, como se pode observar na Figura 4.6.

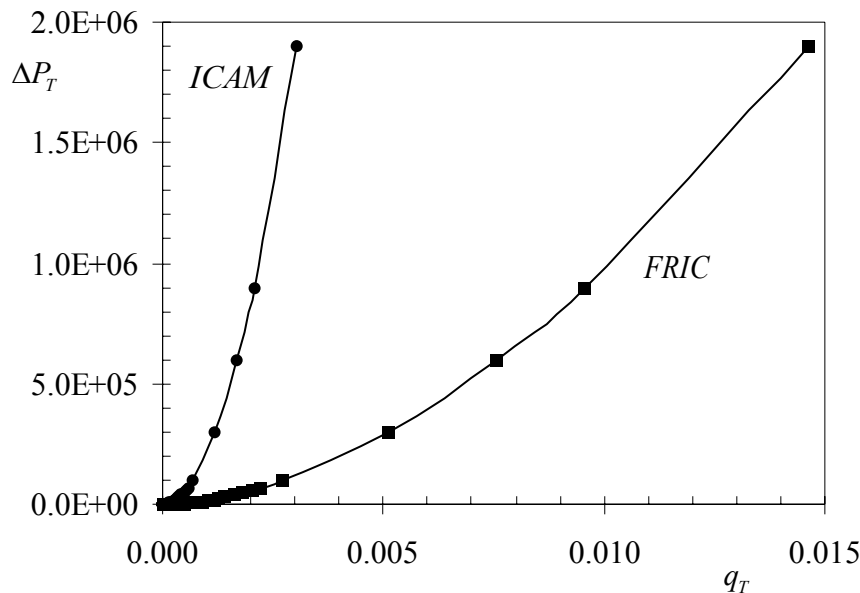


Figura 4.13 Comparação das curvas de ΔP_T em função de q_T entre os modelos FRIC e ICAM.

Comparando a Figura 4.6 e a Figura 4.13 observa-se o mesmo comportamento qualitativo, o que justifica as conclusões apresentadas de que as características do comportamento hidrodinâmico da rede podem ser previstas com base na análise do comportamento de um ramo da rede. Este deve-se encontrar associado a um canal oblíquo, visto serem estes os elementos dominantes para a descrição do escoamento através da rede.

A forma de representar os resultados utilizada na Figura 4.13 apenas permite obter conclusões para regime de escoamento não linear. Para analisar o comportamento nas zonas de escoamento linear e de transição, deve ser usada uma forma diferente de representação. Na Secção 2.3.4.3 descreveram-se várias formas distintas de representar o comportamento de

meios porosos com base em grupos adimensionais. Estas permitem uma análise mais adequada da zona de escoamento linear e da transição para escoamento não linear. Na literatura foram propostas diferentes formas de representação (Ergun, 1952; Fand *et al.*, 1987; Kececioglu e Jiang, 1994). A maior parte destas baseia-se na observação de que em regime de escoamento não linear a queda de pressão através do meio é proporcional a q_T^2 , sendo possível desprezar os termos proporcionais a q_T correspondentes a escoamento linear. Deste modo, fazendo a representação dos resultados na forma $\Delta P_T / L_X q_T$ em função de q_T , obtém-se para regime linear um patamar. Quanto mais importantes forem os efeitos não lineares no escoamento mais a curva se desvia do patamar, até se obter uma dependência linear, típica de escoamento não linear perfeitamente desenvolvido. A partir do comportamento nessas zonas limite é possível estimar os valores das constantes A e B da equação de McDonald.

Na Figura 4.14 são comparadas as curvas de $\Delta P_T / L_X q_T$ em função de q_T para os modelos ICAM e FRIC, em coordenadas logarítmicas, para as mesmas condições da Figura 4.13. Comparando as curvas obtidas com as curvas de R_j em função de Re_j , Figura 4.6, o mesmo comportamento qualitativo é observado entre os dois modelos, permitindo concluir que esta forma de representação é equivalente a representar a resistência macroscópica da rede ao escoamento.

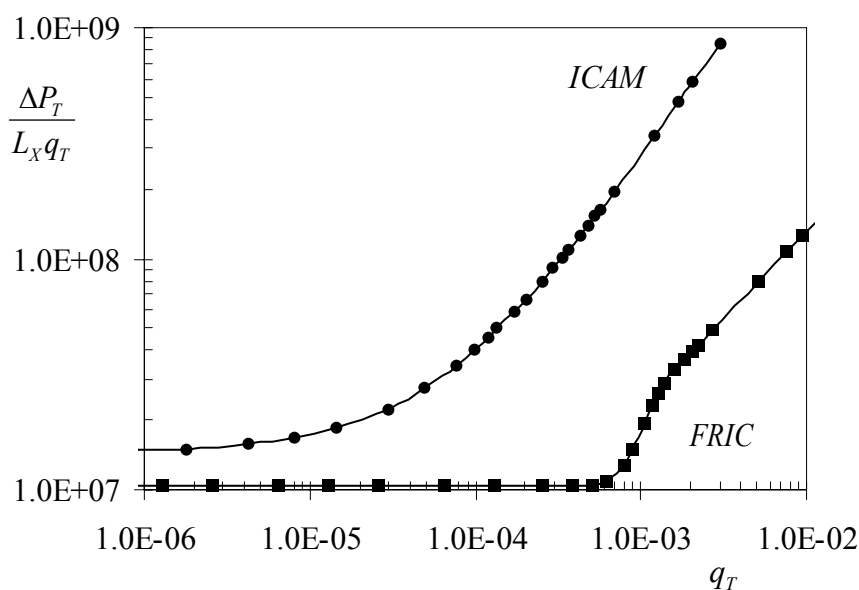


Figura 4.14 Comparação das curvas de $\Delta P_T / L_X q_T$ em função de q_T para os modelos ICAM e FRIC.

As diferenças observadas entre as duas figuras são devidas à existência de mais do que um ramo na rede e à necessidade de se tomar também em conta os efeitos das características geométricas e das distribuições das dimensões características dos elementos da rede.

Na Figura 4.15 são apresentadas as curvas previstas pelos modelos ICAM e FRIC nas formas F_V em função de Re^* . Comparando as curvas obtidas com a Figura 4.14, observa-se o mesmo comportamento qualitativo, o que era previsível visto que F_V e $\Delta P_T/L_X q_T$ são formas distintas de representar a queda de pressão total através de um meio poroso. Como a forma F_V em função de Re^* se baseia em grupos de variáveis adimensionais, esta é preferida para a comparação de dados experimentais ou obtidos pelo simulador hidrodinâmico.

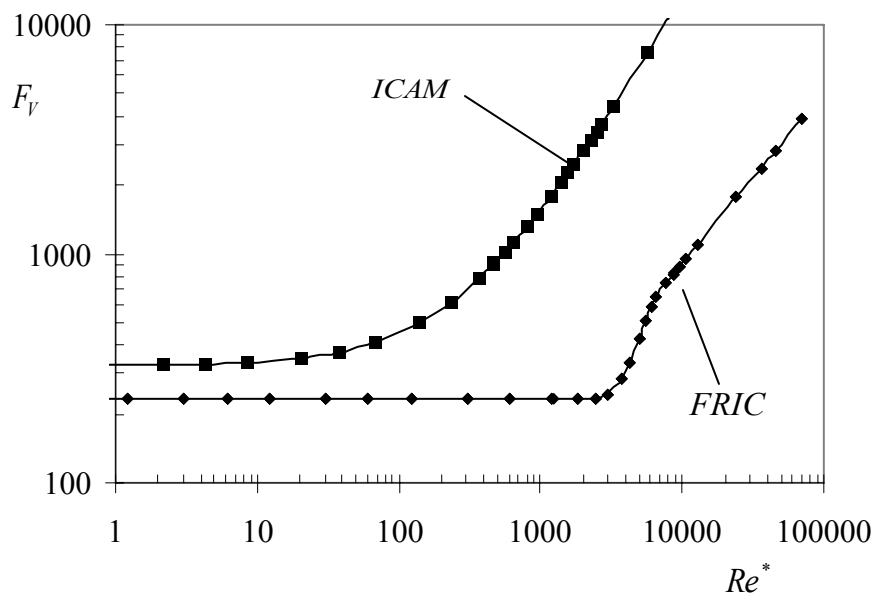


Figura 4.15 Comparação das curvas de F_V em função de Re^* para os modelos ICAM e FRIC.

Na Figura 4.16 são apresentadas as curvas de F^* em função Re^* obtidas pelos dois modelos, sendo comparadas com os valores previstos pela equação de Ergun usando os valores das constantes propostas por MacDonald *et al.* (1989). Como se observa também na Figura 4.15, o comportamento dos dois modelos é distinto. Para o modelo FRIC, observa-se a transição entre regime linear e não linear de escoamento para valores de Re^* muito superiores aos previstos pelo modelo ICAM. Apenas neste modelo a gama de valores em que se verifica a transição se encontra dentro dos valores previstos pela equação de Ergun. Além deste aspecto, no modelo FRIC observam-se transições abruptas entre os diferentes regimes de escoamento e

duas zonas distintas na zona de escoamento não linear. Apesar de alguns autores (Fand *et al*, 1987; Kececioglu e Jiang, 1994) terem verificado experimentalmente a existência de mais do que uma zona de escoamento não linear, a transição entre estas nunca é abrupta como a que se observa para o modelo FRIC.

Para as condições usadas nos resultados apresentados na Figura 4.16, observa-se concordância quantitativa entre os valores previstos com base no modelo ICAM e a equação de Ergun. Apesar dos parâmetros usados para a obtenção dos resultados apresentados na Figura 4.16 poderam não ser representativos de um meio poroso real, o comportamento qualitativo observado permite concluir que apenas o modelo ICAM permite uma descrição adequada do comportamento de um meio poroso.

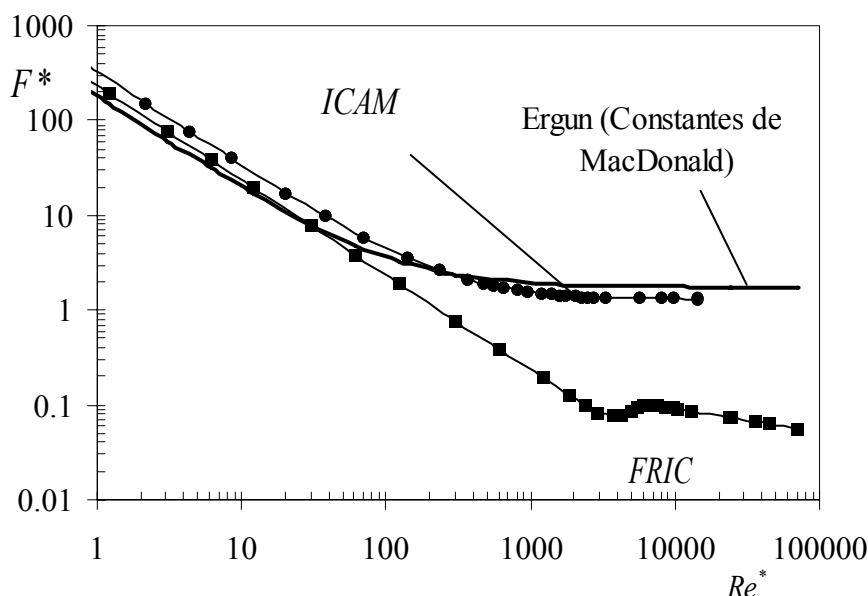


Figura 4.16 Comparação das curvas de F^* em função de Re^* para os modelos ICAM e FRIC.

Comparando com as curvas de f_{eq} em função de Re_j apresentadas na Figura 4.7, verifica-se que são qualitativamente similares. Esta concordância reforça a conclusão de que a descrição adequada do comportamento de um ramo da rede permite a caracterização qualitativa do escoamento na rede, após a inclusão dos efeitos da estrutura da rede.

Os resultados apresentados nesta secção permitem concluir que o modelo ICAM é o mais adequado para a descrição do comportamento hidrodinâmico dos ramos da rede. A comparação entre os resultados apresentados na Figura 4.15 e na Figura 4.6 permitem concluir também que para descrever o comportamento para regime de escoamento não linear

não é necessário chegar a valores de Re_j que exijam a utilização da Equação 4.23. Em regime de escoamento não linear, os termos R_j^{ET} são dominantes e a alteração de comportamento devido à mudança da expressão usada para calcular f_j é pouco significativa, como se observa na Figura 4.15 em que nenhuma alteração pode ser evidenciada para $Re^* \approx 2000$.

Por outro lado, os resultados mostram também que a correlação de $\sum K_j$ baseada em expressões teóricas e correlações apresentadas na literatura, sendo os parâmetros da rede determinados com base nos modelos geométricos, não é adequada. Em particular, para valores de porosidade na vizinhança de 0.4 (correspondentes ao leito de enchimento regular ORT), o valor previsto de $\sum K_j$ tende para zero. Nessas condições, a resistência dos ramos ao escoamento é dominada pela fricção do fluido nos canais. De acordo com os resultados apresentados na Figura 4.15, experimentalmente seriam observáveis duas zonas para escoamento não linear (Fand *et al.*, 1993, Kececioglu *et al.*, 1994), o que não se verifica. Conclui-se então que $\sum K_j$ deve ser uma função de outros parâmetros da rede além dos diâmetros das câmaras e dos canais. Este aspecto será analisado nas Secções 4.7.2 e 4.7.3.

Em relação à forma de representação mais adequada, não é possível obterem-se conclusões mais detalhadas. Na secção seguinte é analisada qual das duas formas propostas para a representação dos valores previstos pelo simulador é a mais adequada na determinação dos valores das constantes A e B .

4.5.2 Determinação das Constantes da Equação de MacDonald

Diferentes estratégias foram propostas na literatura para a determinação dos valores das constantes A e B da equação de MacDonald (Ergun, 1952; McDonald *et al.*, 1979; Kim, 1985; Lage *et al.*, 1997) com base nas duas formas de representação dos resultados descritas na secção anterior. Estas podem ser divididas em duas classes, conforme os valores das constantes são determinadas: i) com base na análise do comportamento nas zonas limites de escoamento quando os resultados são apresentados em coordenadas logarítmicas, ou ii) ajustando a equação de MacDonald aos dados disponíveis através do método dos mínimos quadrados.

Nas secções seguintes vai-se determinar qual a estratégia mais adequada para a determinar os valores de A e B . São usados os resultados das simulações apresentados nas secções

anteriores, assim como dados experimentais para o escoamento através de um leito de enchimento. De notar que, de acordo com as conclusões anteriores respeitantes ao modelo de cálculo da resistência dos ramos da rede, apenas se considera o modelo ICAM.

4.5.2.1 Estratégia Baseada num Ajuste em Coordenadas Logarítmicas

Usando as definições dos grupos adimensionais F^* e Re^* , a representação gráfica da equação de MacDonald em coordenadas logarítmicas permite a definição de duas zonas distintas, de acordo com a Equação 4.43. Em regime de escoamento linear, correspondente a valores de Re^* baixos, obtém-se uma recta com declive igual a $-A$. Para regime de escoamento não linear, os valores de F^* tendem para um valor constante em função de Re^* , sendo este igual a B . Com base no comportamento limite dos valores previstos nesta forma de representação, obtém-se $A=342.4$ e $B=1.319$. Por outro lado, ajustando os valores obtidos à equação de MacDonald usando mínimos quadrados, obtém-se $A=324.9$ e $B=1.242$. Na Figura 4.17 são apresentadas e comparadas as curvas previstas utilizando os valores das constantes determinadas pelas duas estratégias, em conjunto com os valores previstos pelo simulador hidrodinâmico, em que se verifica que as diferenças não são significativas. Apenas para a zona de escoamento não linear se verificam pequenas diferenças.

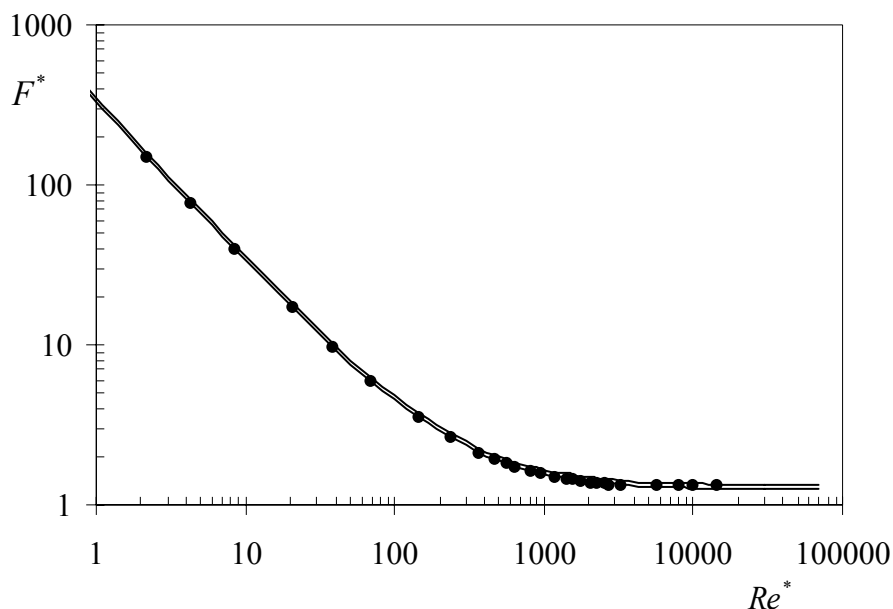


Figura 4.17 Comparação das duas estratégias de determinação das constantes A e B da equação de MacDonald para o modelo ICAM, para as curvas de F^* em função de Re^* , na zona não linear de escoamento.

As diferenças entre os valores das constantes previstos pelas duas estratégias são pequenos, sendo de 5.4% para A e de 6.2% para B . Na Figura 4.18 as duas estratégias são comparadas

novamente mas apenas para a zona não linear de escoamento. Os resultados mostram que a estratégia com base no ajuste dos dados pelos mínimos quadrados descreve melhor o comportamento dos dados na zona de transição do escoamento e o ajuste assintótico descreve melhor a zona de escoamento perfeitamente desenvolvido

As diferenças devem-se aos diferentes métodos de determinação dos valores das constantes. Como se assumem pesos iguais para os diferentes pontos no ajuste dos mínimos quadrados, e são os valores de F^* para escoamento linear os que possuem maiores valores absolutos, ao determinar as constantes estes vão ser dominantes.

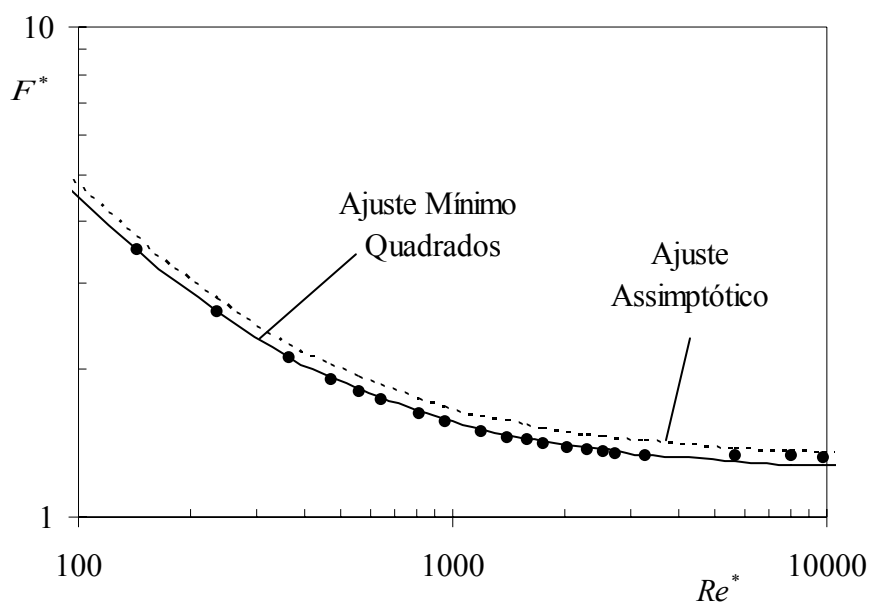


Figura 4.18 Comparação das duas estratégias de determinação das constantes A e B da equação de MacDonald para o modelo ICAM para valores elevados de Re^* , para as curvas de F^* versus Re^* .

No caso da estratégia baseada no comportamento limite dos valores, coloca-se a questão de quais são os valores limite que permitem assegurar que o comportamento assintótico foi alcançado. Para a zona de escoamento linear, assumiu-se que quando o declive entre dois pontos, em coordenadas logarítmicas for constante, o escoamento encontra-se em regime linear. Para escoamento não linear, assumiu-se que o declive entre dois pontos consecutivos é um valor muito pequeno, próximo de zero. Neste último caso, verificou-se que apenas para valores muito elevados da queda de pressão imposta à rede é que os valores de F^* em função de Re^* tendem para um valor constante.

4.5.2.2 Estratégia Baseada num Ajuste em Coordenadas lineares

Na segunda forma de representação, a equação de MacDonald é representada usando-se a Equação 4.44. Como já se observou anteriormente (ver Figura 4.15), os valores das constantes podem ser determinados representando os valores obtidos em coordenadas logarítmicas e analisando o comportamento nas zonas limite de escoamento. Para valores baixos de Re^* a curva tende para um valor constante igual a A . Para valores de Re^* elevados obtém-se uma recta cujo declive é igual a B . Neste trabalho assumiu-se que quando o declive entre dois pontos consecutivos é constante o escoamento é não linear perfeitamente desenvolvido. Observou-se que os valores de Re^* a partir dos quais se verifica a condição anterior são muito menores do que na forma de representação F^* versus Re^* .

Usando os resultados obtidos pelo modelo ICAM, os valores previstos das constantes com base no comportamento assintótico da curva são $A = 324.9$ e $B = 1.295$. Pelo método dos mínimos quadrados, os valores obtidos são $A = 267.8$ e $B = 1.296$. Ao contrário dos resultados obtidos da secção anterior, em que as diferenças entre os valores das constantes pelas duas estratégias são similares, agora para a constante A a diferença é de 17.4%..

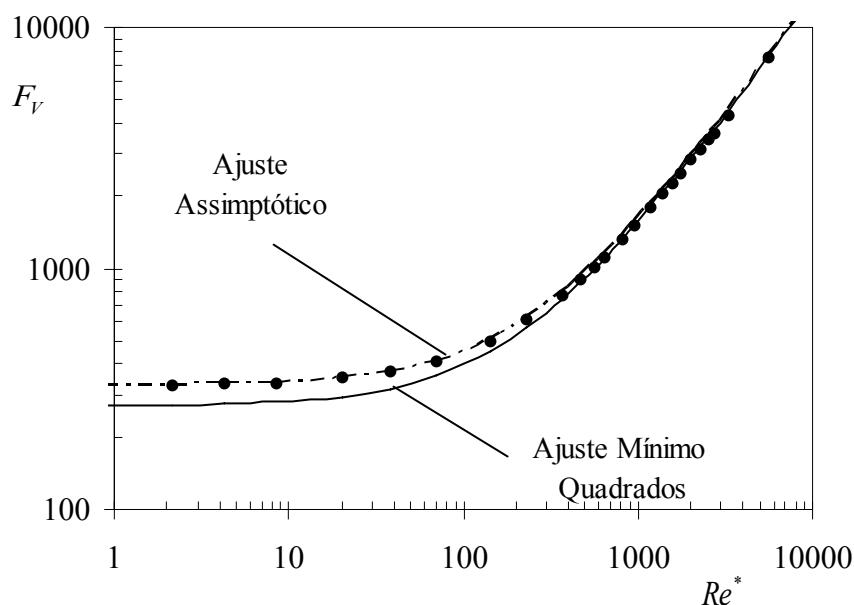


Figura 4.19 Comparação das duas estratégias de determinação das constantes A e B da equação de MacDonald para o modelo ICAM, com base na representação de F_v versus Re^* .

Para a constante B a diferença é menor que 1%. Na Figura 4.19 são apresentadas as curvas de F_v em função de Re^* com base nos valores obtidos com o simulador hidrodinâmico e as

previstas usando as constantes A e B determinadas pelas duas estratégias. Observa-se que usando as constantes obtidas do comportamento assintótico, a curva prevista é uma aproximação mais adequada do que a baseada nas constantes determinadas pelo método dos mínimos quadrados, em particular na zona linear de escoamento.

Os resultados apresentados permitem concluir que a análise do comportamento limite dos valores em coordenadas logarítmicas é mais adequada para determinar os valores de A e B . Esta situação é oposta à observada na secção anterior, em que o ajuste por mínimos quadrados é o mais adequado. Na secção seguinte as duas estratégias são comparadas entre si, de modo a verificar qual das formas de representação é a mais adequada.

4.5.2.3 Comparação das Estratégias de Determinação de A e B

Ergun (1952) recomendou a utilização da forma F_V em função de Re^* para a representação dos seus dados experimentais, visto ser possível obter as constantes através de um ajuste linear directo dos dados. No entanto, a maior parte dos autores (Bird *et al.*, 1960; McDonald *et al.*, 1979) preferiram representar os dados disponíveis na forma F^* em função de Re^* , pois é semelhante à definição de um factor de fricção equivalente em função de um número de Reynolds modificado.

As conclusões obtidas nas duas secções anteriores são válidas desde que os dados experimentais ou os dados obtidos pelo simulador hidrodinâmico incluam todos os regimes de escoamento observados num meio poroso. No entanto, não é comum encontrar na literatura dados experimentais para regime de escoamento não linear e turbulento, em particular para líquidos. Um exemplo desta situação pode ser encontrado nos dados experimentais de Kim (1985), em que os dados representados numa forma similar a F^* em função de Re^* não tendem para um patamar para valores elevados da queda de pressão. Os dados obtidos por este autor vão ser usados na Secção 4.7.3 para determinar a validade dos valores previstos pelo simulador hidrodinâmico quando associado ao modelo geométrico.

Nesta secção, vai ser utilizado apenas um conjunto de dados experimentais deste autor (designado por KIM1; ver Secção 4.7.3), para determinar qual das duas formas é a mais adequada para determinar os valores das constantes A e B , quando os dados disponíveis não englobam todos os regimes de escoamento. Na Figura 4.20 são apresentadas as curvas de F^* e F_V em função de Re^* obtidas para este conjunto de dados experimentais. Observa-se que os dados experimentais apenas se encontram nas zonas de escoamento linear e de transição,

não alcançando a zona de escoamento não linear perfeitamente desenvolvido e que corresponderia a um patamar na curva F^* em função de Re^* . Comparando as duas curvas, verifica-se que a forma F_V em função de Re^* permite uma visualização mais adequada da zona de transição, de difícil percepção na representação de F^* em função de Re^* .

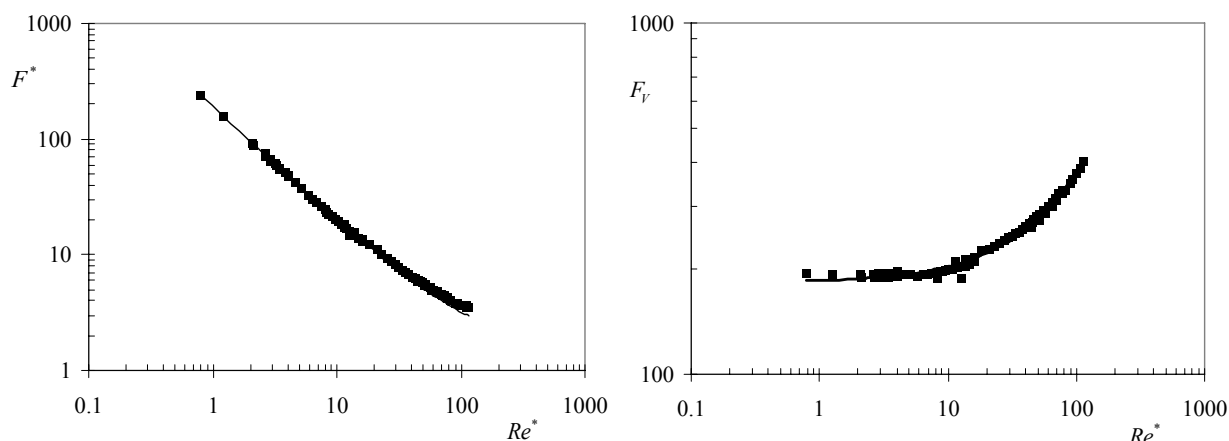


Figura 4.20 Comparação entre os dados experimentais e os valores previstos para duas formas de representação consideradas neste trabalho.

Os valores das constantes A e B foram determinados para cada uma das representações, usando as estratégias mais adequadas, sendo os valores obtidos apresentados na Tabela 4.6. Os valores de A calculados pelas duas formas são idênticos, mas diferenças apreciáveis podem ser observadas para os valores de B .

Na Figura 4.20 são comparados os dados experimentais com as curvas previstas com base nos valores das constantes A e B calculados pelas duas estratégias. Verifica-se boa concordância em ambos os casos. No entanto, na forma F^* em função de Re^* ocorrem desvios para valores elevados de Re^* , sendo possível observar a tendência dos valores previstos serem mais baixos que os experimentais. Nesta forma de representação, os dados experimentais ainda não alcançaram o patamar correspondente à zona de escoamento não linear perfeitamente desenvolvido. Deste modo, não é possível obter o valor correcto de B . Apenas representando F_V em função de Re^* é possível um ajuste adequado dos dados para toda a gama de Re^* considerada. Para escoamento linear, ambas as formas são adequadas para representar os dados experimentais.

Kim (1985) também determinou os valores das constantes A e B a partir do comportamento assintótico dos dados experimentais representados na forma $\Delta P_T D_p / L_x v_T \mu$ em função de Re , que difere de Re^* por não incluir o termo $(1 - \varepsilon)$, tendo obtido $A = 184.2$ e $B = 1.925$.

Estes valores são similares aos valores das constantes calculadas usando a representação na forma F_V versus Re^* .

Tabela 4.6 Valores de A e B determinados pelo método dos mínimos quadrados.

Forma de Representação	A	B
F^* em função de Re^*	189.4	1.309
F_V em função de Re^*	182.9	1.900

Coloca-se agora a questão de qual é o Re^* a partir do qual se pode considerar que os valores obtidos na zona de escoamento não linear são bem descritos por uma recta. Para os dados experimentais de Kim (1985), como se pode ver na Figura 4.20 é possível concluir que desde que $Re^* > 20$ o escoamento se encontra em regime não linear perfeitamente desenvolvido. Na Figura 4.21 é apresentada a recta obtida nestas condições, observando-se que esta ajusta satisfatoriamente os dados experimentais. No entanto, o valor da ordenada na origem, correspondente ao valor de A , não tem significado, pois nenhuma informação dessa zona de escoamento linear é utilizada na determinação do valor de B . Deste modo, os valores das constantes devem ser determinados analisando separadamente as duas zonas limites de escoamento.

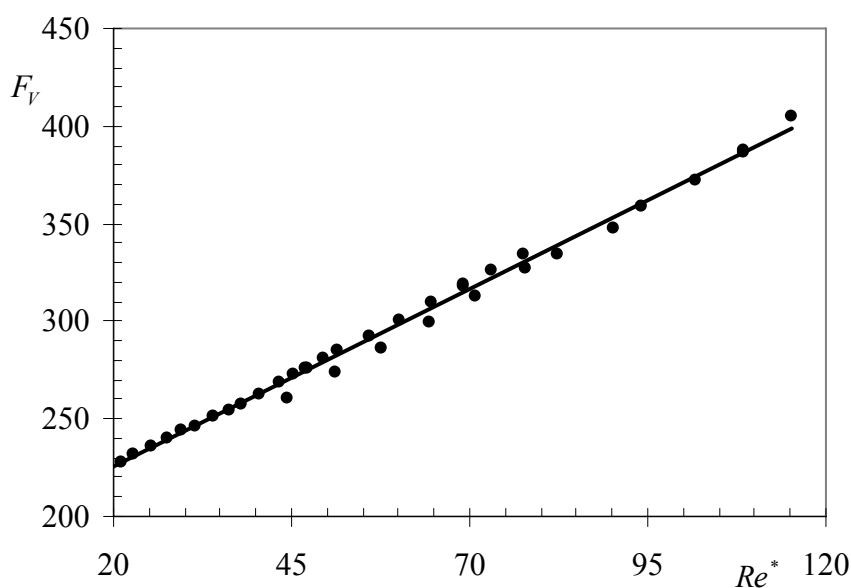


Figura 4.21 Ajuste linear para a determinação de B e dos valores de F_V correspondentes a valores de Re^* elevados.

Para a representação de F^* em função de Re^* é também possível determinar B directamente do comportamento limite da curva. No entanto, os valores de Re^* a partir dos quais os valores de F^* tendem para um valor constante são muito superiores ao caso da representação F_V em função de Re^* . De acordo com os resultados apresentados na Figura 4.16, $Re^* > 10000$. Estes valores do número de Reynolds apenas são alcançados impondo valores muito elevados no simulador hidrodinâmico para o gradiente de pressões entre a entrada e a saída de fluido na rede.

Os resultados obtidos permitem concluir que a determinação das constantes da equação de MacDonald deverá ser efectuada a partir da representação dos valores obtidos na forma F_V versus Re^* e da análise do comportamento das zonas limite de escoamento. Estas conclusões estão de acordo com as sugestões de Ergun (1952) para a caracterização do escoamento através de um meio poroso. Os resultados obtidos permitem concluir que, desde que $Re^* < 1$ o regime de escoamento é linear, e para $Re^* > 20$ o escoamento se encontra em regime não linear perfeitamente desenvolvido. Estes valores limite não são universais, pois podem depender dos dados experimentais ou do conjunto de dados usados no simulador hidrodinâmico. No entanto, nas condições consideradas neste trabalho as condições anteriores são adequadas.

4.5.3 Determinação das Dimensões da Rede Estatisticamente Válidas

Do mesmo modo que na Secção 3.7.1 se determinaram as condições em que os valores dos parâmetros geométricos macroscópicos são significativos, também para a caracterização do escoamento é necessário determinar as condições que asseguram que os resultados obtidos são estatisticamente significativos. Como se pretende agora analisar o escoamento através de um meio poroso, alguns aspectos devem ser também considerados em detalhe.

- As dimensões da rede segundo o sentido principal e normal de escoamento deverão ser tais que a influência da entrada do fluido e das fronteiras da rede sejam desprezáveis. O gerador da rede não permite a definição de zonas próximas das fronteiras do meio poroso com diferentes características de porosidade e distribuição dos elementos característicos da rede, restringindo a aplicação das redes geradas a meios porosos em que os efeitos de parede sejam desprezáveis.

- Em princípio quanto maior for a rede mais representativos serão os resultados obtidos no simulador hidrodinâmico. No entanto, os recursos computacionais disponíveis e o tempo de simulação necessário para obter o campo de escoamento colocam um limite nas dimensões das redes que é possível simular. Este aspecto é particularmente importante na simulação de escoamento em regime não linear ou turbulento.

Como o comportamento hidrodinâmico depende das características geométricas do meio, e consequentemente da estrutura da rede de elementos, assume-se que os parâmetros mais influentes no valor de E_R são os mesmos para a descrição do escoamento. Como todos os modelos para o cálculo de R_j prevêem a mesma dependência deste valor em função das características geométricas da rede, os critérios serão aplicáveis para todos os regimes de escoamento possíveis na rede de elementos. Deste modo, apenas se analisou em detalhe o comportamento para regime laminar, através dos valores de permeabilidade previstos pelo simulador hidrodinâmico. Na Secção 4.5.3.2 são analisados os regimes de escoamento não linear e turbulento e é discutido se os critérios obtidos em condições de regime linear são aplicáveis ou não a estes regimes de escoamento.

4.5.3.1 Regime linear de escoamento

Nesta secção vai ser analisada a influência de N_x e N_y nos valores da permeabilidade previstos pelo simulador hidrodinâmico e determinar em que condições os valores calculados são independentes das dimensões da rede. Apesar do comportamento dos dois modelos de cálculo de R_j ser idêntico na zona de escoamento linear, foi seleccionado o modelo ICAM pois inclui a influência da presença das ligações entre as câmaras e os canais em todos os regimes de escoamento. Assumiu-se no cálculo de k que os efeitos inerciais são nulos, ou seja, $\sum K_j = 0$, o que equivale a dizer que $R_j^{ET} = 0$ (Wang *et al.*, 1999). De modo a determinar a variabilidade dos resultados para cada conjunto de valores de N_x e N_y , foram efectuadas 12 simulações para cada par de valores, variando entre elas a semente do gerador de números aleatórios. Foram consideradas redes tipo 00, com $d/D = 0.50$, para $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$, tendo-se considerado apenas a restrição $d_j < D_i$.

Na Figura 4.22 são comparados os valores previstos de k em função de N_y , para N_x constante. Na representação gráfica são representados os valores médios obtidos para cada uma das doze simulações e a amplitude dos valores obtidos em torno do valor médio obtido

para igual par de valores de N_y e N_x . Observa-se que em todos os valores de N_x considerados, o valor médio de k tende para um valor constante desde que $N_y \geq 100$. A variabilidade dos valores obtidos é maior para valores de N_x inferiores, revelando uma maior influência dos efeitos da entrada do fluido na rede. Para valores elevados de N_x , é possível observar os efeitos das paredes através das variações observadas para valores baixos de N_y , indicativo de que o perfil de escoamento ainda se encontra em desenvolvimento. Os resultados permitem concluir que os valores obtidos pelo simulador hidrodinâmico são válidos desde que $N_y \geq 100$ e $N_x \geq 100$. Estes resultados são similares aos obtidos na Secção 3.7.1.1 na análise da influência dos parâmetros geométricos e estatísticos da rede nos valores de E_R previstos pelo gerador.

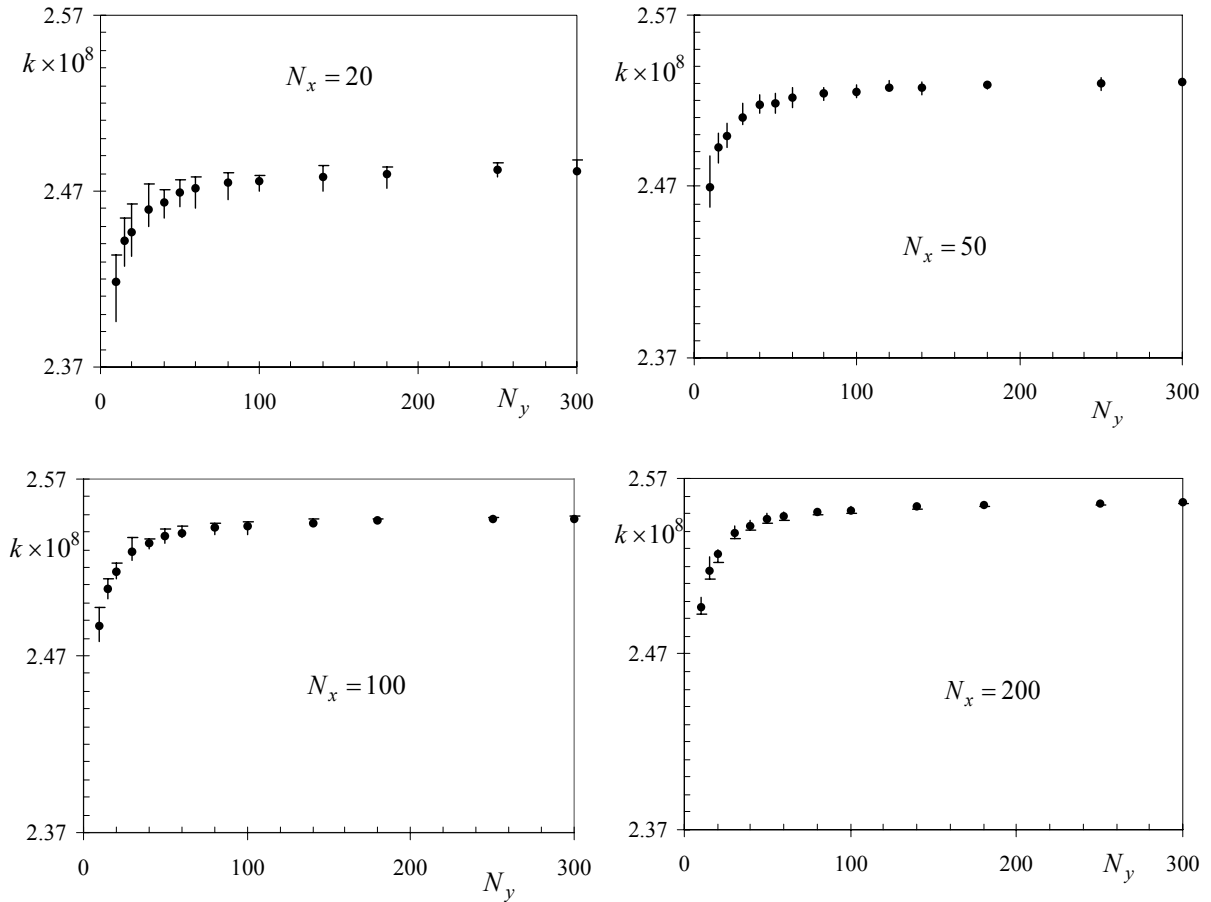


Figura 4.22 Curvas de permeabilidade, k , em função de N_y para quatro valores de N_x .

De modo a verificar os resultados da Figura 4.22, são apresentados e comparados na Figura 4.23 os valores médios de k em função de N_x para N_y constante, tendo sido usados os mesmos valores constantes considerados na Figura 4.22. Observa-se um comportamento qualitativo idêntico ao observado na Figura 4.22. Apesar dos valores limite variarem em

função do valor constante de N_y , observa-se que as diferenças entre estes diminuem com o aumento de N_x , de acordo com a conclusão de que aumentando o valor deste parâmetro se está a tender para redes com dimensões significativas. As diferenças observadas podem ser atribuídas às características da rede, em particular as distribuições das dimensões características dos elementos da rede. Esta questão será analisada em detalhe na Secção 4.5.6.1. Em todos os casos analisados obtém-se comportamento assintótico desde que $N_y > 150$. Em relação a N_x , as curvas para $N_x = 100$ e $N_x = 200$ são praticamente idênticas, o que permite assegurar que, desde que as condições $N_y \geq 100$ e $N_x \geq 100$ se verifiquem, os resultados obtidos pelo simulador hidrodinâmico são estatisticamente significativos. Comportamento idêntico já foi observado para as curvas de E_R em função da porosidade (ver Secção 3.7), sendo os critérios obtidos similares.

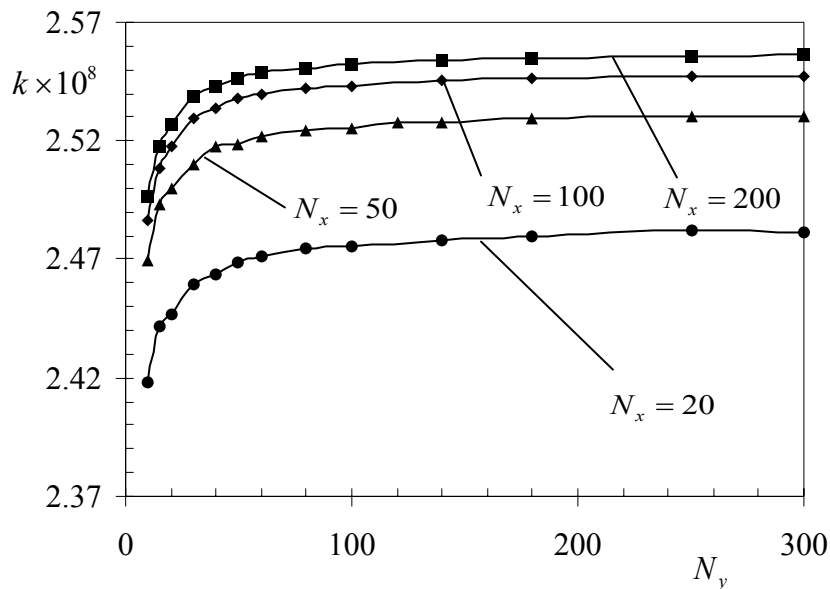


Figura 4.23 Comparação das curvas dos valores médios de k em função de N_y para quatro valores de N_x .

Na Figura 4.24 e na Figura 4.25 são apresentados os valores previstos da permeabilidade em função de N_x , mantendo N_y constante. Observa-se o mesmo comportamento qualitativo da Figura 4.22 e da Figura 4.23 para as curvas de k em função de N_y . As condições que asseguram a validade dos valores obtidos pelo simulador hidrodinâmico continuam a ser observadas. Nessas condições, deixa de ser necessário efectuar várias simulações para se obter um valor médio, visto que os resultados de uma simulação são uma boa aproximação do valor real.

Comparando os resultados apresentados na Figura 4.23 e na Figura 4.25, verifica-se que os valores de permeabilidade são mais sensíveis a variações nos valores de N_x do que nos valores de N_y . Como o primeiro parâmetro representa o número de câmaras segundo o sentido principal do escoamento, é natural que variações segundo esta direcção sejam mais importantes do que variações no número de câmaras no sentido normal do escoamento.

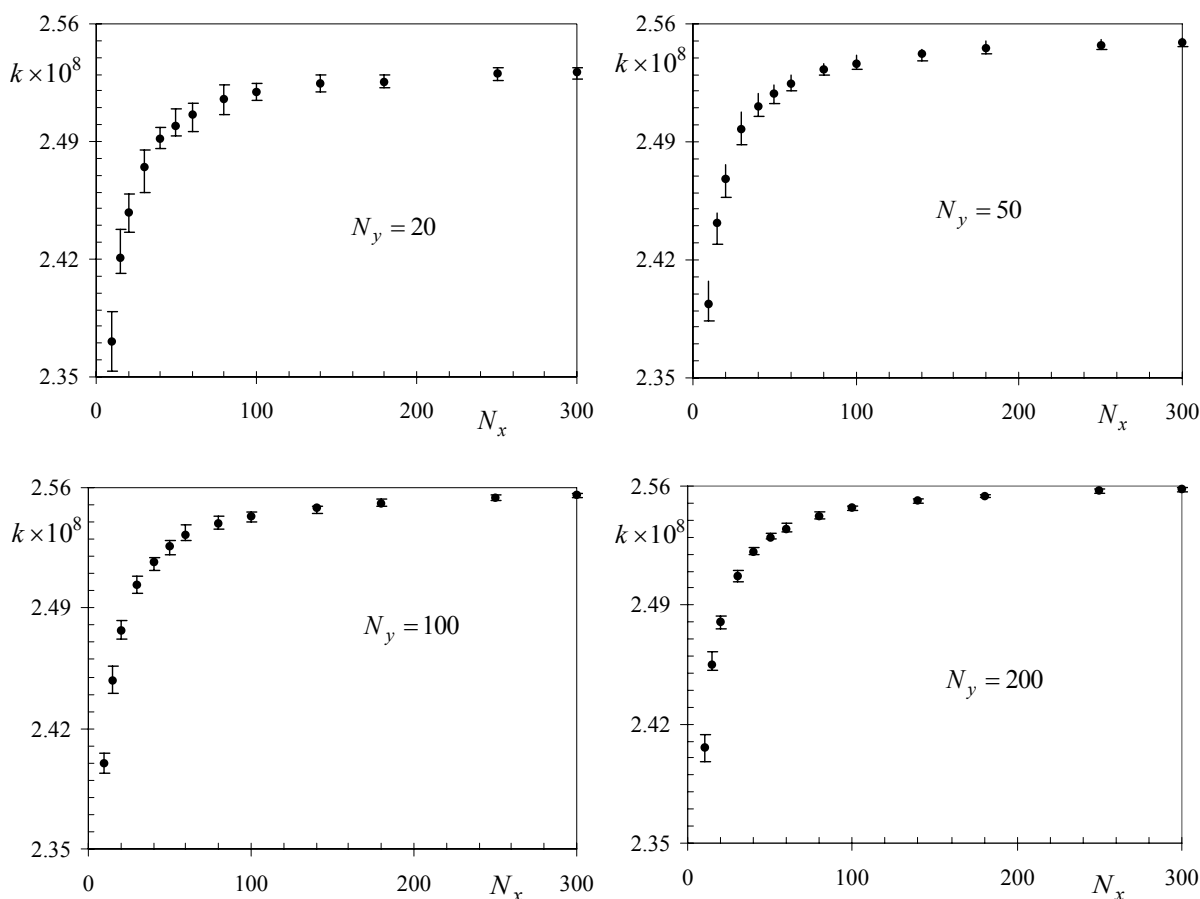


Figura 4.24 Curvas da permeabilidade k , em função de N_x para quatro valores típicos de N_y .

Estes resultados estão de acordo com o comportamento observado num leito de enchimento, em que os efeitos das paredes são significativos numa zona entre dois a três diâmetros médios das partículas da parede. De acordo com o modelo geométrico, esta distância corresponde a três a quatro colunas da fronteira da rede, razão pelo qual para $N_y \geq 50$ os seus efeitos deixam de ser significativos. Como as redes em que foram obtidos os resultados apresentados na Figura 4.22, na Figura 4.23, na Figura 4.24 e na Figura 4.25 não possuem fronteiras periódicas, os efeitos da presença de uma fronteira no escoamento através da rede são tomados em conta de forma explícita. Para redes com fronteiras periódicas é de se esperar que estes efeitos sejam menores, sendo este aspecto analisado na Secção 4.5.4.1.

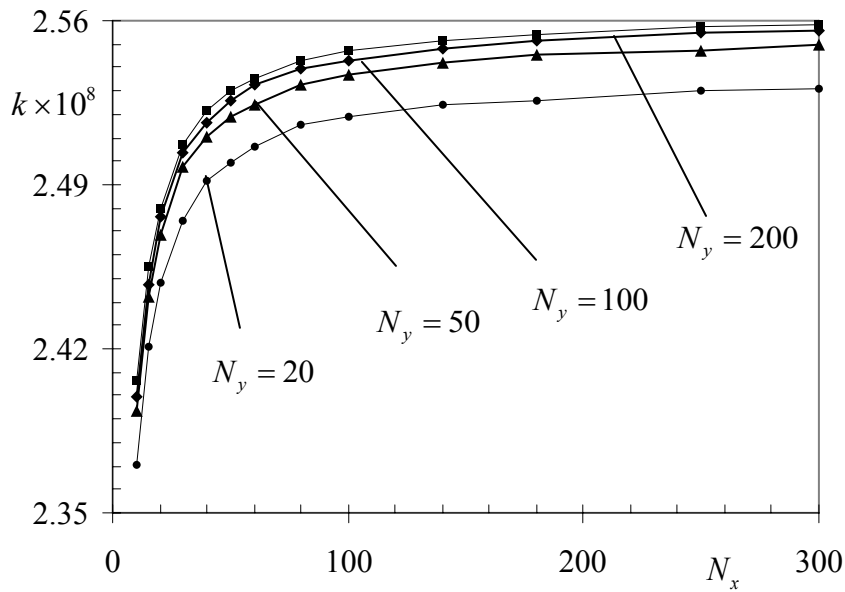


Figura 4.25 Comparação das curvas dos valores médios da permeabilidade em função de N_y para quatro valores de N_x .

Os critérios obtidos são idênticos aos obtidos na Secção 3.7.1, mesmo considerando as diferenças existentes entre as características das redes usadas nas duas secções. Estes resultados confirmam as previsões de que o comportamento hidrodinâmico de uma rede de elementos e consequentemente de um meio poroso, são dependentes das suas características geométricas.

4.5.3.2 Regime não linear de escoamento

Para regime de escoamento linear a diferença entre os modelos ICAM e FRIC é igual a uma constante cujo valor é função apenas do diâmetro dos canais, correspondente ao termo R_j^{EL} (ver Secção 4.3.2), sendo nestas condições dominantes os termos de resistência ao escoamento R_j^F . Para escoamento em regime não linear os resultados da Secção 4.5.1 mostram que apenas o modelo ICAM é capaz de descrever, pelo menos qualitativamente, o comportamento da rede, sendo a resistência ao escoamento determinada pelos valores de R_j^{ET} . Comparando as expressões de R_j^F e R_j^{ET} (ver Secção 4.3) observa-se que os dois termos possuem a mesma dependência em função de d_j .

A diferença mais importante diz respeito à dependência de R_j^F no comprimento dos canais, a qual não é observada para o termo R_j^{ET} . No entanto, a dependência do valor da resistência deste parâmetro é pequena quando comparada com a influência de d_j , pelo que as conclusões

anteriores continuam a ser válidas e apenas se observa para escoamento linear. Para regime de escoamento não linear, o termo R_j^{ET} é dominante e a influência de l é desprezável, visto só influenciar o termo R_j^F .

Assim, os critérios obtidos na secção anterior para assegurar que os resultados são estatisticamente significativos são válidos, visto que em ambas as situações é d_j o factor dominante da resistência ao escoamento dos elementos da rede. Deste modo, não foram efectuadas simulações para determinar critérios específicos para as dimensões da rede que assegurem que os valores previstos pelo simulador hidrodinâmico são estatisticamente significativos em condições de escoamento não linear.

No entanto, como as expressões limites para regime laminar e não linear são diferentes, são de esperar diferenças das características de escoamento entre os dois regimes de escoamento. A conclusão sai reforçada da comparação entre as expressões teóricas para as constantes A e B da equação de MacDonald, em que se observam dependências diferentes em D_p e nos parâmetros da rede e dos seus elementos para os dois parâmetros.

Os aspectos referidos têm influência nas características do campo de escoamento através da rede. Para determinar como, foram efectuadas simulações para uma rede 10, com 100×100 , $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$, dois valores de d/D : 0.5 e 0.75, para $D = 0.004$ fixado, $\theta = \pi/4$ e sem remoção de câmaras e/ou canais, sendo apresentadas na Figura 4.26 as distribuições das velocidades nos canais da rede. Foram usadas redes com dimensões elevadas de modo a assegurar que as amostras obtidas são significativas e valores elevados de σ_D e σ_d . As distribuições de velocidade apresentadas são equivalentes a histogramas, tendo-se dividido os valores de v_j da amostra em vinte classes, representando os pontos o número de canais em cada uma das classes, N_v . Como para os dois regimes de escoamento os valores de v_j são muito diferentes, na representação das distribuições os valores foram normalizados pelo maior valor de velocidade, v_{max} , observada em cada uma das simulações. Os resultados obtidos para a distribuição de velocidades possuem o mesmo comportamento qualitativo obtido em outros trabalhos envolvendo modelos de redes (Shah e Yortsos, 1987; Damion *et al.*, 2000) e experimentalmente (Sederman *et al.*, 1997 e 1998). Observa-se que para condições de escoamento não linear a distribuição dos valores de N_v é mais apertada, sendo este aspecto mais significativo para valores elevados de d/D . Este comportamento deve-se ao facto de

que em regime linear de escoamento além da variabilidade dos valores de d_j o modelo ainda toma em conta a variabilidade dos valores de l_j , em que entra implicitamente a variabilidade dos valores de D_i (ver Secção 3.5.4 para a forma como os valores de l_j são calculados). Deste modo, em regime laminar a variabilidade total dos valores da resistência dos ramos da rede ao escoamento, R_j , vai ser superior quando comparada com a situação de escoamento não linear. Como consequência, a distribuição de velocidades nos canais vai ser mais larga para escoamento linear, como se pode observar na Figura 4.26.

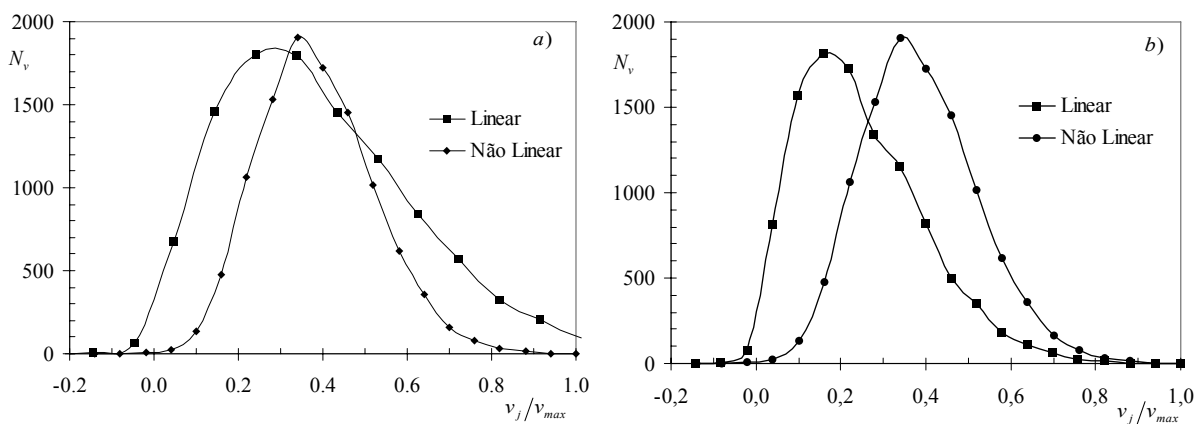


Figura 4.26 Distribuição das velocidades nos canais da rede para escoamento linear e não linear para redes com as mesmas características geométricas: a) $d/D = 0.5$; b) $d/D = 0.75$.

Os resultados obtidos mostram que as características do campo de escoamento, em redes não uniformes, dependem também dos termos dominantes de resistência ao escoamento. Ao passar de escoamento linear para não linear observa-se que a distribuição tende a ser mais simétrica, sendo este comportamento tanto mais marcado quanto maior é d/D . Experimentalmente este comportamento foi observado em leitos de enchimento por Jonhs *et al.* (2000).

Mesmo assim, os resultados apresentados mostram que as distribuições de valores de v_j são qualitativamente similares, apenas mudando a sua forma. Por outro lado, o desvio padrão das distribuições dos valores de v_j diminui, sendo esta uma das razões para que os resultados obtidos em redes de pequenas dimensões não sejam estatisticamente significativos. Assim, é possível concluir com um bom grau de certeza que os critérios que asseguram que os resultados obtidos pelo simulador de escoamento são válidos para escoamento linear são também adequados para escoamento não linear.

4.5.4 Influência das Características Estruturais da Rede

Na secção anterior determinaram-se os critérios que asseguram em que condições os valores obtidos pelo simulador hidrodinâmico são estatisticamente significativos, ou seja, podem ser considerados como representativos do comportamento de um meio poroso real. Nesta secção é analisada a influência dos parâmetros associados à estrutura geométrica da rede, em particular o tipo de fronteiras da rede, da inclusão ou não de canais horizontais, número de coordenação médio da rede, valor do ângulo θ com a vertical, e comprimento médio dos canais oblíquos.

Os três primeiros aspectos analisam a influência que variações de C e da distribuição de valores de C_i têm no comportamento previsto pelo simulador do escoamento, sendo discutidos nas três subsecções seguintes. É aqui que é estudada a influência das estratégias de remoção de câmaras e/ou canais implementada no gerador da rede (ver Secção 3.4.4 para uma descrição das estratégias de remoção de elementos implementadas), sendo examinadas em detalhes as diferenças entre as diferentes formas. Os restantes parâmetros influenciam as características de escoamento directamente, através da alteração da resistência dos ramos da rede, e sobretudo através de alterações dos valores dos parâmetros geométricos que caracterizam a rede a um nível macroscópico, como é o caso da espessura equivalente da rede.

4.5.4.1 Influência do Tipo de Fronteiras da Rede

As fronteiras laterais da rede podem ser periódicas ou não periódicas. Para redes com as mesmas dimensões as distribuições dos valores de C_i variam apenas nos lados da rede. Na Secção 3.7.1.2 concluiu-se que os efeitos do tipo de fronteiras são pouco significativos quando a rede tem dimensões tais que são estatisticamente significativas, quaisquer que sejam as condições e os parâmetros usados na geração da rede.

Na Figura 4.27 são comparados os valores médios da permeabilidade k em função de N_y , para dois valores constantes de N_x , usando redes tipo 00 e 10. Foram seleccionados os valores de 50 e 200 para analisar o comportamento previsto fora e dentro da gama dos valores de N_x estatisticamente válidos. Foi usada apenas a restrição $d_j < D_i$, $d/D = 0.5$, para $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$, de modo a realçar a influência dos valores do desvio padrão das distribuições das dimensões características das câmaras e dos canais. Apesar de para valores

elevados de N_y , se observar o mesmo comportamento limite, apenas para $N_x = 200$ é que os valores previstos pelos dois tipos de redes são iguais. Para $N_x = 50$ observa-se uma influência mais marcada do desvio padrão, em particular para valores baixos de N_y . Nestas condições, as dimensões da rede não permitem a obtenção de amostras estatisticamente significativas para a obtenção do comportamento hidrodinâmico limite. Este aspecto justifica também as diferenças entre o comportamento dos valores de permeabilidade para os dois valores constantes de N_x .

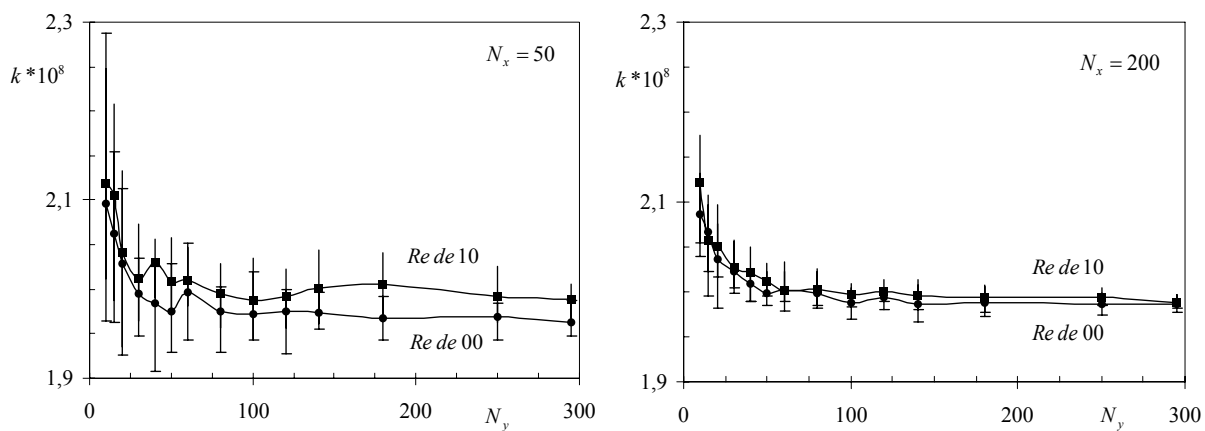


Figura 4.27 Comparação das curvas dos valores médios de k para redes de tipo 00 e 10 em função de N_y para $N_x = 50$ e $N_x = 100$, para redes com e sem fronteiras periódicas.

Quando as dimensões da rede são tais que os resultados obtidos pelo modelos são estatisticamente significativos, a diferença entre o número total de elementos entre redes com e sem fronteiras periódicas tende para zero (ver Apêndice A.3). Assim, as características geométricas da rede e a resistência da rede ao escoamento não variam apreciavelmente, permitindo concluir que a influência do tipo de fronteiras no escoamento deverá ser significativo apenas para redes de pequenas dimensões. No entanto, como para redes pequenas os resultados do simulador hidrodinâmico dependem fortemente dos parâmetros do gerador de números aleatórios, os resultados deixam de ser estatisticamente significativos não sendo representativos do comportamento de um meio poroso.

4.5.4.2 Influência da inclusão ou não canais horizontais

A inclusão ou não de canais horizontais foi implementada no gerador da rede de modo a estabelecer os valores limites do número de coordenação médio da rede. Em particular, se não existirem canais horizontais na rede $C = 4$, e se existirem canais horizontais $C = 6$.

Para redes uniformes os resultados da Secção 4.4.3 mostram que a velocidade do fluido nos canais horizontais é igual a zero. A presença ou não de canais horizontais apenas interfere ao nível dos valores dos parâmetros macroscópicos resultado das alterações do volume total de vazios da rede. A estrutura de uma rede não uniforme é similar a uma rede uniforme, sendo a diferença mais significativa a existência de uma distribuição das dimensões características dos elementos da rede. Assim, é de se esperar que V_{cal} para redes não uniformes a velocidade do fluido nos canais horizontais seja muito menor que os valores observados nos canais oblíquos, sendo no então não nula devido às irregularidades da estrutura geométrica da rede.

No caso geral a situação pode ser bastante mais complexa. Em redes em que as distribuições dos números de coordenação das câmaras são largas ou quando existem canais horizontais, as distribuições dos valores de velocidade nos canais são largas (ver Secção 4.5.4.2), podendo ser mesmo bimodais dependendo das características geométricas da rede e dos seus elementos.

Para verificar se essa possibilidade é válida, na Figura 4.28 são comparadas as distribuições de valores de v_j com e sem canais horizontais, para redes 100×100 , $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$ e $d/D = 0.5$, $D = 0.004$ e $l = 0.007$. Foram usadas redes com e sem canais horizontais, com fronteiras periódicas ambas, para iguais valores de ΔP_T , de modo a assegurar que a comparação é feita nas mesmas condições. Usaram-se valores elevados dos desvio padrão das distribuições de valores de d_j e D_i para reforçar a influência da estrutura da rede e dos seus elementos no comportamento hidrodinâmico previsto pelo simulador do escoamento.

As distribuições de valores de v_j apresentadas na Figura 4.28 foram obtidas dividindo as velocidades nos canais em classes, de acordo com o seu valor. Determinadas deste modo as curvas apresentadas na Figura 4.28 são equivalentes a histogramas da distribuição de valores de v_j . Em relação à Figura 4.28, agora é possível comparar os valores reais da velocidade, o que não era possível anteriormente. Observa-se que, de acordo com as previsões, os valores de v_j dos canais horizontais são bastante inferiores aos observados nos canais oblíquos. As curvas obtidas para as velocidades nos canais oblíquos são quase idênticas, sendo a distribuição de velocidades nos canais horizontais mais estreita e centrada em zero. Para os canais oblíquos observa-se a existência de caudas, indicativo da existência de irregularidades no campo de escoamento. Além das conclusões anteriores, é possível concluir que a inclusão de canais horizontais na rede tem pouca influência nas distribuições dos valores v_j nos canais

oblíquos. Este facto releva que a influência dos canais horizontais no escoamento é pouco significativa, fazendo-se sentir sobretudo através da variação dos parâmetros macroscópicos da rede.

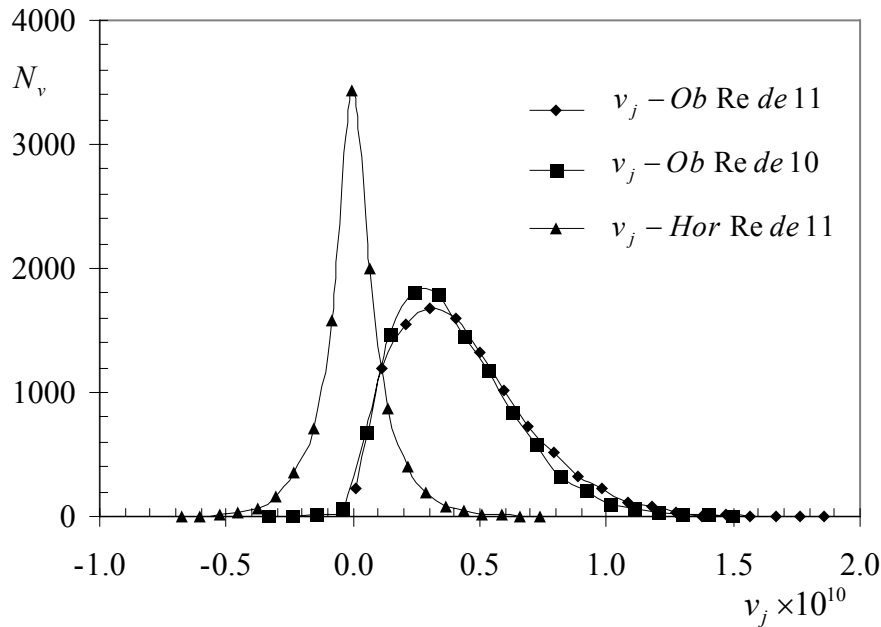


Figura 4.28 Distribuições de velocidades nos canais oblíquos e horizontais para redes tipo 11 (com canais horizontais) e redes tipo 10 (sem canais horizontais).

Na Secção 3.7 mostrou-se que E_R variava dependendo da existência ou não de canais horizontais na rede. Assim, é de se esperar que k varie, mesmo tomando em conta que ao nível da distribuição de velocidades nos canais oblíquos, elementos que controlam o escoamento através da rede, não se altere significativamente. Para obter melhores conclusões, na Figura 4.29 são apresentados os valores previstos de permeabilidade em função de N_x para dois valores de N_y , para redes do tipo 10 e 11, com $d/D = 0.50$ e $\varepsilon = 0.40$, sendo o volume das calotes tomado em conta no cálculo de E_R . Considerou-se a restrição $d_j < D_i$, para $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$. O comportamento qualitativo dos resultados obtidos para os dois tipos de rede é similar, mas, observa-se uma dependência em C . Em particular, os valores de k previstos para uma rede sem canais horizontais são superiores aos previstos para uma rede com canais horizontais. Na Secção 3.7.1.2 mostrou-se que os valores da espessura para os dois tipos de rede possuem um comportamento inverso. Como a influência dos canais horizontais é reduzida no comportamento hidrodinâmico da rede, as variações de E_R entre os dois tipos de rede traduz-se em diferenças no valor da velocidade superficial nesta. Em

particular, o aumento de E_R resulta num abaixamento do valor da velocidade superficial, com redução no valor de permeabilidade, de acordo com o comportamento observado.

Comparando o comportamento dos valores previstos para diferentes valores constantes de N_y , observa-se que a variabilidade dos valores é maior do que a observada na Secção 4.5.3.1, o que é atribuível aos valores mais elevados do desvio padrão usados nas distribuições das dimensões características dos elementos da rede. Por outro lado, observa-se que quanto maior é o valor constante de N_y , menores são as variações em torno do valor médio, alcançando-se o comportamento limite para valores mais baixos de N_x .

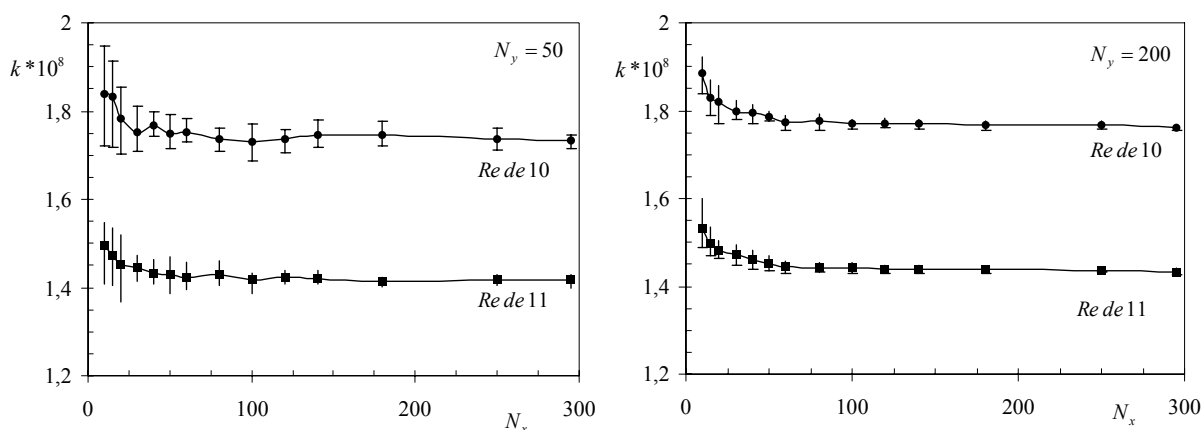


Figura 4.29 Comparação das curvas dos valores médios de k para redes do tipo 10 e 11 em função de N_x para dois valores constantes de N_y , para redes com e sem canais horizontais, usando apenas o critério $d_j < D_i$.

Para redes sem remoção de canais e/ou câmaras, os resultados previstos pelo simulador hidrodinâmico mostram que os valores dos parâmetros macroscópicos variam com C . Como o tipo de redes em estudo se encontra longe do limiar de percolação, as alterações de C fazem-se sentir sobretudo através de alterações na espessura equivalente da rede e não por modificações do campo de escoamento ao nível local.

As conclusões obtidas são válidas desde que na geração da rede se considere a restrição $d_j < D_i$ entre as câmaras e os canais associados entre si. Quando se impõem os critérios de não intersecção, a aplicação destes e as alterações nas distribuições dos valores de d_j e de D_i dependem da existência ou não de canais horizontais associados às câmaras (ver Secção 3.7.1.2). Na Figura 4.30 são comparados os valores previstos de k em função de N_x para dois valores constantes de N_y , para as mesmas condições usadas na Figura 4.29, com a

excepção das condições impostas entre os valores dos diâmetros das câmaras e dos canais associados entre si. Apesar do comportamento qualitativo dos resultados ser similar ao observado na Figura 4.29, as diferenças entre os valores de permeabilidade previstos são maiores neste caso. Estas diferenças são devidas às alterações que é necessário introduzir nas distribuições definidas inicialmente no gerador da rede, que são mais pronunciadas quando a rede possui canais horizontais. Como é a distribuição de valores de d_j que sofre mais alterações, deslocando-se esta para valores mais baixos, a resistência ao escoamento vai aumentar, resultando em variações mais pronunciadas dos valores de permeabilidade previstos.

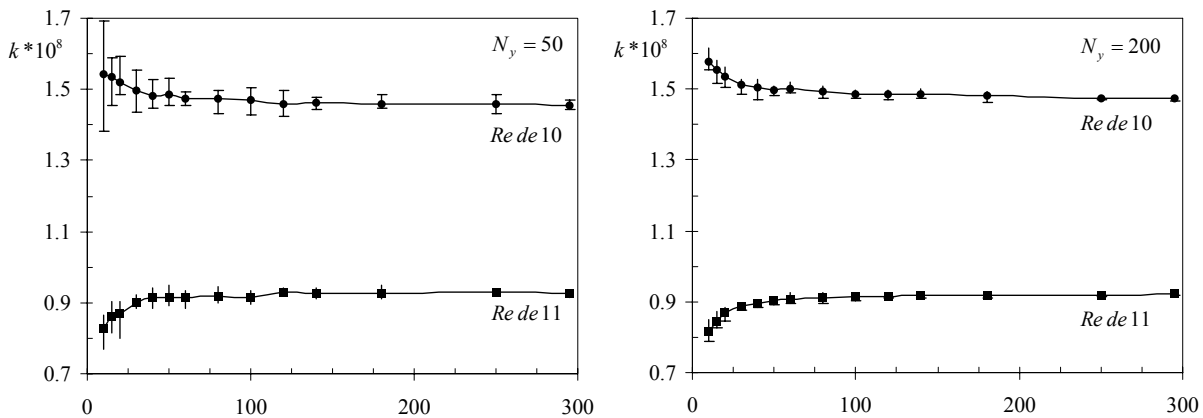


Figura 4.30 Comparação das curvas dos valores médios de k para redes do tipo 10 e 11 em função de N_x para dois valores constantes de N_y , para redes com e sem canais horizontais, usando os critérios de não intersecção.

Comparando os valores previstos para os dois tipos de restrições, observa-se que estes são superiores quando se aplica a restrição $d_j < D_i$. As diferenças são atribuídas às alterações das distribuições iniciais impostas ao gerador, mais fortes quando se usam as restrições de não intersecção. Neste caso, a percentagem de canais com um diâmetro inferior ao valor médio é maior do que no caso da restrição $d_j < D_i$, resultando numa maior resistência ao escoamento e naturalmente em valores de permeabilidade mais baixos.

Os resultados anteriores analisam apenas a influência da inclusão ou não de canais horizontais no comportamento previsto pelo simulador hidrodinâmico. Os resultados permitem concluir que nestas condições o comportamento da rede é controlado pelos canais oblíquos. Como a inclusão ou não de canais horizontais não modifica sensivelmente a distribuição dos diâmetros dos canais oblíquos (em especial quando só é usada a restrição $d_j < D_i$), as

diferenças observadas devem-se a variações nos valores dos parâmetros geométricos da rede ao nível da rede.

4.5.4.3 Influência do número de coordenação médio da rede

As redes analisadas nas secções anteriores podem ser consideradas como possuindo uma estrutura regular, no sentido em que para redes com dimensões estatisticamente significativas a grande maioria das câmaras possui o mesmo número de canais associado. Em redes com fronteiras periódicas C_i é constante. A existência de irregularidades na estrutura local da rede pode ser estudada através da remoção aleatória de câmaras e/ou canais. Comparando os resultados obtidos com redes com igual valor do número de coordenação médio mas obtidos de forma diferente, é possível determinar qual é o impacto da estrutura da rede no comportamento previsto pelo simulador hidrodinâmico. Em qualquer das possibilidades para a remoção de elementos da rede verificou-se que os critérios definidos anteriormente para assegurar que os resultados obtidos são estatisticamente significativos se mantêm válidos.

Deste modo, apenas serão apresentados nesta secção resultados que permitem a comparação entre as diferentes formas de remoção aleatória de elementos da rede, tendo-se implementado quatro variantes: remoção apenas de canais, qualquer que seja o tipo, remoção apenas de câmaras, remoção de câmaras e canais sequencial, começando-se pela remoção de câmaras, e remoção apenas de canais horizontais. Em relação a esta última possibilidade, tomando em conta os resultados obtidos na análise do comportamento de uma rede uniforme e nas secções anteriores, é previsível que a remoção apenas de canais horizontais não tenha uma influência significativa nas características do campo de escoamento ao nível local.

Assumindo que todos os restantes parâmetros se mantêm constantes, só variando C , a partir da definição da permeabilidade, Equação 4.39, a seguinte expressão pode ser escrita para a razão entre os valores de permeabilidade entre redes com $C = 6$ e um valor de C entre 4 e 6

$$\frac{k_C}{k_6} = \frac{(q_T/\Delta P_T)_C}{(q_T/\Delta P_T)_6} \frac{E_R^6}{E_R^C} = \frac{(q_T/\Delta P_T)_C}{(q_T/\Delta P_T)_6} \frac{V_V^6}{V_V^C} \quad (4.65)$$

em que k_6 e k_C são as permeabilidades para redes com $C = 6$ e um valor de C entre 4 e 6 respectivamente, E_R^6 e E_R^C são as espessuras equivalentes das redes com $C = 6$ e um valor de C entre 4 e 6 respectivamente, e V_V^6 e V_V^C são os volumes de vazios para redes com $C = 6$ e um valor de C entre 4 e 6 respectivamente.

A influência de C é apresentada na Figura 4.31 para os casos de remoção somente de câmaras, remoção somente de canais (oblíquos mais horizontais) e remoção somente de canais horizontais. Foram consideradas redes 100×100 , $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$, $d/D = 0.5$ com $D = 0.004$, $l = 0.007$ e fronteiras periódicas. Em qualquer dos casos o processo de remoção parte sempre de uma rede com $C = 6$. Na Figura são apresentados os valores da razão k_C/k_6 . A comparação dos resultados mostra que os processos de remoção podem ter uma influência marcada nos valores previstos pelo simulador hidrodinâmico. Em particular, a remoção somente de canais horizontais leva a um aumento da permeabilidade com a redução de C , enquanto que para os restantes casos ocorre uma redução de k .

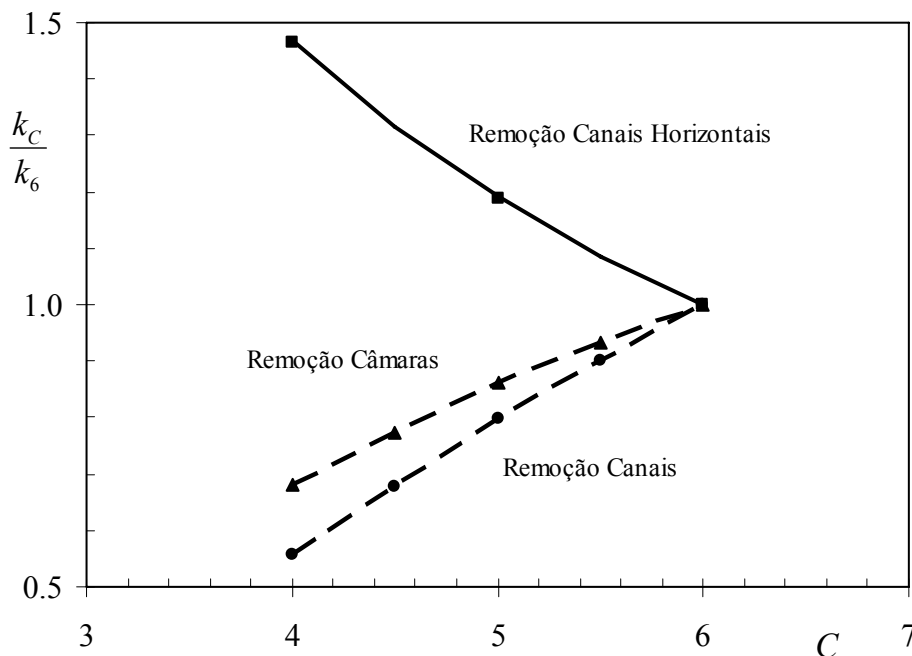


Figura 4.31 Razão k_C/k_6 para remoção só de câmaras, remoção só de canais e remoção só de canais horizontais.

Quando se efectua a remoção de câmaras ou canais (oblíquos mais horizontais), o número de caminhos disponíveis para o escoamento através dos canais oblíquos vai diminuir. Esta situação resulta no aumento da resistência ao escoamento, com a correspondente redução do valor da permeabilidade, o que resulta em valores mais baixos de $q_T/\Delta P_T$. Para ambas as formas de remoção se observa o mesmo comportamento qualitativo, sendo mais marcada a influência de C quando se removem canais. As diferenças devem-se à diferente variação do volume total de vazios para cada um dos canais. Apesar dos procedimentos de remoção serem distintos (ver Secção 3.4.4), para redes grandes o número total de canais que é removido é similar, mas a remoção das câmaras quando estas são resumidas leva a um valor mais baixo

de V_V^C , com os correspondentes valores mais elevados de k_C/k_6 quando comparados com iguais valores obtidos quando se removem apenas canais.

O comportamento observado quando se removem canais horizontais é completamente distinto, observando-se um aumento de k com a remoção de C . Estes resultados apenas podem ser explicados assumindo que a influência dos canais horizontais no escoamento é pouco significativa, devendo-se as variações à redução do volume de vazios da rede devido à remoção de canais horizontais, de acordo com a Equação 4.65. Para uma rede uniforme e assumindo que o caudal através dos canais horizontais é desprezável quando comparado com o caudal nos canais horizontais, é possível mostrar-se que k_C/k_6 (ver apêndice B.5.3 para a dedução da expressão) pode ser expressa na forma

$$\frac{k_C}{k_6} = \frac{V_V^6}{V_V^C} \approx \frac{2D^3 + 6ld^2 + 3l_h d^2}{2D^3 + 6ld^2 + 3\left(\frac{C}{2} - 2\right)l_h d^2} \quad (4.66)$$

Os valores previstos pela expressão anterior são também apresentados na Figura 4.31, sendo possível observar uma concordância muito boa com os valores obtidos pelo simulador de escoamento. Este resultado mostra que, mesmo quando as distribuições das dimensões características dos elementos da rede são muito largas, a influência dos canais horizontais no escoamento é muito pouco significativa.

Os resultados obtidos permitem concluir que, além das características geométricas, a estrutura local da rede pode influenciar decisivamente o comportamento previsto pelo modelo. Por exemplo, para $C = 4$ o modelo de redes prevê dois valores muito diferentes de permeabilidade dependendo dos tipos de elementos que são removidos. Notar que, de acordo com a forma como a remoção de elementos é feita e as restrições do gerador da rede, k para $C = 6$ é igual para os três casos. Apesar de C ser igual nos três casos, quando se removem apenas canais horizontais a estrutura dos canais oblíquos mantém-se imutável, o que não se passa quando se removem câmaras ou canais (oblíquos mais horizontais). Assim, as diferenças de comportamento devem-se sobretudo a alterações da estrutura da rede, embora se tenha mostrado também que a variação das características geométricas, em particular o volume de vazios, também tem alguma influência.

4.5.4.4 Influência do Valor do ângulo com a vertical

A influência do ângulo que os canais oblíquos fazem com a vertical depende das restrições impostas entre os diâmetros das câmaras e dos canais associados entre si, durante a geração da rede. Quando se impõem apenas as restrições $d_j < D_i$, alterações de θ fazem-se sentir sobretudo nos valores de L_x , L_y e no valor médio da distribuição de comprimentos dos canais horizontais. De notar que, de acordo com o modelo de geração da rede implementado neste trabalho, a distribuição dos comprimentos dos canais oblíquos é independente do valor deste parâmetro (ver Secção 3.4.5). Apesar das alterações na distribuição dos comprimentos dos canais horizontais alterar a resistência dos ramos da rede quando o escoamento através desta é linear, a influência dos canais é reduzida devido à sua orientação perpendicular em relação ao gradiente de pressões imposto na rede. Por outro lado, como as alterações do valor do comprimento dos canais apenas influenciam a resistência por fricção dos canais, para regime de escoamento não linear este efeito não é visível.

De acordo com os resultados apresentados na Figura 3.69, o aumento de θ resulta no aumento do valor da espessura equivalente da rede, E_R . Como as distribuições das dimensões características dos elementos da rede são independentes de θ , o campo de escoamento não se modifica com alterações do valor deste parâmetro. Deste modo, o valor da velocidade superficial através da rede diminui, aumentando a resistência equivalente, com o consequente aumento dos valores das constantes A e B da equação de MacDonald.

Quando na geração da rede se consideram as restrições de não intersecção, θ deve ser também tomado em consideração durante a atribuição dos diâmetros às câmaras e aos canais da rede. A verificação dos critérios resulta em alterações nas distribuições das dimensões características dos elementos da rede, dependentes de θ e da existência ou não de canais horizontais (ver Secção 4.5.4.3), podendo estas ter uma influência marcada no comportamento hidrodinâmico da rede.

Na Figura 4.32 são comparados os valores de permeabilidade previstos para redes tipo 10 para quatro valores de θ , em que se usaram as restrições de não intersecção na sua geração. Considerou-se $d/D = 0.5$, para $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$, sendo $\varepsilon = 0.4$. O comportamento observado é contrário ao comportamento de E_R em função de θ considerando apenas a restrição $d_j < D_i$, representado na Figura 3.69.

No entanto, o comportamento esperado de k com base nos resultados apresentados na Figura 3.69 é idêntico ao esperado assumindo que apenas as variações do valor da espessura equivalente fosse significativa. Este comportamento pode ser justificado assumindo que as distribuições dos diâmetros dos canais obtidas após a aplicação dos critérios de não intersecção nos quatro casos são equivalentes, resultando em comportamentos hidrodinâmicos idênticos para todos os casos estudados.

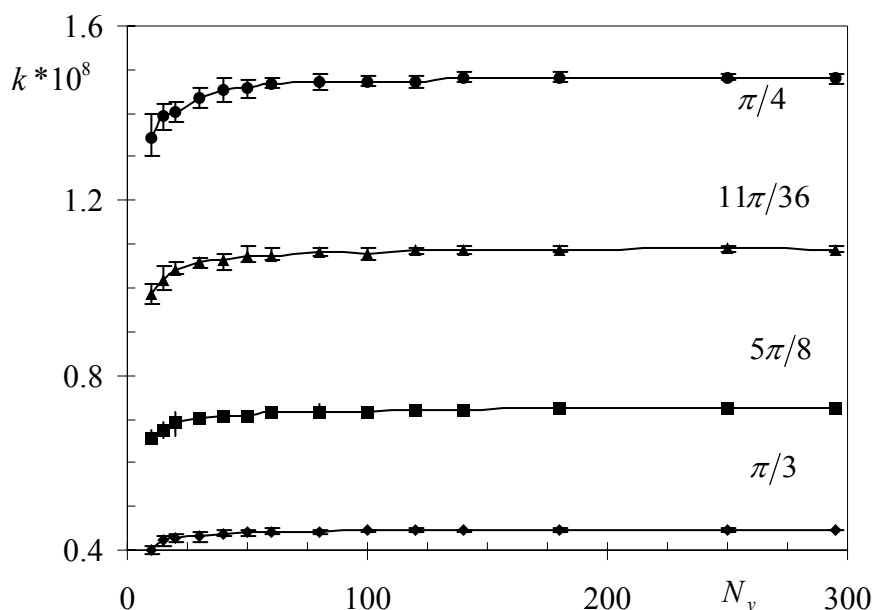


Figura 4.32 Comparação das curvas dos valores médios de k para redes tipo 10 considerando a restrição de não intersecção em função de N_y para quatro valores de θ .

4.5.4.5 Influência do Valor do comprimento médio dos canais

Este parâmetro influencia o comportamento previsto pelo simulador hidrodinâmico modificando as características geométricas da rede e a resistência associada aos ramos da rede.

Em relação aos parâmetros geométricos da rede, aumentar l resulta no aumento de L_x , L_y e do volume de vazios da rede. De acordo com a Equação 3.12, as variações nos valores destes parâmetros devem-se compensar entre si, embora seja de esperar que E_R diminua com o aumento de l , devido à maior sensibilidade de L_x e L_y em relação ao volume total de vazios da rede. Deste modo, este efeito tende a aumentar o valor das constantes da equação de MacDonald, visto que a resistência macroscópica ao escoamento aumenta.

Por outro lado, aumentar l resulta no aumento de R_j^F . Este efeito faz-se sentir apenas para a resistência por fricção do fluido nas paredes dos ramos da rede, sendo significativo apenas para escoamento em regime linear (ver Secções 4.3.3 e 4.5.1). Deste modo, a influência de variações em l é mais sentida nos valores previstos de permeabilidade, em que os efeitos na resistência ao escoamento e nos valores dos parâmetros macroscópicos da rede se combinam. De acordo com a equação 4.21, a resistência por fricção é proporcional a l , embora a dependência de R_j^F neste parâmetro seja menos marcada do que para d_j . Deste modo, o aumento de l_0 resulta no aumento da resistência total ao escoamento, diminuindo deste modo a permeabilidade e aumentando o valor de B . No entanto, como R_j^F é muito menor que R_j^{ET} para escoamento não linear perfeitamente desenvolvido, as variações em B não são significativas, sendo desprezáveis, sendo o valor deste parâmetro sobretudo uma função de d_j .

4.5.5 Influência da Inclusão ou não das Calotes

A influência das calotes esféricas formadas pelas entradas dos canais nas câmaras faz-se sentir na distribuição dos comprimentos dos canais e na determinação da espessura equivalente da rede. Em qualquer das situações, a influência relativa das calotes depende das distribuições dos diâmetros das câmaras e dos canais.

As conclusões apresentadas na Secção 3.7.1.3 permitem concluir que a influência das calotes no volume total de vazios e na distribuição dos comprimentos oblíquos e horizontais é significativa apenas quando $d/D \approx 1$. Nestas condições, o comprimento das calotes é maior, o que implica a diminuição do volume de vazios da rede e o deslocamento da distribuição dos comprimentos dos canais para valores mais baixos. Como se conclui nas secções anteriores que a influência de alterações na distribuição de valores de l_j no comportamento hidrodinâmico da rede é pouco significativa, a influência deste parâmetro deve-se sentir mais pelas alterações no valor da espessura equivalente da rede. Para escoamento em regime não linear, em que o comprimento dos canais não é significativo na descrição do escoamento, este é o único efeito que deve ser tido em conta.

Na Figura 4.33 são apresentados e comparados os valores de permeabilidade em função de N_y , para redes tipo 11 com $N_x = 200$, três valores diferentes de d/D : 0.25, 0.50 e 0.75;

usando a restrição $d_j < D_i$, e $\varepsilon = 0.4$. Os valores de d/D foram seleccionados de modo a analisar situações em que, de acordo com os resultados da Secção 3.7, a influência pode ser pouco ou muito significativa. Os pontos cheios correspondem aos casos em que o volume das calotes é tomado em conta, os pontos vazios quando o volume das calotes não é tomado em conta. De modo a realçar as possíveis diferenças entre os dois casos, considerou-se $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$. Independentemente da inclusão das calotes, o mesmo comportamento qualitativo é observado para todas as curvas, assim como continuam a ser válidos os critérios obtidos atrás que asseguram que os resultados obtidos pelo simulador de escoamento são estatisticamente válidos.

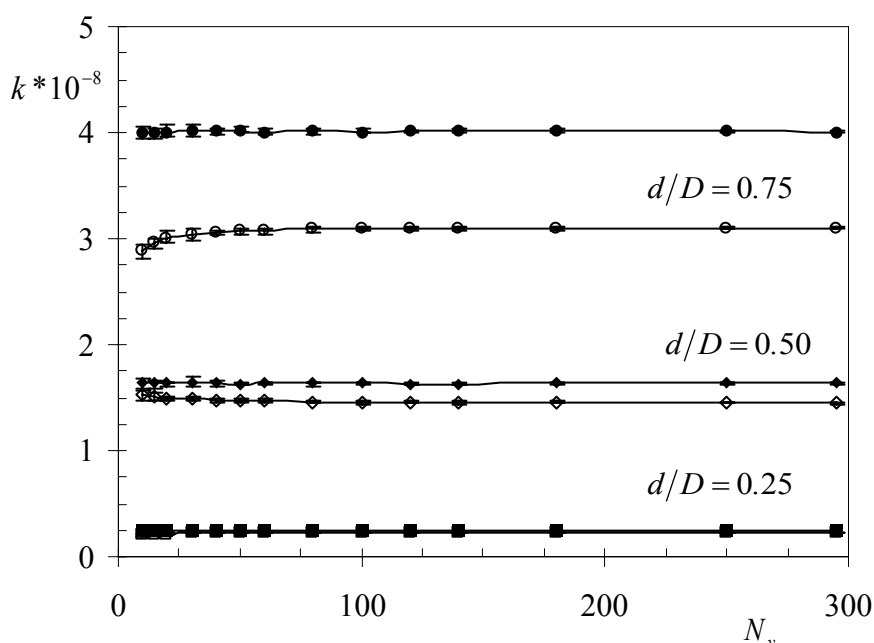


Figura 4.33 Comparação das curvas dos valores médios de k para redes tipo 11 e três valores de d/D usando a restrição de $d_j < D_i$ em função de N_v , considerando ou não o volume das calotes.

As diferenças entre os valores de permeabilidade são tanto maiores quando maior é d/D . Este comportamento deve-se ao aumento da importância do volume de vazios da rede associados às calotes, V_{Cal} . Em particular, o aumento de d/D resulta no aumento da diferença entre o volume de vazios de redes em que é considerado ou não V_{Cal} , sendo este valor mais baixo quando as calotes não são tomadas em consideração. Como as características de escoamento são independentes das calotes, e mesmo para $d/D = 0.75$ a influência das restrições entre os valores dos diâmetros das câmaras e dos canais associados entre si, as diferenças observadas nos valores de permeabilidade devem-se a alterações em E_R .

4.5.6 Influência dos Parâmetros Estatísticos

De acordo com os resultados obtidos na Secção 3.7.2 e a análise da distribuição ULLN efectuada no Apêndice A.4, os parâmetros mais influentes nas características da rede são o desvio padrão e a razão entre os valores médios das distribuições das dimensões características dos elementos da rede. Como se assume que o comportamento hidrodinâmico depende essencialmente das características geométricas da rede, considera-se que são também estes parâmetros os mais influentes na descrição do escoamento através da rede.

4.5.6.1 Influência do Valor do Desvio Padrão

A influência deste parâmetro é distinta conforme o tipo de restrições impostas entre os valores dos diâmetros das câmaras e dos canais associados entre si. Como se conclui na Secção 3.7.2, as alterações nas distribuições das dimensões características são mais importantes quando as restrições de não intersecção são consideradas. Como o comportamento hidrodinâmico da rede é dominado pelos valores dos diâmetros dos canais e é nesta distribuição que as alterações são mais fortes, é de esperar um comportamento distinto dos dois tipos de restrições.

Na Figura 4.34 são comparados os valores de permeabilidade em função de N_y para $N_x = 100$ obtidos para diferentes conjuntos de valores do desvio padrão das distribuições de valores de d_j e de D_i , usando apenas a restrição $d_j < D_i$. Foram consideradas redes tipo 11, com $d/D = 0.25$, sendo o volume associado às calotes tomado em conta. Mantendo-se um dos valores de desvio padrão constante, verifica-se que as variações mais significativas nos valores de permeabilidade se observam para variações de σ_d . A resistência dos ramos da rede é uma função de d_j , em particular dos valores mais baixos. Quando o desvio padrão da distribuição de valores de d_j aumenta, passam a ser os canais de menor diâmetro que dominam a resistência ao escoamento da rede, resultando em maior resistência da rede ao escoamento e menores valores de permeabilidade.

Alterações na distribuição de valores de D_i sentem-se apenas no volume de vazios da rede. Se o σ_D aumentar, a percentagem de câmaras cujo diâmetro é superior ao valor médio também aumenta. Como o volume total das câmaras depende dos elementos com maior diâmetro, então o volume de vazios da rede aumenta. No entanto, este efeito é contrabalançado pela diminuição do comprimento dos canais, que diminui o volume de vazios

da rede. Para as condições em que os resultados apresentados na Figura 4.34 foram obtidas, os dois efeitos compensam-se, obtendo-se valores praticamente idênticos se σ_d for mantido contante, sendo de esperar que estes efeitos sejam pouco significativos.

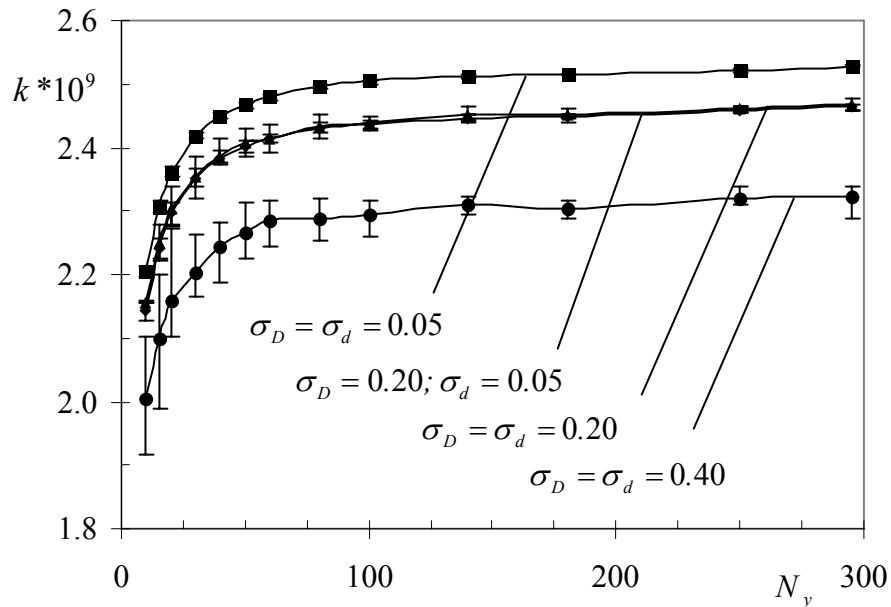


Figura 4.34 Comparação das curvas dos valores previstos de k em função de N_y , para redes tipo 11 e diferentes conjuntos de valores de desvio padrão, usando a restrição $d_j < D_i$.

Observa-se também que as variações da permeabilidade são mais acentuadas quando os valores do desvio padrão aumentam e em particular as relativas aos diâmetros dos canais. No entanto, observa-se em todos os casos que as variações diminuem com o aumento das dimensões da rede, sendo desprezáveis desde que $N_y \geq 100$, de acordo com os critérios já propostos anteriormente.

Como se conclui na Secção 3.7.2, quando se usam as restrições de não intersecção entre os canais à entrada de uma câmara, os valores do desvio padrão também influenciam a amplitude das alterações nas distribuições impostas inicialmente. Na Figura 4.35 são comparados os valores de permeabilidade em função de N_y para $N_x = 100$. Estes foram obtidos para diferentes conjuntos de valores do desvio padrão das distribuições de d_j e D_i . Foram consideradas redes tipo 11, com $d/D = 0.50$, de modo a permitir observar a influência dos valores do desvio padrão das duas distribuições. A utilização de valores baixos de d/D resulta em pequenas variações das distribuições iniciais, sendo o comportamento idêntico ao observado na Figura 4.34. Valores elevados de d/D resultam em alterações pronunciadas nas

distribuições iniciais, sendo as distribuições finais virtualmente independentes dos valores do desvio padrão (ver Secção 3.7.3). Comparando os resultados obtidos com os apresentados na Figura 4.34, observa-se o mesmo comportamento qualitativo para a influência de σ_d . Observa-se no entanto, uma influência mais marcada de σ_D . O aumento do valor deste parâmetro resulta em alterações acentuadas na distribuição de valores de d_j . Como esta distribuição se desloca para valores mais baixos de d_j , a resistência total dos elementos da rede aumenta e a sua permeabilidade diminui.

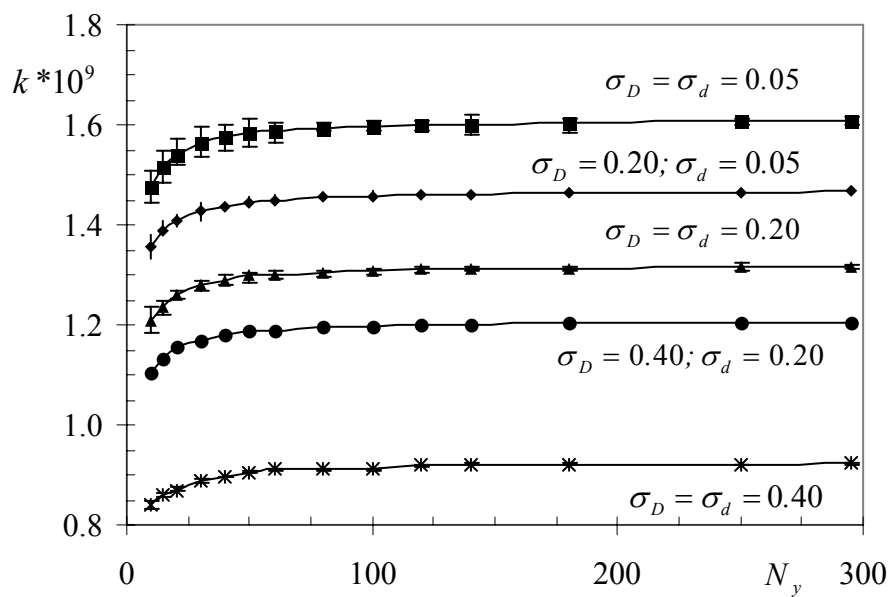


Figura 4.35 Comparação das curvas dos valores previstos de k em função de N_y para redes tipo 11, para diferentes conjuntos de valores dos desvios padrão, usando as restrições de não intersecção.

A verificação dos critérios de não intersecção também resulta em variações nos valores de D_i , que tendem a aumentar. No entanto, a influência das alterações nesta distribuição não é tão acentuada pois apenas se faz sentir nos valores dos parâmetros geométricos. Apesar do aumento do volume de vazios da rede resultar na diminuição do valor da espessura equivalente, com correspondente aumento da sua permeabilidade, observa-se uma diminuição do valor de permeabilidade mostrando que a resistência ao escoamento é controlada pelas variações na distribuição de valores de d_j .

Na Secção 4.5.3.1 na determinação dos critérios que asseguram que os valores previstos pelo modelo de redes são estatisticamente significativos observou-se que o valor limite era uma função N_y . Assumiu-se então que este comportamento se devia às características geométricas

da rede e dos seus elementos, em particular os valores do desvio padrão das distribuições das dimensões características das câmaras e dos canais.

Para esclarecer esta questão, são comparadas na Figura 4.36 os valores de permeabilidade em função de N_y , para N_x constante. Foram consideradas redes tipo 11, $d/D=0.5$, com a restrição $d_j < D_i$, para dois conjuntos de valores do desvio padrão: $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$. Observa-se que, ao contrário dos resultados apresentados na Secção 4.5.6.1, o valor assintótico é praticamente independente de N_y , permitindo concluir que as características geométricas da rede e dos seus elementos também devem ser tomadas em conta na caracterização do comportamento previsto pelo modelo de redes. Comparando as curvas obtidas para os dois conjuntos de valores de desvio padrão, observa-se o mesmo comportamento qualitativo para valores elevados de N_y . As diferenças entre os valores previstos devem-se aos diferentes valores do desvio padrão considerados.

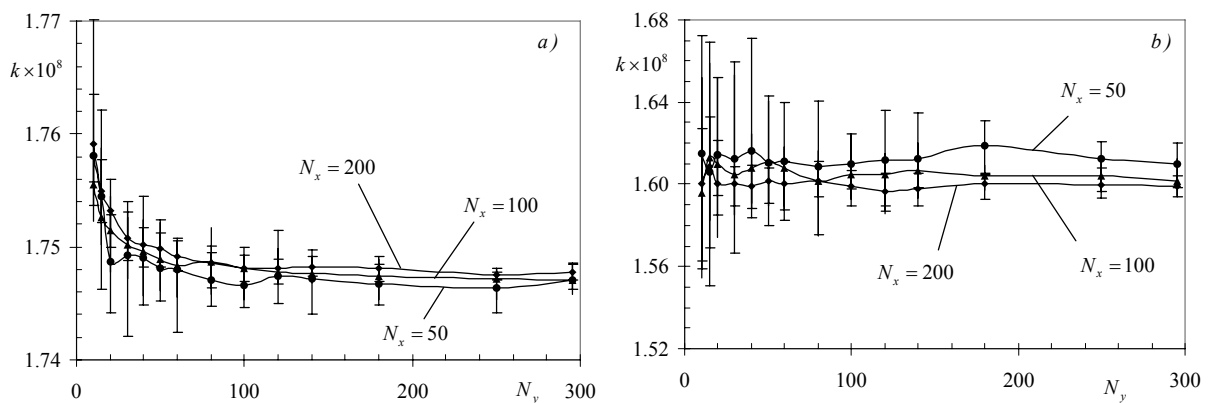


Figura 4.36 Comparação das curvas de k em função de N_y , para três valores de N_x em redes tipo 11, usando dois conjuntos de valores de σ_D e σ_d : a) $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$; b) $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$.

Para verificar se o comportamento observado depende apenas das características geométricas da rede ou também das características das distribuições das dimensões características dos elementos da rede, na Figura 4.37 são comparados os valores de k em função de N_y , para três valores de N_x , usando $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$. Foram consideradas redes com as mesmas características das consideradas na obtenção dos resultados apresentados na Figura 4.23. Comparando os resultados observam-se comportamentos distintos. Em particular, observa-se agora que o valor limite é praticamente independente de N_y , mostrando que as características

geométricas dos elementos da rede devem ser tomados em conta na caracterização do comportamento da rede.

No entanto, mesmo para a situação em que o valor limite de permeabilidade depende ligeiramente de N_y e/ou N_x , para valores elevados destes parâmetros as variações são muito pequenas e podem ser ignoradas com um erro inferior a 1%. Ao comparar os valores previstos pelo simulador hidrodinâmico com dados experimentais, o erro associado será superior do que o cometido ao assumir $N_x \geq 100$ e $N_y \geq 100$ como os valores que asseguram que os resultados obtidos pelo simulador hidrodinâmico são estatisticamente válidos.

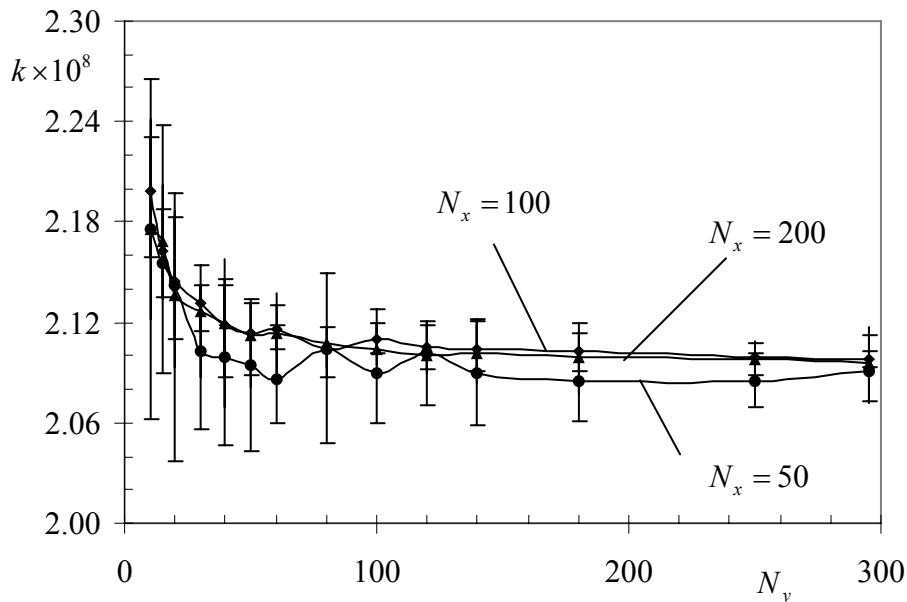


Figura 4.37 Comparação das curvas de k em função de N_y , para três valores de N_x , em redes tipo 00 com $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$.

4.5.6.2 Influência de D e d

A influência dos valores médios dos diâmetros das câmaras e dos canais influencia o comportamento previsto pelo simulador de escoamento a diferentes níveis, conforme a forma como são variados os valores de D ou d , ou consoante a aplicação das restrições impostas pelo gerador da rede aos valores de D_i e d_j ao nível local, ou ainda se as calotes são tomadas em conta ou não no cálculo do volume de vazios da rede.

Em relação à influência das calotes, esta já foi analisada na Secção 4.5.5. Em relação à influência das restrições entre os diâmetros das câmaras e dos canais ao nível local, é necessário tomar em conta que a restrição $d_j < D_i$ é sempre considerada independentemente

de se tomar em conta as restrições de não intersecção. Assim, a restrição $d_j < D_i$ pode-se considerar como um padrão que permite determinar qual é o impacto da aplicação das restrições de não intersecção no comportamento previsto pelo simulador de escoamento.

Na Figura 4.38 são apresentados e comparados os valores da permeabilidade em função de N_y , para $N_x = 200$ usando três valores diferentes de d/D : 0.25, 0.50 e 0.75 e considerando $D = 0.004$ e fixado, para os dois tipos de restrições consideradas neste trabalho. Os resultados obtidos usando somente a restrição $d_j < D_i$ são apresentados com os pontos cheios, enquanto os obtidos com as restrições de não intersecção são representados como pontos vazios. Foram usadas redes 11, com $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$, não se tomando em conta o volume das calotes nas simulações. Como esperado, como se assumiu que D se mantém constante, variando d , aumentar d/D é equivalente a reduzir a resistência total da rede ao escoamento e a aumentar k . Comparando as curvas obtidas observa-se que quanto maior for d/D maiores as diferenças entre os resultados obtidos com os dois tipos de restrições. De acordo com os resultados da Secção 3.4.3, quando mais próximos forem D e d mais difícil é verificar a restrição de não intersecção.

Como o gerador procura verificar os critérios procurando calcular valores dos diâmetros dos canais até que estes sejam verificados, que têm ser necessariamente menores, os valores mais baixos de permeabilidade previstos quando a restrição de não intersecção eram esperados. Deste modo, é possível concluir que também as condições impostas na geração da rede, um pouco como no caso das calotes, influenciam o comportamento previsto pelo simulador de escoamento. Na Figura 4.38 é possível observar também que as condições que asseguram a significância dos resultados também são independentes das restrições impostas entre os valores de D_i e d_j . No entanto, para $d/D = 0.75$ é possível observar que a curva tende para um valor limite apenas para $N_y > 200$, apesar de a partir de $N_y > 100$ (condição definida atrás), a variação dos resultados ser muito pequena e ser possível assumir-se com um erro pequeno que o comportamento limite já foi alcançado.

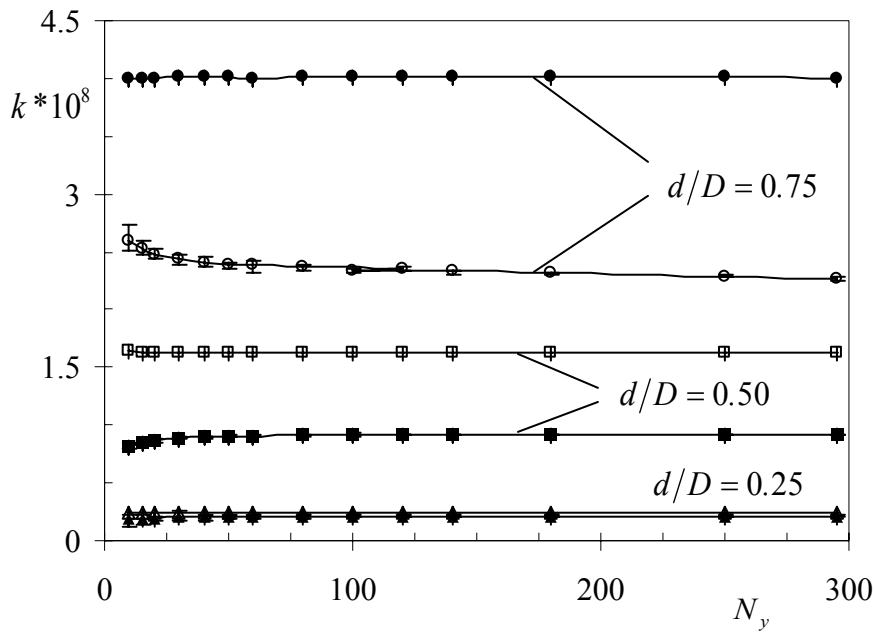


Figura 4.38 Comparação das curvas dos valores médios de k em função de N_y , em redes tipo 11 e três valores de d/D para a restrição $d_j < D_i$ (pontos cheios) e para as restrições de não intersecção (pontos vazios).

Na Figura 4.39 são apresentados os valores de permeabilidade em função de N_x para redes tipo 11, $N_y = 200$, três valores diferentes de d/D e usando as restrições de não intersecção na geração da rede. Em todos os casos a porosidade é igual a 0.4. Verifica-se que os critérios de significância continuam a ser válidos mesmo quando se aplicam as restrições de não intersecção. Ao contrário dos resultados obtidos para o outro tipo de restrições, observa-se uma influência menos acentuada do parâmetro d/D nos valores de permeabilidade obtidos pelo simulador hidrodinâmico.

A aplicação das restrições de não intersecção resulta na alteração das distribuições inicialmente impostas à rede, que dependem de d/D . De acordo com os resultados da Secção 3.7.2.2, as alterações das distribuições entre $d/D = 0.25$ e $d/D = 0.5$ são mais acentuadas do que entre $d/D = 0.5$ e $d/D = 0.75$, o que indica que as distribuições dos diâmetros das câmaras e dos canais, em particular esta última, se encontram já na forma limite. Deste modo, a variação do valor de permeabilidade não é tão forte como a que se observou na Figura 4.38, mantendo-se no entanto o mesmo comportamento qualitativo.

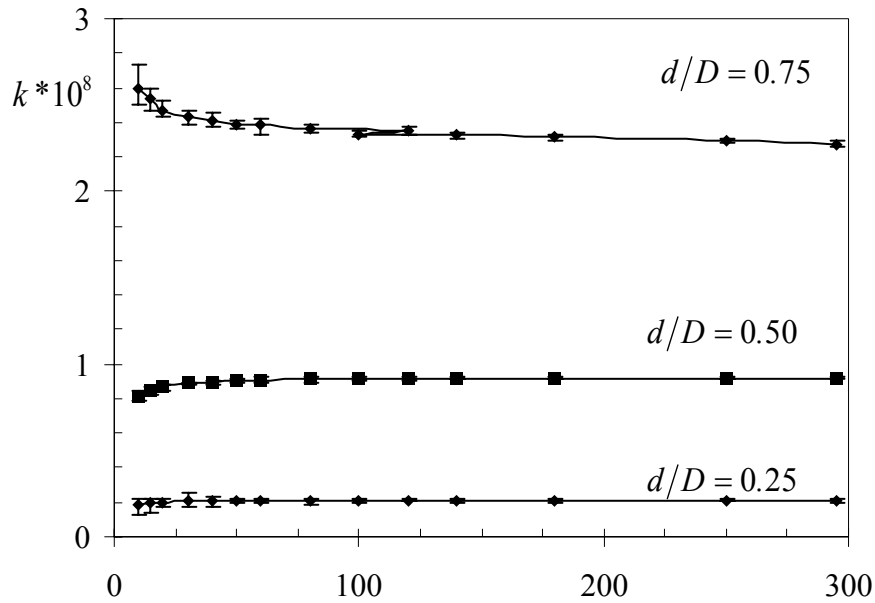


Figura 4.39 Comparação das curvas dos valores médios de k em função de N_y para redes tipo 11 e usando três valores de d/D usando as restrições de não intersecção.

Na Figura 4.38 analisou-se apenas a influência no comportamento previsto pelo simulador de escoamento dos dois tipos de restrições implementadas no gerador da rede entre os valores de D_i e de d_j . No entanto, de acordo com a descrição do escoamento através dos elementos da rede, as expressões analíticas apresentadas na Secção 4.4.3.3 mostram que o comportamento previsto pelo modelo depende da forma como D e/ou d são variados.

Na Figura 4.40 são apresentados os valores de permeabilidade em função de d/D mantendo ou D ou d e variando o outro valor. Foram consideradas redes 100×100 , $l = 0.007$, $\varepsilon = 0.4$, sem tomar em conta o volume das calotes, com canais horizontais e fronteiras periódicas, e impondo-se apenas a restrição $d_i < D_j$. Quando D varia $d = 0.002$ e quando d varia $D = 0.004$. Foram considerados dois pares de valores dos desvios padrão das distribuições dos valores de D e d_j : $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$, de modo a completar a análise da Secção 4.5.6.1 sobre a influência destes parâmetros. Na mesma figura são apresentados os valores previstos para redes uniformes com as mesmas características geométricas, tendo estes sido previstos usando a Equação 4.55. Boa concordância é obtida entre as curvas teóricas e os valores obtidos para as distribuições com valores baixos do desvio padrão, $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$. Para distribuições mais largas, correspondentes ao caso $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$, é possível observar que os desvios são tanto maiores quanto maior for o valor de d . O comportamento observado deve-se à imposição das restrições entre os diâmetros dos canais e

das câmaras a nível local. Quanto mais próximos estiverem os valores de D_i e d_j , mais provável é a ocorrência de situações durante a geração da rede em que $d_i > D_j$. Nesta situação, como é descrito na Secção 3.4.3, a distribuição dos diâmetros dos canais vai deslocar-se para valores mais baixos visto que para a verificação do critério se procura inicialmente um d_j mais baixo, apenas se calculando um valor mais elevado de D_i se for impossível verificar o critério apenas com novos valores de d_j . Assim, a permeabilidade vai baixar, o que se observa na Figura 4.40 quando d/D é próximo da unidade. Como a probabilidade de ocorrerem violações da restrição $d_i < D_j$ aumenta com σ_D e/ou σ_d , como esperado as maiores diferenças observam-se para o caso $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$.

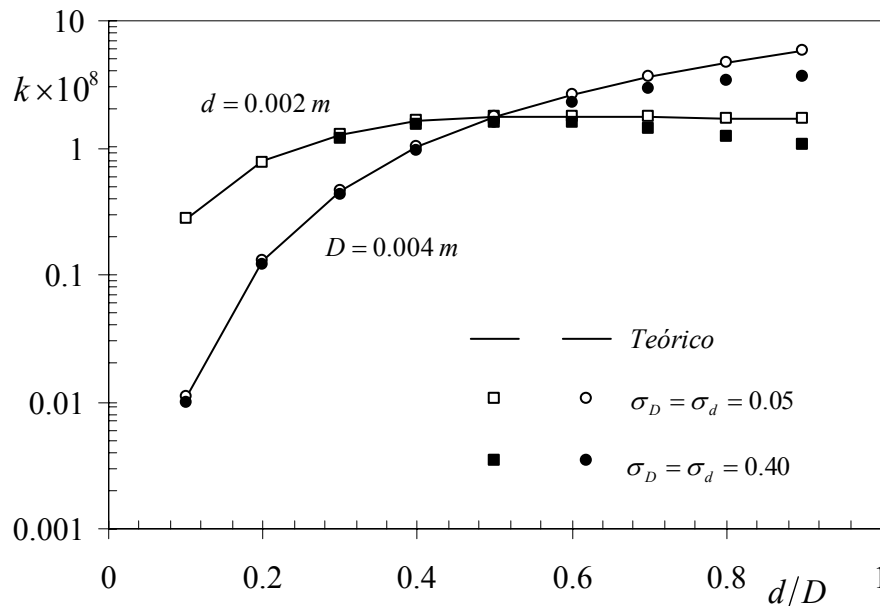


Figura 4.40 Comparação dos valores teóricos e previstos pelo simulador de escoamento da permeabilidade para D constante ou d constante, para dois pares de valores de σ_D e σ_d .

Comparando as curvas para D constante e d constante, observam-se diferenças significativas. Quando d/D é baixo, k aumenta com o incremento de d . A variação é mais marcada para o caso de D constante, em que d varia e vai influenciar a resistência da rede ao escoamento. Em particular, aumentar d/D resulta num aumento de d e na redução da resistência da rede ao escoamento, com o correspondente incremento na permeabilidade da rede, de acordo com o comportamento observado na Figura 4.40. Em relação ao caso em que d é constante, quando varia somente D apenas se modifica o volume de vazios da rede e não as características do campo de escoamento. Sendo esse efeito mais fraco quando comparado

com alterações na distribuição dos diâmetros dos canais, a variação nos valores previstos de permeabilidade é mais fraca, como se observa na Figura 4.40.

Para valores elevados de d/D em ambos os casos k tende para um valor limite e pode baixar ligeiramente, como se observa quando D é constante e fixado. O comportamento limite e mesmo a redução são explicados pela imposição da restrição $d_i < D_j$, que limita as variações dos diâmetros dos canais, e, para o caso de D constante, resulta mesmo em d_i mais baixos e consequentemente na redução de k devido ao aumento da resistência da rede ao escoamento.

Além do diferente comportamento previsto pelo modelo hidrodinâmico para os casos de D constante e d constante, as expressões analíticas da permeabilidade obtidas para uma rede uniforme, Equações 4.55 e 4.56, mostram que k varia de forma diferente conforme se variam os diferentes parâmetros geométricos da rede e dos seus elementos. A análise das expressões mostra que as variações mais marcadas são observadas quando d varia, resultado esperado visto ser a distribuição dos diâmetros dos canais o factor que controla a resistência dos ramos da rede, e consequentemente da rede, ao escoamento.

Na Figura 4.41 são representados os valores da permeabilidade em função do valor do diâmetro médio dos canais para dois casos: d/D ou D constante. Foram usadas redes com as mesmas características geométricas das que foram usadas na obtenção dos resultados apresentados na Figura 4.40, apresentando-se também as previsões teóricas na figura. Comparando os resultados obtidos é possível observar diferenças apreciáveis. Quando d/D é constante observa-se que a permeabilidade é directamente proporcional a d^2 , observando-se o mesmo comportamento para toda a gama de valores.

No entanto, quando D é constante é possível observar duas zonas distintas. Para valores elevados de d , a restrição $d_i < D_j$ resulta em valores mais baixos da permeabilidade. Como na Figura 4.40 as maiores diferenças entre as previsões teóricas e os valores obtidos pelo simulador de escoamento observam-se para $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$. Quando d é baixo a permeabilidade é directamente proporcional a d^3 , o que mostra que para o modelo de redes considerado neste trabalho a dependência de k em função de d depende das características geométricas da rede e dos seus elementos.

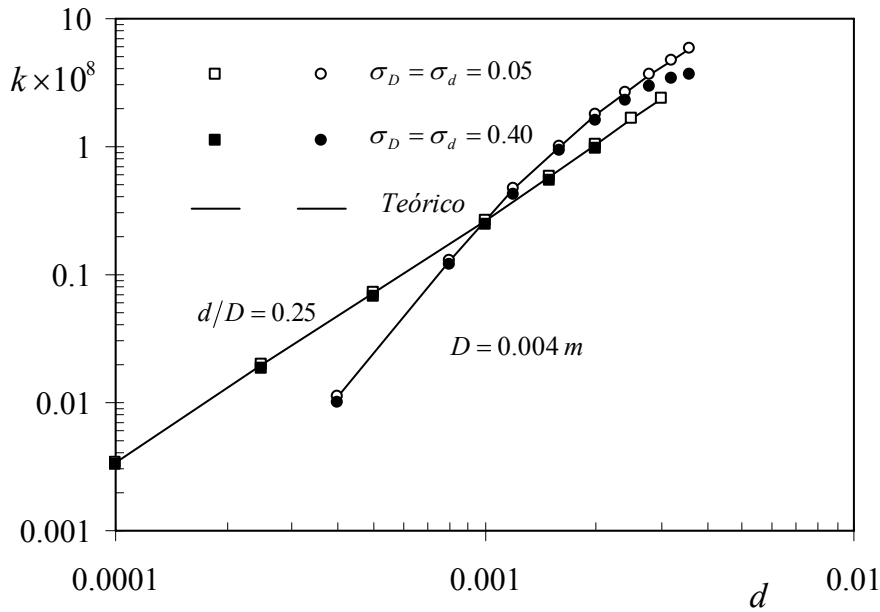


Figura 4.41 Comparação dos valores teóricos e previstos pelo simulador de escoamento da permeabilidade para D constante ou d/D constante, para dois pares de valores de σ_D e σ_d .

As conclusões anteriores poderiam ser obtidas analisando o comportamento qualitativo previsto pela Equação 4.55. Quando apenas varia d , observa-se nessa equação que o numerador é função de d^2 e o denominador é função de d^{-1} , o que resulta numa dependência em d^3 , como se observa na Figura 4.41. Quando d/D se mantém constante, o denominador passa a ser praticamente independente do valor de d , passando a permeabilidade a ser uma função de d^2 , de acordo com os resultados apresentados na Figura 4.41.

A comparação entre os valores previstos usando as expressões obtidas para uma rede uniforme e os previstos usando o simulador de escoamento mostra que a aproximação de rede uniforme é boa desde que os valores de σ_D e σ_d sejam baixos. Por outro lado, independentemente dos valores do desvio padrão das distribuições das dimensões dos elementos da rede, as previsões efectuadas para uma rede uniforme estão de acordo, pelo menos qualitativamente, com o comportamento previsto pelo simulador do escoamento, reforçando a ideia de que assumir que a rede é uniforme é adequado em muitas situações práticas.

Comparando as expressões teóricas das constantes A e B da Equação de MacDonald obtidas para redes uniformes (ver Secção 4.4.3.3) e as distribuições das velocidades nos canais para regime linear e não linear efectuada na Figura 4.26 é possível concluir-se que as características do escoamento alteram-se com a mudança do regime de escoamento. Na

Figura 4.42 são apresentadas as curvas de F^* em função de Re^* para dois valores de d/D obtidos com dois pares diferentes de D e d . Para escoamento em regime linear observa-se o comportamento esperado, ou seja, para cada par de valores de D e d correspondentes a um dado d/D , F^* é um função de d^{-4} . As diferenças observadas devem-se às variações dos valores de d e são proporcionais a d^{-2} . Para escoamento não linear as curvas para igual valor de d/D começam a aproximar-se a partir da zona de transição, alcançando valores limites para Re^* elevados similares. Este resultado é inesperado visto que a dependência da resistência dos ramos da rede é idêntica para escoamento linear e ou não linear, ou seja, são função de d^{-4} . Por outro lado, comparando o comportamento qualitativo previsto pelo simulador de escoamento com a equação de Ergun usando as constantes propostas por MacDonald *et al.* (1979) para toda a gama de valores de Re^* , observam-se diferenças significativas, sobretudo na zona de transição, mesmo para o mesmo valor de d/D , sendo estas mais marcadas quanto menor for d/D .

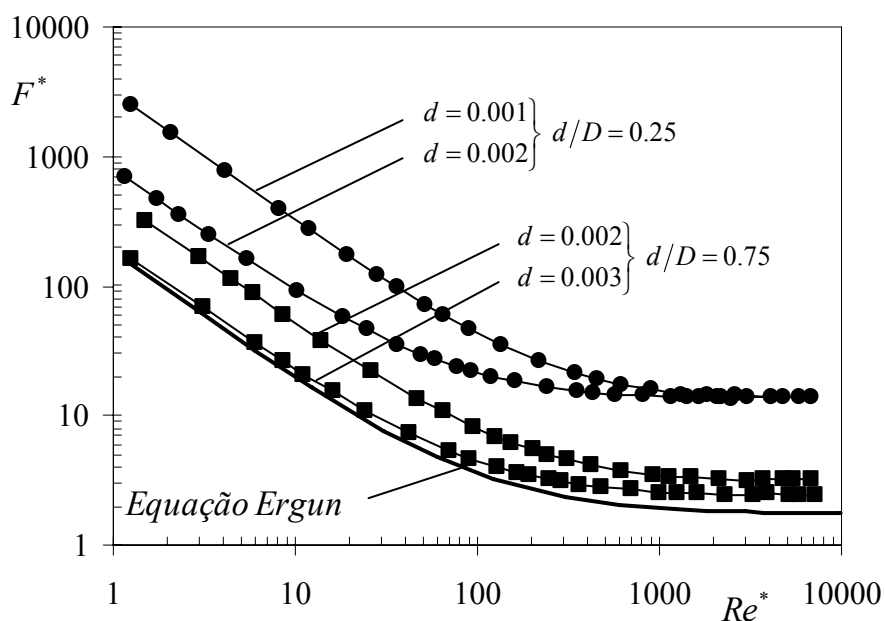


Figura 4.42 Curvas de F^* em função de Re^* para dois valores de d/D , sendo considerados dois pares de valores de D e d para cada d/D .

No entanto, comparando as expressões para os termos da resistência ao escoamento dominantes para os regimes de escoamento limites algumas diferenças podem ser observadas. Para uma rede uniforme é possível obter uma expressão analítica para a razão entre os valores previstos de F^* , assumindo que q_T e d/D são constantes mas podendo variar d e D . A dedução das expressões é efectuada em detalhe no Apêndice B.5.4. Para uma rede uniforme

com $C = 6$, redes grandes e sem tomar em conta o volume das calotes as expressões obtidas são

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^4 \left(\frac{\pi l + 4d_1}{\pi l + 4d_2}\right) \left(\frac{l + D_2}{l + D_1}\right) \left(\frac{2D_1^3 + 6d_1^2 l + 3d_1^2 l_h}{2D_2^3 + 6d_2^2 l + 3d_2^2 l_h}\right)^2, \text{ escoamento linear (4.67)}$$

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^4 \left(\frac{l + D_2}{l + D_1}\right) \left(\frac{2D_1^3 + 6d_1^2 l + 3d_1^2 l_h}{2D_2^3 + 6d_2^2 l + 3d_2^2 l_h}\right)^2, \text{ escoamento não linear (4.68)}$$

em que $l_h = 2l \sin \theta + (2 \sin \theta - 1)(D - 2h)$ e os índices 1 e 2 correspondem a cada um dos pares de valores de D e d . As expressões obtidas para cada um dos regimes de escoamento são similares e função apenas dos valores médios das dimensões características dos elementos da rede e do ângulo θ . A única diferença é a inclusão de mais um termo na expressão para escoamento linear, correspondente ao termo R_j^{EL} . Apesar de na Figura 4.42 se apresentar F^* em função de Re^* , pode-se mostrar que o mesmo comportamento qualitativo é observado quando os resultados são apresentados na forma F^* em função de q_T . Expressões similares podem ser obtidas para a razão entre os valores de F^* mantendo Re^* constante, mas estas são função de q_T e não permitem uma comparação directa dos resultados.

As expressões obtidas prevêm bastante bem os valores de F_1^*/F_2^* observados na Figura 4.42, permitindo concluir que as diferenças observadas no comportamento da rede se devem à mudança dos termos dominantes da resistência ao escoamento nos ramos da rede consequência da mudança do regime de escoamento.

4.6 Análise de Sensibilidade do Modelo Geométrico

Nas secções anteriores analisou-se a influência dos parâmetros geométricos e das distribuições das dimensões características dos elementos da rede no comportamento previsto pelo simulador hidrodinâmico. Comparando os resultados observados experimentalmente com os previstos pelo modelo, é possível concluir que este é adequado para descrever o comportamento qualitativo de um meio poroso real, em particular leitos de enchimento de partículas.

Nas secções anteriores assumiu-se que os valores dos diferentes parâmetros são independentes entre si, o que pode não se verificar para um meio poroso real. O modelo

geométrico desenvolvido no Capítulo 3 permite concluir que os valores médios das distribuições das dimensões características dos elementos da rede são função da porosidade do meio e da distribuição das dimensões características das partículas que formam o meio poroso. Apesar de outros factores terem de ser tomados em conta para uma descrição completa da estrutura de um meio poroso, tal como por exemplo a geometria das partículas, os valores previstos pelo modelo estão de acordo com os valores apresentados na literatura para meios porosos e com características idênticas aos leitos de enchimento que serviram de base ao desenvolvimento do modelo geométrico.

Nesta secção vai ser analisada a influência da existência de correlações entre os parâmetros geométricos da rede com base no modelo geométrico. No caso geral, os valores médios das distribuições dos diâmetros das câmaras e dos canais são função de ε , D_p e θ . Para os modelos simplificados T1S e T2S, assumiu-se que θ é uma função de ε , reduzindo-se assim o número de variáveis independentes para dois e permitindo a determinação dos valores médios das distribuições de tamanhos dos elementos da rede, com base em dados experimentais de fácil determinação. De modo a simplificar a análise de sensibilidade dos modelos geométricos assume-se nesta secção que $D_p = 0.005$ m. Conforme o tipo de modelos, diferentes parâmetros devem ser estudados. Para os modelos T1 e T2, deve-se analisar a influência de ε e θ , enquanto que para os modelos T1S e T2S apenas é necessário analisar a influência de ε .

De acordo com as restrições impostas à estrutura da rede e aos modelos geométricos, o valor de θ deve encontrar-se entre $\pi/4$ e $\pi/3$ (ver Secções 3.4.8 e 3.5.5). O valor de ε apenas pode variar entre 0.476 e 0.26. Apenas serão consideradas distribuições pontuais para os diâmetros das câmaras e dos canais. Além de ser possível determinar as características do escoamento analiticamente, como o modelo geométrico se baseia na análise geométrica dos leitos de enchimento formados por esferas com o mesmo diâmetro, este deve ser aplicado a meios porosos em que as partículas possuem uma distribuição apertada de valores. A comparação dos valores previstos pelo modelo com valores obtidos experimentalmente suporta esta conclusão (ver Secção 3.6.7).

A distribuição dos valores dos números de coordenação das câmaras, C_i , e o tipo de fronteiras da rede não podem ser determinados com base no modelo geométrico. Em relação a este último parâmetro, os resultados apresentados na Secção 4.5.4.1 mostram que para redes com dimensões estatisticamente significativas os efeitos do tipo de fronteiras da rede são

desprezáveis. Uma vez que a caracterização analítica do escoamento apenas se pode efectuar para redes uniformes, ou seja, com fronteiras periódicas, serão apenas consideradas redes deste tipo.

A influência de C faz-se notar sobretudo em A_N , sendo o seu valor controlado pela existência ou não de canais horizontais na rede. Na Secção 4.5.4.3 mostrou-se que as variações em A e B são proporcionais às variações em E_R . Deste modo, as conclusões qualitativas obtidas para redes com e sem canais horizontais são idênticas, diferindo apenas nos valores obtidos em cada uma delas.

Usou-se o modelo ICAM por ser o único capaz de descrever qualitativamente todos os regimes de escoamento através de um meio poroso. Apesar de $\sum K_j$ não ser conhecido à partida, como o comportamento dos ramos da rede é similar e independente do valor deste parâmetro, usou-se $\sum K_j = 2.5$ em todas as simulações. De acordo com as conclusões da Secção 4.5.2, os resultados das simulações vão ser representados na forma F_V versus Re^* . De modo a assegurar que os resultados obtidos são significativos, foram usadas redes 200×200 tipo 10. Apenas foram consideradas as restrições $d_j < D_i$, visto que os valores médios das dimensões características dos elementos da rede previstos verificam apenas os critérios de não intersecção nos extremos de valores de porosidade em que estes são definidos.

4.6.1 Análise de Sensibilidade dos Modelos T1 e T2

Na Figura 4.43 são apresentadas as curvas de F_V em função de Re^* previstas pelo modelo T1 para dois valores de θ , $\pi/4$ e $\pi/3$, sendo possível observar o mesmo comportamento qualitativo em função da porosidade, em particular na zona de transição entre os regimes de escoamento linear e não linear. Com excepção da curva correspondente a $\varepsilon = 0.26$, observa-se uma variação regular entre as curvas previstas para os restantes valores de porosidade. Em particular, quanto menor for ε , menor é o valor da ordenada na origem, o que equivale a valores menores de A , excepto para $\varepsilon = 0.26$. Este comportamento indica uma diminuição da resistência macroscópica da rede com a diminuição da porosidade, o que é contrário ao comportamento qualitativo previsto.

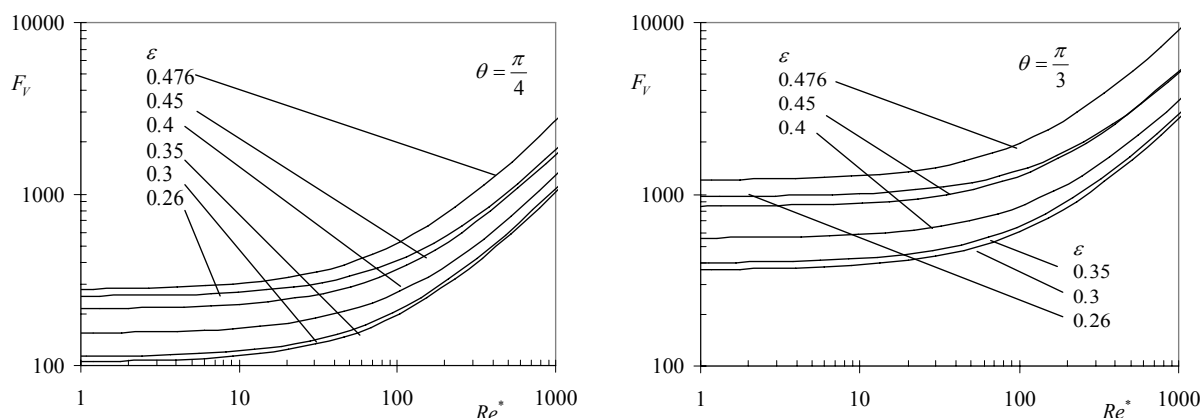


Figura 4.43 Influência de θ nas curvas de F_v em função de Re^* previstas pelo modelo T1 para dois valores de θ .

Apesar do modelo geométrico prever a redução de d com a diminuição de ε (ver Secção 3.5.4), para valores elevados de ε a variação é pouco significativa, quando comparada com a variação de D . As câmaras não interferem directamente no comportamento hidrodinâmico dos ramos da rede mas sim através de variações em E_R , pelo que nesta gama de valores são as alterações nos valores dos parâmetros geométricos da rede ao nível macroscópico que estão a controlar o seu comportamento.

Para valores de porosidade baixos (menores que 0.30), esta tendência inverte-se. Nesta zona, D é constante e são as alterações no comportamento do simulador hidrodinâmico que passam a ser dominadas pelas variações nos valores de d . Uma vez que a diminuição do diâmetro dos canais aumenta a resistência da rede, o valor limite de F_v para regime de escoamento laminar vai aumentar com a redução de ε , o que revela uma maior resistência ao escoamento da rede.

Comparando as curvas obtidas para igual valor de porosidade, observa-se que A aumenta com o aumento de θ . De acordo com a analogia entre a tortuosidade e θ com base na estrutura da rede, o percurso do fluido através da rede é proporcional a θ , resultando numa maior resistência ao escoamento. Em relação aos valores previstos pelo modelo geométrico, este efeito faz-se sentir principalmente no aumento do comprimento médio dos canais previsto pelos modelos. Por outro lado, os resultados obtidos nas Secções 3.7.1 e 4.5.4.4 mostram que a influência em E_R também deve ser tida em conta. Em particular, observa-se um aumento da espessura equivalente da rede, resultando no aumento da área de secção recta disponível para o escoamento. Este efeito resulta no aumento da resistência macroscópica ao

escoamento da rede, com a consequente redução do valor da permeabilidade. A combinação dos dois efeitos resulta em valores de resistência ao escoamento proporcional a θ , aumentando deste modo A .

Na Figura 4.44 são comparados os valores das constantes A e B previstas pelo modelo T1 em função de θ . Como os valores dos parâmetros da equação de MacDonald são proporcionais à resistência da rede ao escoamento, analisar a dependência destes em função das características geométricas e estruturais da rede é equivalente a utilizar as curvas de F_v versus Re^* . O comportamento observado encontra-se de acordo com os resultados previstos com base na análise dos resultados apresentados na Figura 4.43. Como a maior parte dos dados experimentais se encontra nesta forma, esta será a estratégia usada na Secção 4.7.3 para a comparação das previsões do modelo com dados experimentais.

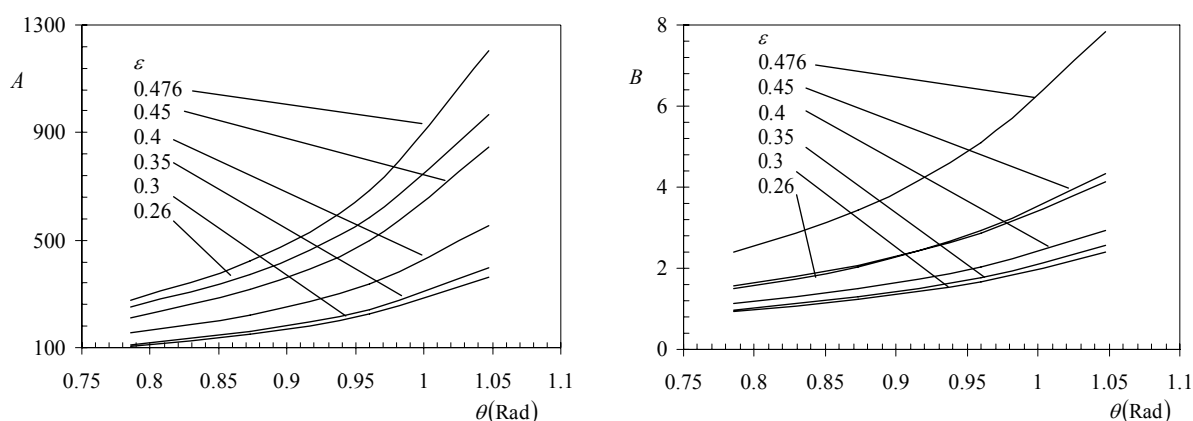


Figura 4.44 Comparação dos valores previstos pelo modelo T1 das constantes A e B em função de θ para vários valores de porosidade.

Na Figura 4.45 são apresentados os valores das constantes A e B previstos pelo modelo T2 em função de θ para vários valores de porosidade. Como os dois modelos prevêem valores similares para os valores médios das dimensões características dos elementos da rede, este comportamento era esperado. A diferença principal entre os dois modelos é a inclusão ou não do volume de calotes na determinação do valor de E_R (modelos T2 e T1 respectivamente). Os resultados mostram que esta hipótese não é significativa para a descrição qualitativa do escoamento através da rede com base nos modelos geométricos.

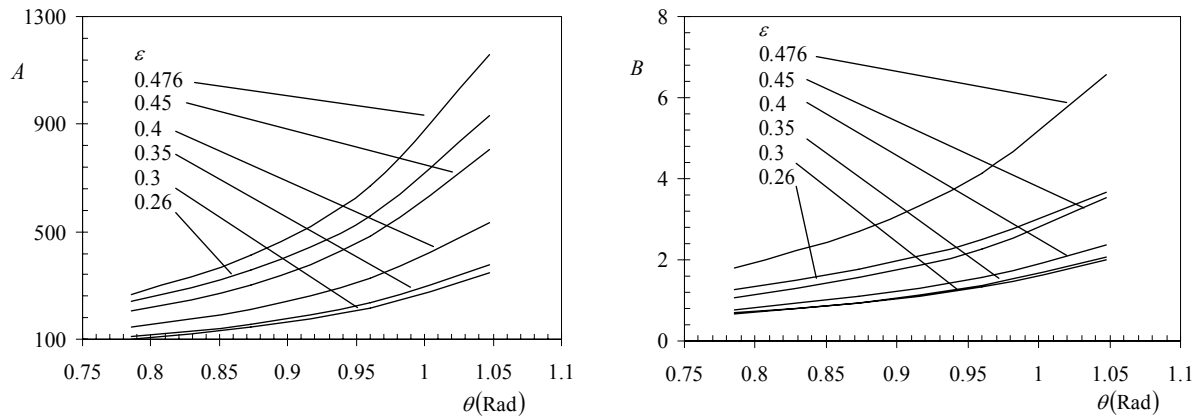


Figura 4.45 Comparação dos valores previstos pelo modelo T2 das constantes A e B em função de θ para vários valores de porosidade.

A comparação dos valores de A e B em função de θ previstos pelos dois modelos é efectuada na Figura 4.46 para diferentes valores de porosidade, sendo os valores previstos pelo modelo T1 representados pela curva a cheio e os valores previstos pelo modelo T2 representados pela curva a tracejado. Verifica-se que as diferenças entre os modelos são mais acentuadas na zona de escoamento não linear, relevando que o comportamento do modelo nessa zona de escoamento é mais dependente das características do modelo.

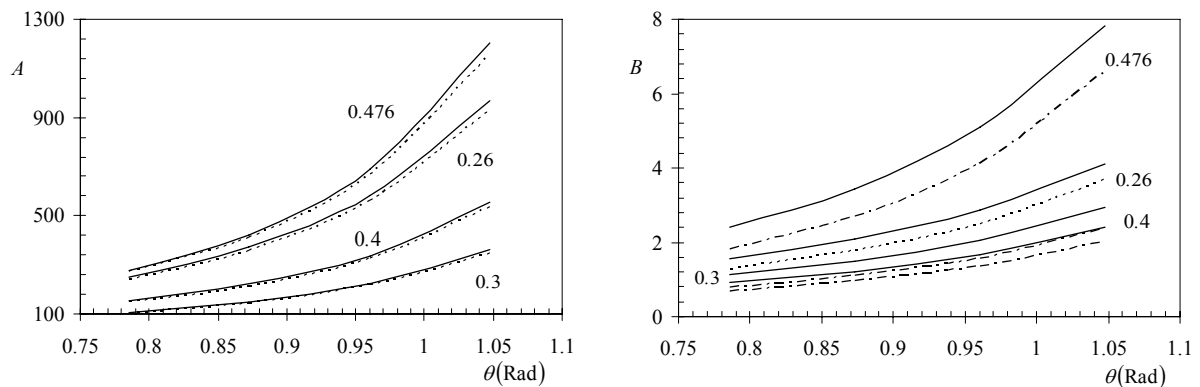


Figura 4.46 Comparação dos valores previstos pelos dois modelos completos, das constantes A e B em função de θ , para vários valores de porosidade. Valores previstos pelo modelo T1 a cheio e valores previstos pelo modelo T2 a interrompido.

Este comportamento é justificado pela influência distinta de l_o nas duas zonas de escoamento. Na zona de escoamento laminar, a variação da resistência ao escoamento devido a variações de l_o são compensadas pela variação no valor E_R . Na zona de escoamento não linear, este parâmetro apenas influencia E_R . Como as diferenças entre os valores de l_o previstos pelos

dois modelos são significativas, os valores de B previstos são diferentes, como se observa na Figura 4.46.

Experimentalmente (Ergun, 1952; Rumpf e Gupte, 1972; MacDonald *et al.*, 1979, Kim *et al.*, 1987; Kececioglu *et al.*, 1994), não são observadas variações tão fortes dos valores das constantes A e B com a porosidade. Em particular, a diminuição da resistência total da rede ao escoamento com a diminuição da porosidade não está de acordo com o comportamento qualitativo esperado para o escoamento através de um meio poroso, o que se deve à influência dos parâmetros geométricos no escoamento para valores de porosidade elevados. Apenas quando os valores de porosidade são baixos é que o comportamento previsto está de acordo com o esperado. Nas secções seguintes será analisado o comportamento previsto pelos modelos simplificados e determinado através da comparação entre os resultados apresentados nesta secção, qual dos modelos deverá ser o mais adequado para caracterizar o escoamento através de um meio poroso real.

4.6.2 Análise de Sensibilidade dos Modelos T1S e T2S

Nos modelos T1S e T2S assume-se que θ é função de ε , reduzindo o número de parâmetros independentes para um, neste caso a porosidade. De modo a permitir a comparação directa dos resultados obtidos para os modelos completos, as simulações foram efectuadas usando o mesmo conjunto de condições.

Na Figura 4.47 são comparados os valores de F_v em função de Re^* obtidos com base no modelo T1S e usando as duas funções de $\theta = f(\varepsilon)$ consideradas neste trabalho (ver Secção 3.5.5). Dependendo do valor de porosidade, é possível observar comportamentos diferentes na zona de transição entre regime de escoamento linear e não linear. Em particular, para valores de porosidade baixos, a zona de transição desloca-se para valores mais elevados de Re^* . Todas as restantes curvas ($\varepsilon > 0.3$) são qualitativamente similares na zona de transição. Por outro lado, as relações entre as curvas para diferentes valores de ε são diferentes quando comparadas com as mesmas curvas obtidas para os modelos completos. Com excepção da curva prevista para $\varepsilon = 0.26$ as restantes curvas são idênticas, o que mostra que as variações nos valores médios das dimensões características dos elementos da rede se compensam resultando em comportamentos hidrodinâmicos idênticos.

Comparando as curvas obtidas para igual ε , observa-se que as diferenças entre as curvas são mais acentuadas para a equação LM. Esta equação prevê uma variação mais acentuada de θ

em função de ε , correspondendo a variações mais acentuadas dos valores dos parâmetros geométricos e consequentemente dos valores dos parâmetros macroscópicos do escoamento.

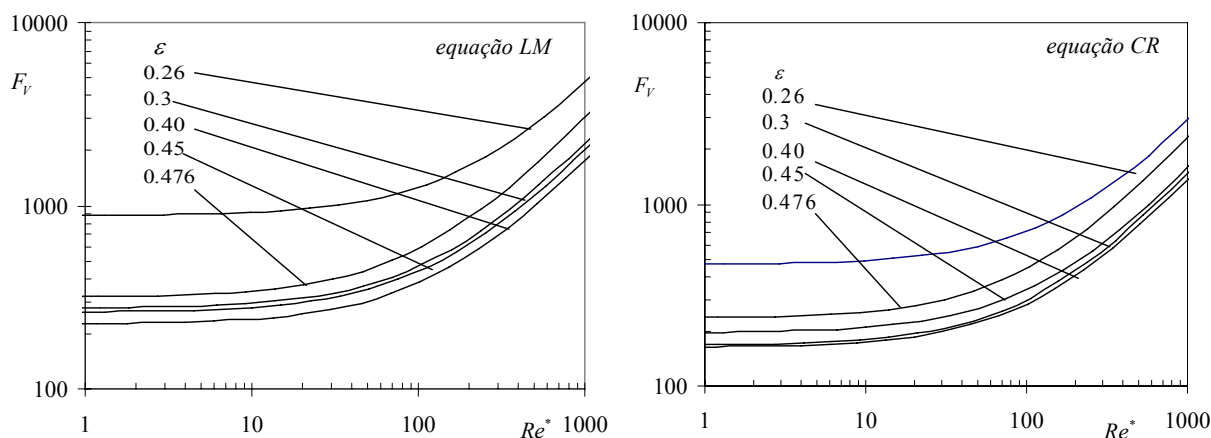


Figura 4.47 Comparação das curvas de F_v em função de Re^* para o modelo T1S, em função de ε e para as duas expressões $\theta = f(\varepsilon)$ consideradas.

Na Figura 4.48 são comparadas as curvas de F_v em função de Re^* previstas pelo modelo T2S, para as mesmas condições usadas na Figura 4.47, observando-se o mesmo comportamento qualitativo. No entanto, a influência da porosidade é mais acentuada para o modelo T2S. A inclusão das calotes origina maiores variações nos valores médios das dimensões características dos elementos da rede e nos valores dos parâmetros macroscópicos, acentuando a influência de ε .

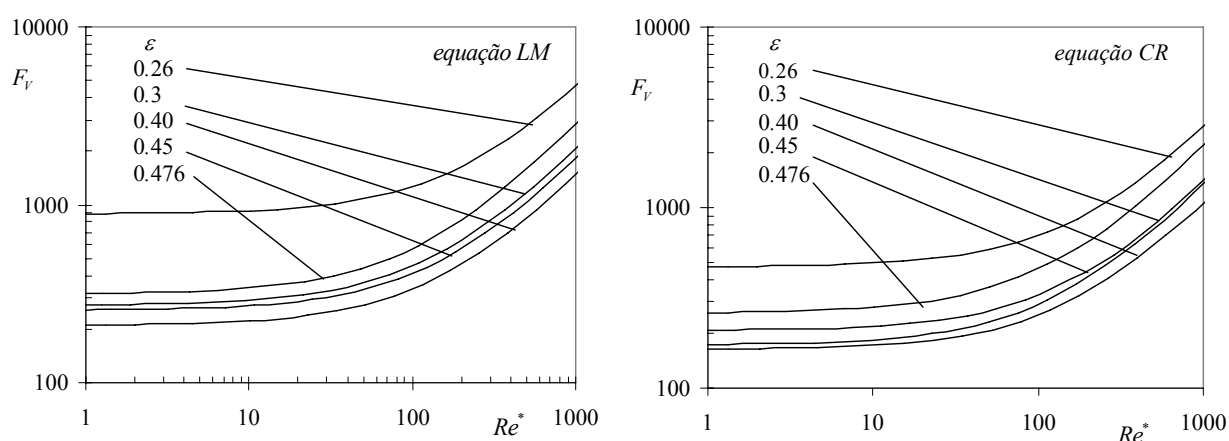


Figura 4.48 Comparação das curvas de F_v em função de Re^* para o modelo T2S, em função de ε e para as duas expressões $\theta = f(\varepsilon)$ consideradas.

Na secção anterior conclui-se que a análise dos valores das constantes A e B obtidos com base nos modelos geométricos era suficiente para caracterizar o comportamento do simulador hidrodinâmico. Na Figura 4.49 são comparados os valores previstos das constantes em função

da porosidade usando as duas expressões de $\theta = f(\varepsilon)$ (ver Secção 3.5.5). Ambas as equações prevêem o mesmo comportamento qualitativo. Esta situação era previsível visto com ambas se obterem valores similares para os valores médios dos parâmetros da rede.

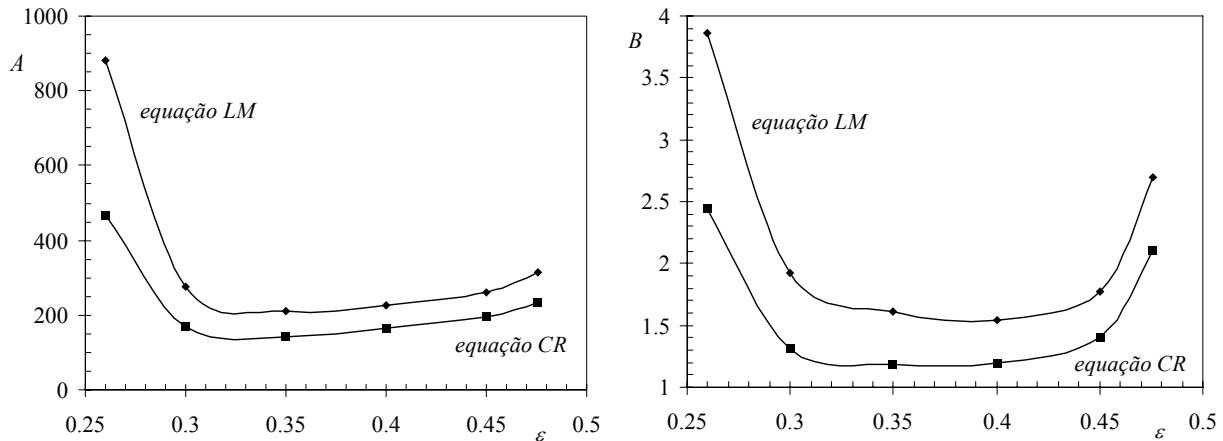


Figura 4.49 Comparação dos valores das constantes da equação de MacDonald previstas pelo modelo TIS usando as duas equações de $\theta = f(\varepsilon)$ propostas.

Observa-se que os valores previstos com base na equação CR são sistematicamente inferiores, correspondendo a valores menores da resistência total da rede ao escoamento. Os valores de d previstos com base na Equação CR são superiores aos valores previstos com base na equação LM. Como para o modelo ICAM a resistência ao escoamento é inversamente proporcional ao diâmetro médio dos canais, este comportamento era previsível.

Para valores de porosidade elevados os valores das constantes A e B aumentam. Como d e l são praticamente constantes, as variações dos valores dos parâmetros são as variações de E_R . É nessa gama de valores de porosidade que D aumenta, o que faz variar E_R e alterar os valores das constantes, mesmo tendo em conta que este parâmetro tem pouca influência nas características do campo de escoamento ao nível local. Apesar do aumento do volume de vazios representar uma redução de E_R , devido ao maior volume de vazios da rede, a variação de θ compensa este efeito, visto que a resistência total da rede aumenta nestas condições. Este efeito é mais acentuado para regime de escoamento não linear, em que também os efeitos da variação de l_0 têm de ser considerados. Para valores de porosidade baixos, a diminuição de d sobrepõe-se à alteração do valor da espessura equivalente da rede, aumentando a resistência da rede e consequentemente A e B . Como a dependência da resistência dos elementos da rede em d é idêntica para os dois regimes de escoamento, o comportamento qualitativo para essa gama de valores de porosidade é semelhante.

Comparando com os valores de A e B sugeridos por MacDonald *et al.* (1979), respectivamente 180 e 1.8, observa-se que os valores das constantes previstas pelos modelos T1S e T2S são sistematicamente superiores, excepto na zona de porosidade mais baixa. Para valores de porosidade entre 0.3 e 0.45, os valores das constantes não variam de forma apreciável, sendo possível definir um valor médio nessa zona de escoamento, de acordo com a definição de valores constantes e independentes da porosidade feita por MacDonald *et al.* (1979). De notar que o valor da constante B é dependente de $\sum K_j$, de acordo com as expressões teóricas obtidas para redes uniformes e apresentadas na Secção 4.4.3.3.

Na Figura 4.50 são comparados os valores das constantes A e B em função de ε previstos pelo modelo T2S para as duas expressões de $\theta = f(\varepsilon)$. O comportamento previsto por este modelo é similar ao observado na Figura 4.49 para o modelo T1S. Espera-se pois que os diferentes modelos geométricos possuam o mesmo comportamento qualitativo e prevejam valores médios para as dimensões características dos elementos da rede similares.

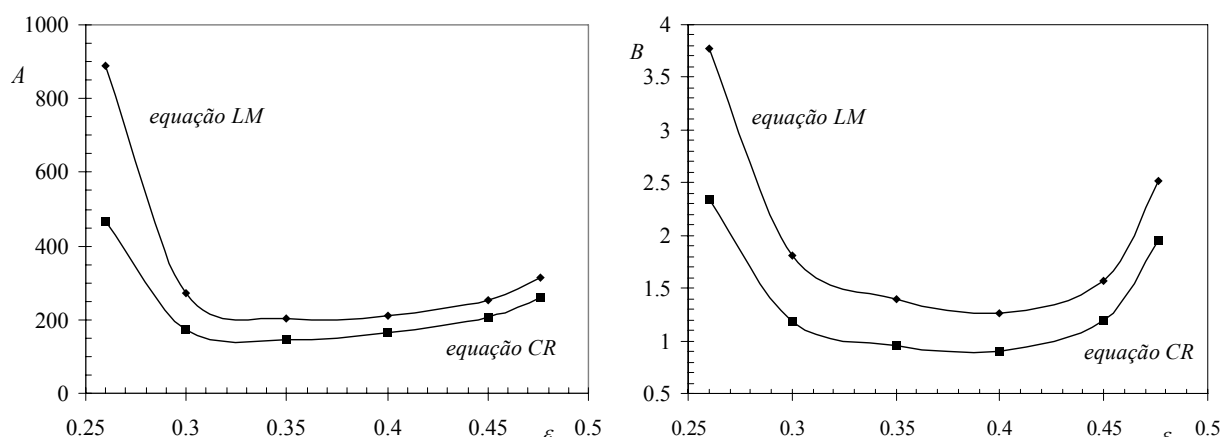


Figura 4.50 Comparação dos valores das constantes da equação de MacDonald previstas pelo modelo T2S, usando as duas equações de $\theta = f(\varepsilon)$ propostas.

Os resultados apresentados na Figura 4.49 e na Figura 4.50 não permitem concluir qual dos dois modelos geométricos simplificados e equações de $\theta = f(\varepsilon)$ são os mais adequados para descrever o comportamento de um meio poroso. Como no modelo T2S existe a possibilidade de inclusão directa do volume das calotes, resultando na contabilização mais adequada do volume de vazios da rede, este deverá ser o mais correcto. Apenas a comparação com dados experimentais, a efectuar na Secção 4.7, é que permitirá concluir qual dos modelos geométricos é o mais adequado.

Na Figura 4.51 são comparados os valores de A e B previstos pelos dois modelos usando a equação LM. O comportamento dos dois modelos para a zona linear de escoamento é semelhante, obtendo-se valores praticamente idênticos, de acordo com o facto de ambos os modelos se preverem valores idênticos de d . Na zona não linear de escoamento, caracterizada pela constante B , observam-se maiores diferenças entre os valores previstos pelos dois modelos. Este comportamento está de acordo com as conclusões apresentadas anteriormente de que as distintas variações de l_0 nos modelos geométricos são visíveis apenas na zona de escoamento não linear, em que os efeitos da distribuição do comprimento dos canais se faz sentir apenas pela variação dos parâmetros geométricos da rede.

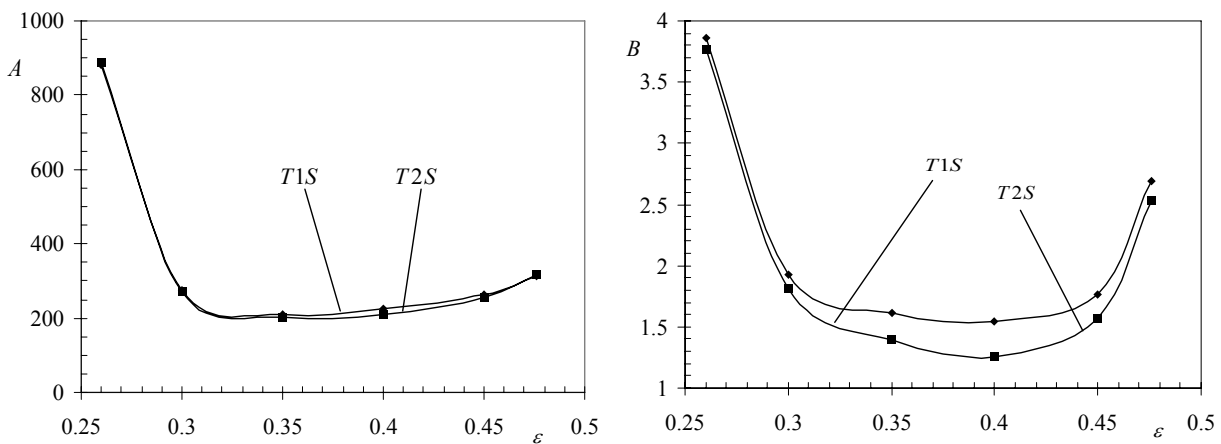


Figura 4.51 Comparação dos valores previstos de A e B em função da porosidade para os modelos T1S e T2S usando a equação LM.

Na Figura 4.52 são comparados A e B em função de ε usando a equação CR, sendo possível o mesmo comportamento qualitativo já verificado na Figura 4.51. Como os valores médios obtidos pelos dois modelos são similares, este comportamento era esperado. Comparando os valores obtidos pelos dois modelos é possível concluir-se que quando a equação CR é usada, os valores das constantes são menores que os obtidos usando a equação LM. Esta prevê valores de θ superiores aos da equação CR para igual valor de porosidade.

Deste modo, o valor de E_R previsto pela equação LM será maior, resultando numa maior resistência macroscópica ao escoamento e em valores mais elevados de A e B . Por outro lado, a maior variação de θ em função de ε observada com a equação LM resulta em maiores variações dos valores dos parâmetros, como se pode observar comparando os resultados apresentados na Figura 4.51 e na Figura 4.52.

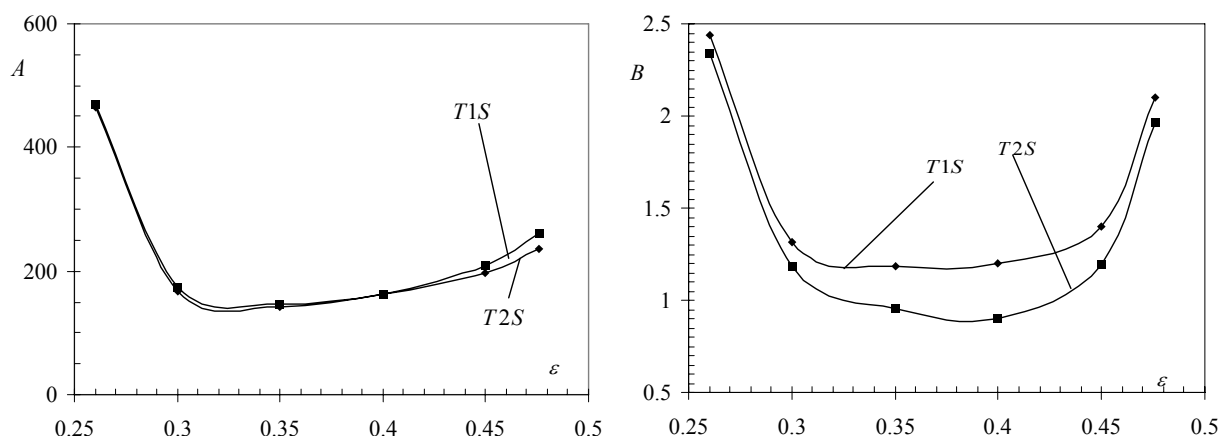


Figura 4.52 Comparação dos valores previstos de A e B em função da porosidade para os modelos $T1S$ e $T2S$ usando a equação CR.

Assumindo que os valores das constantes A e B propostos por MacDonald *et al.* (1979) são adequados para representar o escoamento através de um meio poroso, verifica-se que ambos os modelos e equações são adequados, em particular na gama de valores de porosidade entre 0.3 e 0.45, gama usual de valores de porosidade dos meios porosos encontrados em processos industriais. Apesar das diferenças entre os dois modelos serem pouco significativas o modelo $T1S$ parece ser o mais adequado, visto este prever variações menos significativas das constantes A e B em toda a gama de valores de porosidade.

4.6.3 Comparação entre Modelos Completos e Simplificados

Nesta secção são comparados os valores previstos das constantes A e B pelos modelos completos e simplificados. A comparação dos valores dos parâmetros geométricos previstos pelos dois tipos de modelos efectuada na Secção 3.6.3 mostrou que estes são apenas comparáveis quando θ assumido para o modelo simplificado é idêntico ao valor obtido usando as expressões $\theta = f(\varepsilon)$.

Na Figura 4.53 e na Figura 4.54 são comparadas as constantes A e B em função da porosidade para as combinações $T1/T1S$ e $T2/T2S$ respectivamente. Para os modelos completos foram considerados dois θ , $\pi/4$ e $\pi/3$, e para os modelos simplificados considerou-se apenas a equação LM, visto que as expressões de $\theta = f(\varepsilon)$ prevêm praticamente os mesmos valores das constantes A e B . Verificou-se o mesmo comportamento já observado na Secção 3.6.3, reforçando a conclusão de que o comportamento hidrodinâmico da rede depende essencialmente da sua estrutura geométrica. Fora dessas zonas, é possível observar diferenças apreciáveis entre os modelos.

Os valores previstos das constantes pelos dois tipos de modelos em função da porosidade possuem comportamento distinto. Em particular, numa gama larga de valores de porosidade, os valores de A e B não variam muito, situação só observada nos modelos completos quando θ é igual a $\pi/4$. Apenas para este valor é que o comportamento dos dois modelos é similar, correspondendo também à zona de valores de porosidade em que a variação de d com a porosidade não é tão pronunciada. Apenas nessas condições é que a hipótese de Ergun (1952) e MacDonald *et al.* (1979) de assumir valores constantes para A e B são adequadas, embora experimentalmente se tenha concluído que estas devem ser função das características do meio poroso, em particular da porosidade (Rumpf e Gupte, 1973).

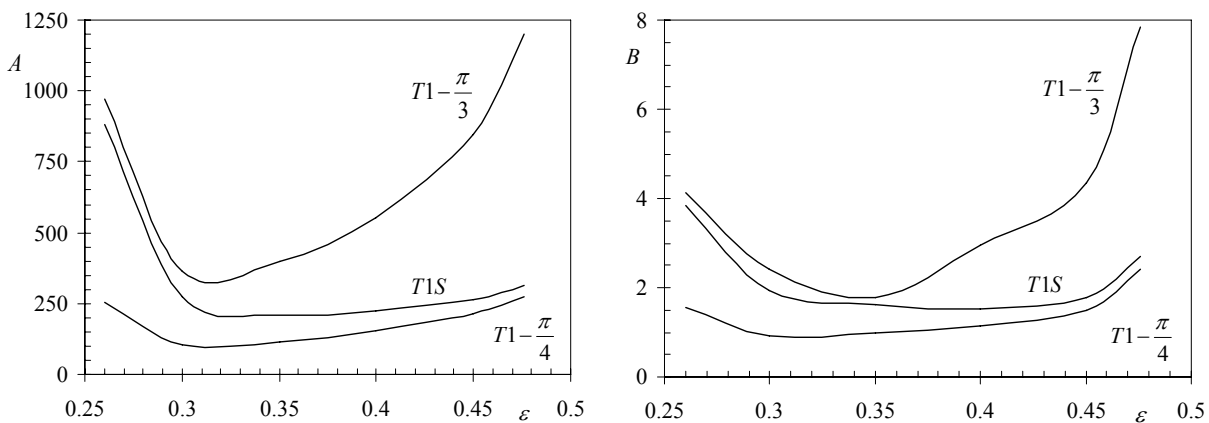


Figura 4.53 Comparação dos valores previstos das constantes A e B pelos modelos $T1$ e $T1S$ tendo-se usado a equação LM no modelo simplificado.

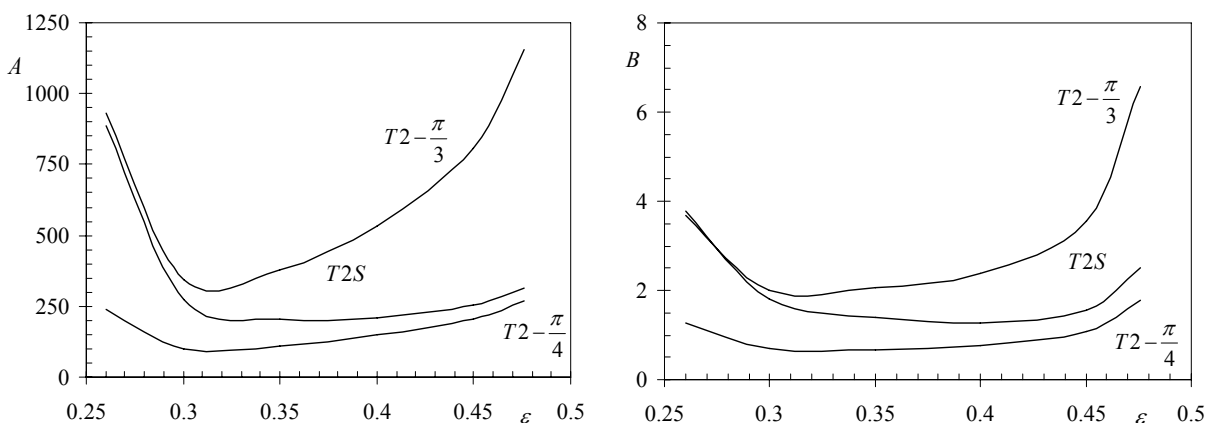


Figura 4.54 Comparação dos valores previstos das constantes A e B pelos modelos $T2$ e $T2S$ tendo-se usado a equação LM no modelo simplificado. Os resultados

obtidos permitem concluir que θ tem de ser função das características do meio poroso para que os valores previstos pelo simulador hidrodinâmico sejam válidos. Neste sentido, apenas os modelos simplificados são adequados para representar o escoamento, pois assumem que θ

é função da porosidade do meio. No entanto, outros aspectos podem ser significativos, como por exemplo a forma e a orientação das partículas em relação ao sentido principal de escoamento, não sendo estes tomados em conta de forma explícita nos modelos geométricos. Na secção 4.7.2 a adequação dos vários modelos geométricos será analisada usando para o efeito correlações publicadas na literatura para caracterizar o escoamento em meios porosos, e em particular leitos de enchimento.

4.7 Comparação com Correlações e Dados Experimentais

A análise de sensibilidade efectuada na secção anterior apenas permite concluir que o comportamento qualitativo previsto pelo simulador hidrodinâmico quando associado aos modelos geométricos é idêntico ao experimental. Foi possível concluir também que os modelos T1S e T2S, por comparação com o comportamento observado para a equação de Ergun, devem ser os mais adequados na previsão de um leito de enchimento real. Apesar dos bons resultados obtidos, apenas através da comparação com dados experimentais é que é possível a obtenção de conclusões mais rigorosas.

Na secção anterior assumiu-se que o valor da porosidade de um leito de enchimento é independente das características das partículas. Experimentalmente observa-se que existe uma dependência entre D_p e ε , pelo que os dois parâmetros não podem ser considerados independentemente um do outro. Deste modo, na comparação com dados experimentais tanto ε como D_p devem ser considerados simultaneamente.

Além deste aspecto, a comparação com dados experimentais apenas pode ser efectuada entre os valores previstos e os experimentais, dos parâmetros macroscópicos do escoamento, em particular, os valores de permeabilidade e das constantes equação de MacDonald. Como as estruturas de um meio poroso real e da rede de elementos usada neste trabalho são distintas, a comparação dos perfis locais de velocidade e de pressões é incorrecto. Por outro lado, o modelo de redes não permite ter em conta os efeitos da presença de uma parede na estrutura local de um meio poroso. Deste modo, apenas foram considerados os resultados em que as dimensões características das partículas e do meio poroso são tais que estes efeitos são desprezáveis, de acordo com os critérios apresentados em Ziolkowska e Ziolkowski (1989). No caso em que também não se encontrem disponíveis as características macroscópicas do meio poroso, em particular o comprimento deste segundo o sentido de escoamento principal,

assume-se que o seu comportamento pode ser descrito usando redes com dimensões tais que verifiquem os critérios de significância determinados nas Secções 4.5.3 e 4.5.4.

Alguns parâmetros necessários para determinar o escoamento através da rede de elementos não podem ser determinados directamente pelo modelo geométrico. Os mais importantes são os valores de $\sum K_j$, C e θ nos modelos geométricos completos. Estes podem ser determinados usando as correlações disponíveis na literatura, como é o caso de θ nos modelos geométricos simplificados (ver Secção 3.5.5), ou determinados a partir de dados experimentais para o escoamento através de um meio poroso.

O valor de $\sum K_j$ pode ser determinado a partir de dados experimentais obtidos para escoamento não linear através de um meio poroso, visto o comportamento na zona linear de escoamento ser independente do valor deste parâmetro. A influência de θ faz-se sentir principalmente ao nível das dimensões globais da rede, em particular no valor da sua espessura equivalente, como se concluiu na Secção 3.7.1.1. Apesar do efeito deste parâmetro ser independente do regime de escoamento, como a influência de $\sum K_j$ se sente apenas em condições de escoamento não linear, θ é determinado preferencialmente com base no comportamento hidrodinâmico em regime linear de escoamento. Além desta restrição, o valor deste parâmetro apenas pode ser determinado para os modelos T1 e T2, visto que nos modelos simplificados θ é função da porosidade, através da relação entre a estrutura da rede e a tortuosidade de um meio poroso. Este parâmetro pode ser também determinado usando dados obtidos em condições de escoamento não linear, mas seria necessário conhecer $\sum K_j$.

A determinação simultânea dos dois parâmetros apenas pode ser efectuada para os modelos T1 e T2, e quando se dispõem de dados experimentais incluindo os regimes de escoamento linear e não linear. Nestas condições é possível comparar os valores de θ e de $\sum K_j$ obtidos pelo ajuste das condições limite de escoamento, e determinar se a hipótese de que os valores assumidos são independentes das condições de escoamento é válida.

Os resultados da Secção 4.6 mostram que θ deve ser função das características do meio poroso. Em particular, a comparação dos valores previstos das constantes da equação de MacDonald com os valores sugeridos na literatura mostra que as expressões em função de ε propostas neste trabalho são adequadas, em particular na gama de valores de porosidade quase sempre encontrada na prática. Deste modo, apenas serão considerados os valores previstos

pelos modelos simplificados na comparação dos valores obtidos com correlações e dados experimentais apresentados na literatura (ver Secções 4.7.2 e 4.7.3).

4.7.1 Validação do Modelo Proposto

Nas secções anteriores, apenas se analisou o comportamento qualitativo do simulador hidrodinâmico. Uma forma de validar os valores previstos por este é determinar se no limite o modelo se reduz a expressões disponíveis na literatura. De acordo com Scheidegger (1960), se um meio poroso puder ser descrito como um conjunto de capilares paralelos entre si com um diâmetro constante, o valor da permeabilidade k pode ser determinado da expressão seguinte

$$k = \frac{\varepsilon d^2 T^2}{\alpha_s} \quad (4.69)$$

em que α_s é uma constante, cujo valor depende do número de dimensões significativas na descrição do comportamento do meio poroso. Como a rede de câmaras e canais é bidimensional, $\alpha_s = 32$. O valor da tortuosidade pode ser obtido directamente a partir de θ através da seguinte expressão

$$T = \cos(\theta) \quad (4.70)$$

De modo a permitir a comparação dos valores previstos pelo simulador hidrodinâmico com os valores previstos usando a Equação 4.69, a rede deverá ser uniforme e não possuir canais horizontais. Estas condições destinam-se a assegurar a equivalência entre o modelo de redes e da estrutura que serve de base à Equação 4.69. Deste modo, o volume das câmaras é nulo, o que implica que os D_i são iguais a zero (as câmaras actuam como nós de mistura), a rede não possui canais horizontais, sendo possível aplicar apenas o modelo FRIC no cálculo de R_j .

Foram efectuadas simulações para redes 200×200 uniformes, com e sem canais horizontais, variando os valores de θ e ε . Na Figura 4.55 são comparados os valores previstos pela Equação 4.69 e os obtidos pelo simulador, sendo estes últimos representados na figura por pontos.

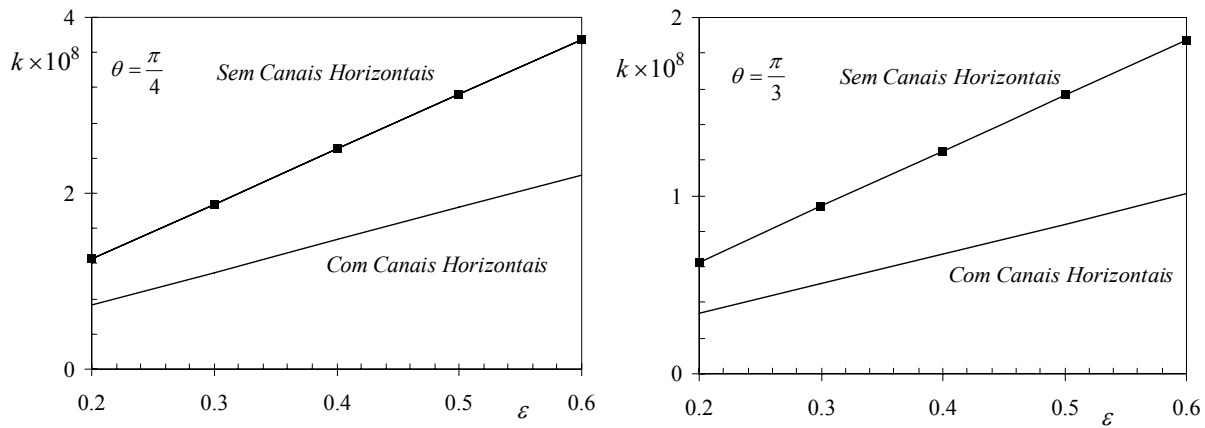


Figura 4.55 Comparação dos valores previstos de k pela Equação 4.69 com os obtidos pelo simulador hidrodinâmico em função de ε , para dois valores de θ . Pontos correspondem aos valores previstos pelo modelo.

Observa-se que os valores previstos pelo modelo e pela Equação 4.69 são iguais apenas para a situação em que a rede não possui canais horizontais, visto esta ser a única situação em que a estrutura da rede é similar à estrutura do meio poroso que serve de base à dedução da Equação 4.69.

4.7.2 Comparação com correlações publicadas

Nas Secções 4.5.1 e 4.6 foi usada equação de Ergun com as constantes propostas por MacDonald *et al.* (1979) para determinar quais deverão ser os modelos mais adequados para calcular R_j e determinar as características geométricas da rede equivalente a um meio poroso real. Apesar desta ser a correlação mais usada na descrição e caracterização de um meio poroso real, outras foram propostas na literatura, baseadas em conjuntos mais completos de dados experimentais ou na análise teórica do escoamento através de um meio poroso.

Quase sempre, as correlações propostas na literatura têm por base modelos de capilares paralelos (Liu *et al.*, 1994), ou de células (Foscolo *et al.*, 1983; Molerus e Schweinzer, 1989). A comparação de diferentes correlações efectuada por Panigrahi e Murty (1991) mostra que os valores da queda de pressão previstos são similares. Muitas das correlações propostas na literatura prevêm uma dependência dos valores das constantes A e B da porosidade do meio poroso, de acordo com os dados experimentais disponíveis (MacDonald *et al.*, 1979). Deste modo, assumir valores constantes para A e B pode não ser a estratégia mais adequada. Foram então seleccionadas duas correlações em que os valores de A e B variam em função da porosidade, propostas por Liu e Masliyah (1996) e Foscolo *et al.* (1983). A primeira é

baseada no modelo de capilares paralelos, descrito em detalhe na Secção 2.3.4 e a segunda baseia-se na analogia entre o escoamento em torno de uma partícula e no interior de um meio poroso. Comparando as expressões de cada uma das correlações nas zonas limite de escoamento com a equação de MacDonald, as seguintes expressões para A e B em função de ε são obtidas

$$A = \frac{17.3}{(1-\varepsilon)\varepsilon^{1.8}}, B = \frac{0.336}{\varepsilon^{1.8}}, \text{ Foscolo } et al. (1983) \quad (4.71)$$

$$A = \frac{85.2}{\varepsilon^{2/3}}, B = 0.69 \frac{1 + \sqrt{1 - \sqrt{\varepsilon}}}{\varepsilon^{5/6}}, \text{ Liu e Masliyah (1996)} \quad (4.72)$$

Assumir que os valores das constantes A e B são função de ε é equivalente a dizer que a tortuosidade de um meio poroso não é constante mas sim função das características do meio poroso. Na Secção 2.3.4.3 mostrou-se que a equação de Ergun se baseia na hipótese de que a tortuosidade é constante. Usando as duas funções de T em função de ε propostas na Secção 3.5.5 na equação de Ergun, obtém-se as seguintes expressões para os valores das constantes A e B em função de ε (Puncochar e Drahos, 2000)

$$A = \frac{72}{\varepsilon}, B = \frac{0.456}{\varepsilon^{3/2}}, \text{ equação LM} \quad (4.73)$$

$$A = 72 \left(\frac{1}{1 - 0.49 \ln \varepsilon} \right)^2, B = 0.581 \left(\frac{1}{1 - 0.49 \ln \varepsilon} \right)^3, \text{ equação CR} \quad (4.74)$$

Na Figura 4.56 são comparadas as expressões de A e B em função de ε com os valores das constantes propostos por MacDonald *et al.* (1979). O comportamento de todas as expressões é similar, observando-se que em todas estas os valores das constantes são uma função monótona decrescente de ε . Comparando o comportamento previsto pelos modelos geométricos (ver Secção 4.6) com as curvas apresentadas na Figura 4.56, verifica-se que apenas para a gama de valores de porosidade baixos é que o mesmo comportamento qualitativo é observado.

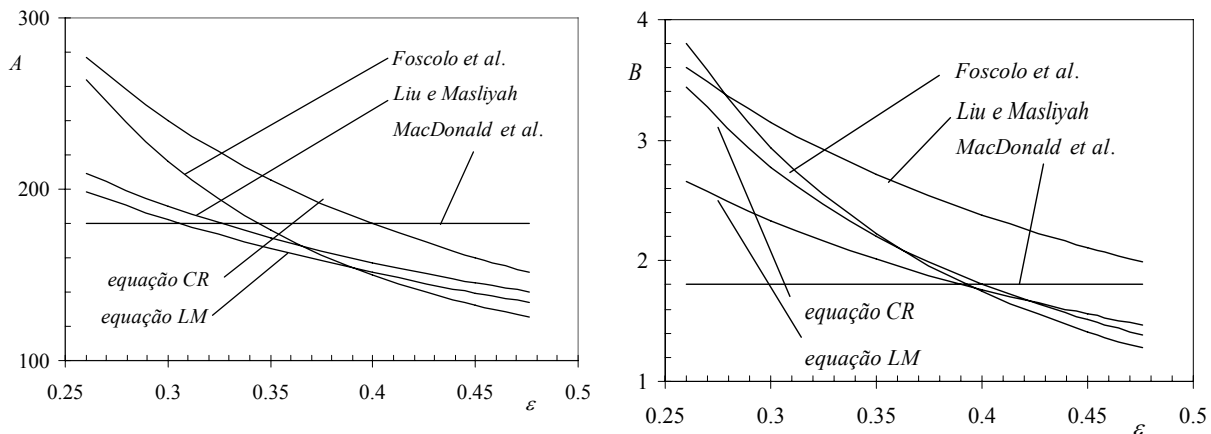


Figura 4.56 Valores das constantes A e B em função da porosidade previstas pelas quatro correlações consideradas neste trabalho.

Comparando os valores previstos de A apresentados na Figura 4.56 com os resultados apresentados na Secção 4.6, é possível concluir que o mesmo comportamento qualitativo é observado para valores de porosidade menores que 0.4. Este comportamento pode ser observado também na Figura 4.57, em que os valores previstos das constantes A e B em função de ε usando o modelo T2S com a Equação CR são apresentados para $C = 4$ e $C = 6$, e vários valores de $\sum K_j$ no caso da constante B . Conjuntamente são apresentados também os valores das constantes A e B propostas por MacDonald *et al.* (1979). Em relação ao parâmetro A , os resultados mostram que, partindo-se de valores de porosidade baixas, o seu valor diminui com o aumento de ε . Este comportamento já tinha sido observado na Secção 4.6, e como o parâmetro A é uma medida da resistência ao escoamento devido às forças viscosas, o comportamento observado era esperado. A Figura 4.57a mostra que para $0.3 \leq \varepsilon \leq 0.40$ o valor de A não varia apreciavelmente e para $\varepsilon > 0.4$ aumenta ligeiramente. Para $C = 4$ e na gama intermédia de valores de porosidade os valores previstos de A comparam-se favoravelmente com o valor proposto por MacDonald *et al.* (1979) de 180. Comportamento similar é observado para a constante B (Figura 4.57b), mas agora observa-se uma maior dispersão dos valores e uma maior dependência de C . Como nos resultados obtidos para A , a melhor concordância com o valor publicado de $B = 180$ observa-se para $C = 4$ e $\sum K_j \approx 3$. Deste modo é suportada a ideia de que $\sum K_j$ poderá ser mais elevado do que 1.5 para o modelo de redes.

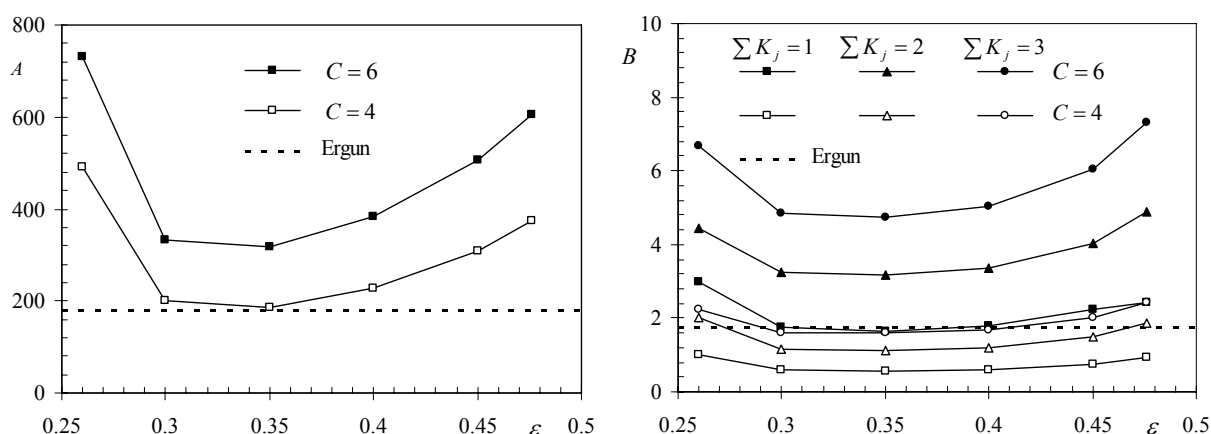


Figura 4.57 Valores de A e B previstos pelo modelo T2S usando a Equação CR de A e B em função de ε , e vários valores de $\sum K_j$ considerados no cálculo de B .

Comparando agora os resultados da figura anterior com os valores previstos de A e B apresentados na Figura 4.56, observa-se o mesmo comportamento qualitativo para $\varepsilon < 0.40$. Para valores mais elevados de porosidade as diferenças entre os valores previstos pelo simulador de escoamento e pelas correlações aumenta com a porosidade. Os desvios podem dever-se a alterações dos valores do número de coordenação médio da rede, resultado do aumento da porosidade e das alterações na estrutura local do meio poroso que não são capturadas pelo modelo geométrico na sua fase actual de desenvolvimento.

As diferenças entre os valores previstos de B podem ser atribuídas à influência das características do meio poroso em $\sum K_j$. Mesmo para a situação simplificada em que apenas um canal e uma câmara se encontram associados entre si, conclui-se na Secção 4.3.2.2 que R_j^{ET} é função dos diâmetros da câmara e do canal, por sua vez função de ε através dos modelos geométricos. Os desvios observados para a constante A , correspondentes à zona de escoamento linear, devem estar associados a alterações na estrutura do meio poroso, em particular C , que é uma função das características do meio poroso.

Os aspectos referidos vão ser analisados de seguida para os modelos T1S e T2S, os únicos que, de acordo com as conclusões das secções anteriores, prevêm um comportamento qualitativo similar ao observado em meios porosos reais. Como ainda não é possível concluir qual das expressões $\theta = f(\varepsilon)$ é a mais adequada, os valores previstos pelas duas foram comparados entre si. Como já se referiu anteriormente, nos modelos simplificados apenas é possível determinar $\sum K_j$. Como este parâmetro é significativo apenas para a zona de

escoamento não linear, $\sum K_j$ vai ser determinado põe ajuste com base nos valores de B previstos pelas diferentes correlações.

Na Figura 4.58 são apresentados os valores previstos de $\sum K_j$ em função de ε pelo modelo T1S, para redes tipo 10 e 11, usando a equação LM. Comparando as previsões para os dois tipos de redes, é possível observar diferenças significativas, no entanto, observa-se o mesmo comportamento qualitativo entre os valores baseados nas diferentes correlações para os dois tipos de redes. Assumindo que $\sum K_j$ é igual à soma dos valores limite para uma expansão e uma contracção da área de secção recta, ou seja, $\sum K_j = 1.5$ de acordo com Shames (1982), são os valores previstos pela rede tipo 11 que se aproximam deste. No entanto, $\sum K_j = 1.5$ assume que $d/D \approx 0$, e que os efeitos da mistura do fluido nas câmaras são desprezáveis, hipóteses que podem não ser válidas em muitos tipos de meios porosos, situação que, de acordo com os resultados da Figura 4.57, podem não ser os mais adequados.

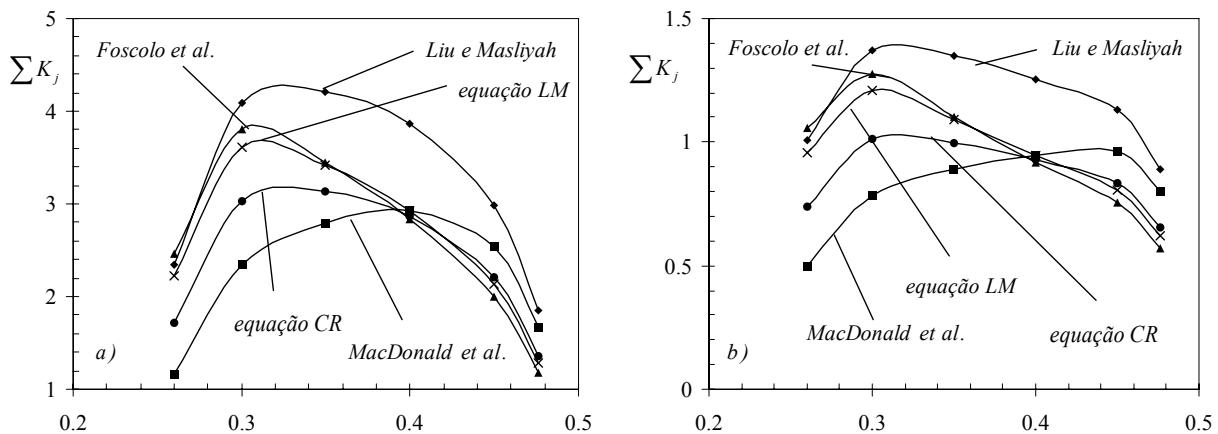


Figura 4.58 Valores previstos de $\sum K_j$ em função da porosidade para o modelo T1S usando a equação LM, para redes: a) tipo 10; b) tipo 11.

Comparando os valores obtidos de $\sum K_j$ com as curvas apresentadas na Figura 4.5 baseadas nos valores de D e d obtidos dos modelos geométricos, observa-se um comportamento completamente distinto. Em particular, para valores de porosidade baixos, observa-se um comportamento contrário ao observado na Figura 4.5. Deste modo é possível concluir que na descrição do comportamento de um meio poroso $\sum K_j$ não pode ser determinado de correlações disponíveis na literatura, que assumem que existe apenas uma contracção ou expansão, e não tomam em conta a mistura de fluido e os diferentes canais associados a uma câmara da rede.

Na Figura 4.59 são comparados os valores previstos de $\sum K_j$ para as mesmas condições da Figura 4.58 mas usando a equação CR. Observa-se o mesmo comportamento qualitativo mas a equação CR prevê valores inferiores aos da equação LM. As diferenças são atribuíveis aos valores distintos de l previstos pelas duas equações (ver Secção 3.5.5).

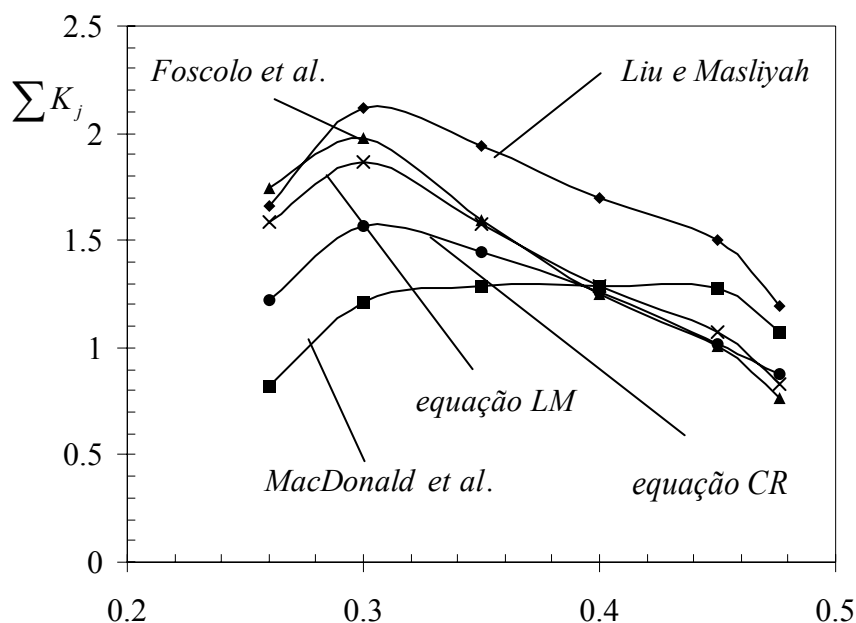


Figura 4.59 Comparação dos valores previstos de $\sum K_j$ em função da porosidade para o modelo T1S usando a equação CR e redes tipo 11

Na Figura 4.60 são apresentados os valores previstos para o modelo T2S, usando a equação CR. Comparando os valores obtidos com os apresentados na Figura 4.59, o mesmo comportamento qualitativo é observado, sendo os valores previstos idênticos. Como os modelos T1S e T2S prevêem valores similares para as dimensões características dos elementos da rede, este comportamento era esperado.

Apenas a comparação com dados experimentais permitirá tirar conclusões mais concretas em relação a $\sum K_j$, o que é efectuado na secção seguinte. Comparando as curvas das figuras anteriores com os valores calculados usando correlações disponíveis na literatura (ver Figura 4.5), observam-se diferenças significativas. Em particular, observa-se um máximo de $\sum K_j$ em função de ε em vez de um valor mínimo. As diferenças observadas permitem concluir que a estrutura do meio poroso (ou da rede) deve ser tomada em conta na determinação de $\sum K_j$. Assumindo no entanto que $\sum K_j = 1.5$ é um valor aproximado dos que se observam

num meio poroso, observa-se nas figuras anteriores que são os modelos baseados na equação CR os mais adequados para descrever a dependência $\sum K_j$ em função de ε .

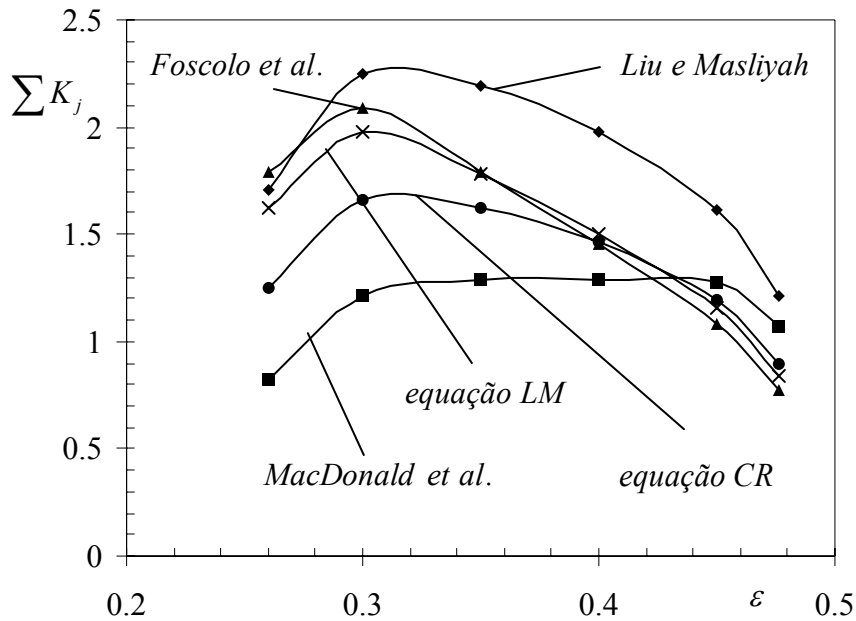


Figura 4.60 Comparação entre os valores previstos de $\sum K_j$ em função da porosidade para o modelo T2S usando a equação CR e redes tipo 11..

Apesar dos resultados anteriores indicarem que $C \approx 6$, de acordo com a hipótese de que $\sum K_j \approx 1.5$, apenas da comparação com dados experimentais para escoamento não linear será possível obter conclusões mais correctas, o que será efectuado na subsecção seguinte. Em especial, as questões associadas à existência de mais do que um canal associado à rede e à mistura de fluido nas câmaras serão consideradas em detalhe.

4.7.3 Comparação com Resultados Experimentais

Na secção anterior foram usadas correlações disponíveis na literatura para analisar a variabilidade dos parâmetros A e B em função da porosidade para os diferentes modelos geométricos propostos. Estes baseiam-se em modelos simplificados para a descrição do escoamento através de um meio poroso, incluindo na sua definição constantes cujos valores são determinados a partir de dados experimentais. Assim, as correlações usadas representam o comportamento “médio” dos meios porosos em que foram obtidos os dados experimentais em que se baseiam. A sua aplicação a meios porosos com características distintas daquelas que serviram de base à determinação das constantes pode resultar em erros significativos.

Para determinar as condições em que o modelo hidrodinâmico pode ser usado para prever o comportamento de um meio poroso, é fundamental comparar os valores previstos por este com dados experimentais publicados na literatura. De acordo com os resultados da Secção 3.6.7, é possível prever que a melhor concordância ocorra para leitos de enchimento formados por esferas ou partículas aproximadamente esféricas com uma distribuição das dimensões características apertada. Por outro lado, a utilização do modelo geométrico exige o conhecimento dos valores da porosidade e do diâmetro médio das partículas. Na prática esta informação pode ser obtida facilmente a partir por exemplo de uma amostra das partículas que formam um leito de enchimento. Além das condições anteriores, foram considerados apenas dados experimentais nos quais os efeitos de entrada e saída, assim como de parede, possam ser considerados desprezáveis, de acordo com os critérios apresentados em Ziolkowka e Ziolkowski (1989).

Foram também considerados na comparação entre valores previstos e experimentais dados experimentais obtidos em leitos de enchimento formados pela mistura de partículas com mais de um diâmetro médio, situação em que se espera que a estrutura local do meio seja altamente irregular. Assumiu-se que D_p das partículas é igual à média pesada dos diâmetros médios dos diferentes tipos de partículas. Desta forma, é possível aferir se o modelo geométrico quando usado em conjunto com o modelo de escoamento pode ser também usado em leitos irregulares.

Apesar dos modelos T1S e T2S, aqueles que os resultados das Secções 3.6.6 e 4.6 mostram ser os mais adequados para a descrição da estrutura e do comportamento hidrodinâmico de um meio poroso, permitirem determinar o número de linhas de câmaras da rede equivalente segundo o sentido principal de escoamento, esta informação não é crítica. A comparação entre valores previstos e experimentais vai ser efectuada usando apenas a permeabilidade e as constantes A e B da Equação de MacDonald. Na Secção 4.4.3.3 e no Apêndice B.5 mostrou-se que para redes uniformes os seus valores são praticamente independentes das dimensões da rede, desde que as suas dimensões sejam tais que os resultados previstos possam ser considerados como sendo estatisticamente significativos. A comparação directa entre as características de escoamento ao nível local entre um meio poroso real e a rede de elementos não é válida, devido às diferenças de estrutura e de dimensionalidade. Os conjuntos de dados experimentais devem reportar pelo menos um destes parâmetros ou informação que permita a sua determinação, para permitir a utilização do modelo de redes proposto neste trabalho.

Em relação ao modelo geométrico e de escoamento, de acordo com os resultados apresentados nas secções anteriores apenas se vai considerar aqui o modelo T2S, usando a equação CR para calcular θ em função de ε . Em primeiro lugar, as previsões efectuadas pelos modelos T1S e T2S são muito similares, o que torna irrelevante a necessidade de se usarem dois modelos para obter resultados quase idênticos. Apenas para B se observam algumas diferenças entre os valores previstos pelos dois modelos, em especial para os valores de porosidade em que $d/D \approx 1$ e volume das calotes mais significativo (ver Figura 4.51 e Figura 4.52). Em relação aos valores previstos para cada uma das duas expressões de θ em função de ε o mesmo comportamento é observado, sendo a diferença entre os valores independente de ε . Como a equação CR se baseia em dados experimentais obtidos em leitos de enchimento formados por esferas com uma distribuição apertada de diâmetros é esta a expressão preferida. A equação LM, apesar de ser mais simples, é obtida tomando em conta dados experimentais de uma grande variedade de meios porosos, incluindo consolidados ou formados por partículas com formas muito diferentes da esférica ou com uma distribuição muito larga de diâmetros. Deste modo, é de esperar esta não seja tão adequada para prever o comportamento de leitos de enchimento como a equação CR, para as condições de aplicabilidade do modelo geométrico.

Considerou-se apenas o modelo ICAM para calcular a resistência dos ramos da rede, visto ser o único capaz de descrever o comportamento qualitativo do escoamento através de um meio poroso para todos os regimes de escoamento. Deste modo, para regime de escoamento linear apenas é necessário impor um valor para o número de coordenação médio da rede, C . Mais à frente vai ser estudado como é possível estimar C a partir dos dados experimentais disponíveis e comparar os valores previstos com informação experimental disponível na literatura. Para regime de escoamento não linear é necessário conhecer também $\sum K_j$, valor que pode ser estimado a partir dos dados experimentais.

Para os leitos de enchimento regulares RBP e CUB é possível resolver analiticamente as equações de conservação em condições de regime linear e obter expressões analíticas para a permeabilidade em função da porosidade e do diâmetro das partículas (Hasimoto, 1959; Zick e Homsy, 1982; Sangani e Acrivos, 1982b). Outros autores determinaram experimentalmente as características do escoamento em leitos de enchimento possuindo estruturas regulares (Martin *et al.*, 1951; Susskind e Becker, 1967), tendo observado boa concordância entre os valores previstos e os obtidos da análise teórica. Como o modelo geométrico se baseia na

descrição geométrica de leitos de enchimento regulares, é possível fazer a comparação directa entre as previsões do modelo e os valores teóricos e experimentais.

A comparação entre valores previstos e valores teóricos e experimentais tem de ser feita usando o parâmetro K_s , que é a razão entre a força de arrasto exercida pelo fluido numa partícula quando se encontra isolada ou no leito de enchimento. K_s e k estão relacionados através da seguinte expressão

$$K_s = \frac{k_s}{k} \quad (4.75)$$

em que k_s é a permeabilidade de um meio poroso em que as partículas se comportam como se encontrassem isoladas e rodeadas de um envelope de fluido de dimensões infinito. Este parâmetro também se designa por permeabilidade de Stokes, e é definido pela seguinte expressão (Sahimi, 1995)

$$k_s = \frac{D_p^2}{18(1-\varepsilon)} \quad (4.76)$$

Na Tabela 4.7 são apresentados e comparados os valores de K_s previstos para os leitos de enchimento regulares CUB e RBP com os dados experimentais de Martin *et al.* (1951). Verifica-se em todos os casos que os valores previstos pelo modelo são sistematicamente superiores aos valores experimentais, o que mostra que a resistência prevista usando o modelo geométrico é superior à real para estes casos em que a estrutura dos leitos de enchimento é realmente regular.

Tabela 4.7 Valores experimentais e previstos pelo modelo para K_s dos leitos de enchimento regulares RBP e CUB.

Leito Enchimento	K_s Experimental	K_s Previstos	
		$C = 4$	$C = 6$
CUB	42.5	68.1	116
RBP	435	1620	2414

Os desvios devem-se sobretudo às hipóteses feitas nos modelos geométrico na determinação dos valores médios de d e l . O cálculo destes parâmetros requer que o número equivalente de canais e câmaras associado a cada uma das células fundamentais seja conhecido, de modo

a ser possível impor a condição de porosidade fixada para os canais. Como a geometria dos canais é distinta entre o leito de enchimento e a rede, os valores calculados vão ser uma aproximação dos reais. Em particular, a geometria cilíndrica dos canais não toma em conta a existência de contracções e expansões, mas procura no entanto tomar em conta as variações das dimensões características da estrutura real de um leito de enchimento. Para leitos irregulares é de se esperar que a sua influência seja menos significativa que num leito regular, resultando numa maior resistência ao escoamento.

A comparação com os valores experimentais e teóricos e os previstos pelo modelo geométrico mostra que para leitos de enchimento regulares o modelo de redes não é adequado. No entanto, a comparação entre os valores médios das dimensões características dos elementos da rede previstos pelos modelos geométricos e reportados na literatura (ver Secção 3.6.7) dá alguma confiança de que para leitos de enchimento com uma estrutura irregular o modelo geométrico deverá ser adequado.

Impõe-se então usar conjuntos de dados experimentais obtidos em leitos de enchimento com uma estrutura não regular de modo a se obterem conclusões mais firmes. Para este objectivo foram considerados para análise 8 conjuntos de dados experimentais: dois conjuntos de Payatakes *et al.* (1973a), designados por PTT1 e PTT2, e seis conjuntos de Kim (1985), que correspondem aos conjuntos KIM1, KIM2, KIM3, KIM4, KIM5 and KIM6. Para todos os conjuntos é reportado o valor da permeabilidade e para os conjuntos de Kim (1985) são também reportados os valores das constantes A e B da Equação de MacDonald.

Com excepção dos conjuntos KIM4, KIM5 e KIM6, todos os restantes resultados experimentais foram obtidos usando leitos de enchimento formados por esferas e com uma distribuição apertada dos diâmetros das partículas. Para os outros foram usadas misturas de partículas com um diâmetro uniforme, sendo apresentado na Tabela 4.8 o D_p médio que toma em conta os diâmetros médios das partículas usadas e as percentagens de cada um dos tipos usados para construir o leito de enchimento. Os conjuntos PTT1 e PTT2 já foram considerados na Secção 3.6.7 na comparação entre os valores previstos e experimentais de D e d , tendo-se observado boa concordância entre ambos.

Os conjuntos PTT1 e PTT2 possuem informação experimental sobre a distribuição das dimensões características dos elementos da rede. Como esta foi obtida através da realização de extrusão de água nos leitos de enchimento, os resultados experimentais correspondem à distribuição das constrições que, por analogia, representa aproximadamente a distribuição dos

diâmetros dos canais. No entanto, os conjuntos de Kim (1985) não possuem nenhuma informação sobre as características geométricas do meio poroso ao nível local (partículas). Deste modo, e como também nenhum dos conjuntos de dados experimentais possui informação sobre a distribuição sobre C e a distribuição dos valores de C_i , de acordo com as condições de aplicabilidade do modelo geométrico vão ser usadas redes uniformes na comparação entre valores previstos e experimentais.

Tabela 4.8 Características dos leitos de enchimento considerados e valores médios previstos pelo modelo T2S para as dimensões características dos elementos da rede equivalente.

	Dados Experimentais		Valores Previstos Modelo T2S/CR			
Conjunto	ε	D_p (mm)	d (mm)	D (mm)	l (mm)	θ (rad)
PPT1	0.401	0.470	0.179	0.196	0.563	0.808
PPT2	0.470	0.714	0.287	0.490	0.588	0.753
KIM1	0.357	2.10	0.737	0.870	2.46	0.844
KIM2	0.360	3.07	1.08	1.27	3.61	0.841
KIM3	0.359	4.10	1.45	1.70	4.82	0.842
KIM4	0.348	3.69	1.26	1.53	4.26	0.851
KIM5	0.344	3.28	1.11	1.36	3.76	0.854
KIM6	0.342	2.76	0.926	1.14	3.16	0.856

Para os conjuntos de dados PTT1 e PTT2 observa-se que os valores previstos de permeabilidade para $C = 4$ e $C = 6$ são sempre inferiores aos valores experimentais, ao contrário dos conjuntos de dados de KIM em que esses valores englobam sempre k experimental. Assumindo que k é uma função apenas de C e que são removidos apenas canais horizontais, a Equação 4.66 permite estimar os valores de C para os quais os valores experimental e previsto da permeabilidade são iguais, sendo estes também apresentados na Tabela 4.9.

Para PTT1 e PTT2 obteve-se $C \leq 3$, e para os restantes conjuntos de dados $C \approx 4$, que é o valor do número de coordenação médio que se assume normalmente para leitos de enchimento com as características dos utilizados por Payatakes *et al* (1973a) e Kim (1985). Por exemplo, Sederman *et al* (1997) mostraram através da caracterização da estrutura local por ressonância magnética nuclear (RMN) de um leito de enchimento formado a partir de esferas com 5 mm de diâmetro e uma distribuição apertada de diâmetros que C possui de

facto uma distribuição de valores com uma cauda e com um valor médio entre 4 e 5. Valores na mesma ordem de grandeza foram obtidos através de outras técnicas experimentais, como por exemplo análise de imagens com a estrutura local do meio poroso (Yanuka *et al.*, 1986), descrição da estrutura local de leitos de enchimentos simulados (Al-Raoush *et al.*, 2003) e por visualização da estrutura local através de RMN (Baldwin *et al.*, 1996; Sederman *et al.*, 1998).

Tabela 4.9 Valores experimentais e calculados da permeabilidade e das constantes da Equação de MacDonald para o modelo T2S usando a Equação CR.

	Experimentais			Calculados								
	$k_{\text{exp}} \times 10^9$ (m ²)	A	B	$k_c \times 10^9$ (m ²)		C ($k_c = k_{\text{exp}}$)	A		B		$\sum K_j$	
				$C = 4$	$C = 6$		$C = 4$	$C = 6$	$C = 4$	$C = 6$	$C = 4$	$C = 6$
PPT1	0.233	-	-	0.173	0.103	2.29	-	-	-	-	-	-
PPT2	0.628	-	-	0.527	0.325	3.00	-	-	-	-	-	-
KIM1	2.53	184.2	1.93	2.55	1.50	4.04	190.6	322.9	0.832	3.39	3.48	1.21
KIM2	5.67	177.8	1.90	5.58	3.30	3.92	192.4	325.8	0.835	2.39	3.42	1.19
KIM3	9.88	174.0	1.81	9.87	5.83	3.99	191.8	324.8	0.834	2.39	3.26	1.13
KIM4	7.06	180.6	1.92	7.25	4.28	4.13	186.2	315.4	0.828	2.38	3.48	1.21
KIM5	5.27	183.5	1.94	5.51	3.52	4.24	184.6	312.9	0.827	2.37	3.52	1.22
KIM6	3.71	179.5	1.88	3.82	2.26	4.14	184.0	311.7	0.827	2.37	3.41	1.19

Os resultados anteriores mostram que o modelo de redes permite caracterizar adequadamente o escoamento em regime laminar através de um leito de enchimento desde que $C \approx 4$. As diferenças observadas para os conjuntos de dados de Payatakes *et al* (1973a) podem ser o resultado da utilização de partículas com diâmetros médios mais pequenos que os usados por Kim (1985). Quando mais pequenas são as partículas maior é a possibilidade destas formarem agregados compactos em que a velocidade do fluido é baixa quando comparada com a velocidade superficial. Deste modo vão-se formar caminhos preferenciais do fluido no meio poroso e a resistência ao escoamento vai diminuir, resultando em valores de permeabilidade mais elevados, como se pode constatar dos resultados apresentados na Tabela 4.9.

Por outro lado podem existir também efeitos resultantes das características das partículas usadas. De acordo com os dados apresentados por Payatakes *et al.* (1973a), pelo menos o conjunto de dados PTT2 usou como partículas areia, que poderá conter partículas com formas irregulares e longe da esférica. Nestas condições é de se prever também que o modelo

geométrico desenvolvido neste trabalho não seja adequado para prever os valores médios das dimensões características dos elementos da rede equivalente de um dado leito de enchimento.

Nos conjuntos de dados experimentais de Kim (1985), quando os resultados obtidos são analisados tomando em conta as características das misturas de partículas usadas nos leitos de enchimento é possível dividi-los em dois grupos. Um dos grupos, em que se encontram os conjuntos de dados experimentais KIM1, KIM2 e KIM3, em que se obtiveram os valores mais baixos de C , corresponde aos leitos de enchimento formados por partículas com apenas um diâmetro médio das partículas. No segundo grupo encontram-se os conjuntos de dados experimentais (KIM4, KIM5 e KIM6) em que foram usadas misturas de partículas de diferentes tamanhos, em que o modelo de redes prevê valores mais elevados de C . As diferenças observadas entre os valores previstos para os dois grupos são pequenas e inferiores. Os resultados mostram que quanto mais irregular é a distribuição das dimensões características das partículas maior é C . Nestas condições a estrutura do meio poroso é mais irregular, o que leva a uma maior divisão e mistura das linhas de corrente no interior do leito de enchimento e consequentemente um valor mais elevado do número de coordenação médio. Estas conclusões são confirmadas pelo modelo de redes, permitindo concluir que este também pode ser usado para caracterizar qualitativamente o escoamento em leitos de enchimento formados por partículas com distribuições largas dos diâmetros das partículas. Para a determinação das condições reais em que o modelo é válido torna-se necessário usar um conjunto de dados experimentais mais largo e incluindo leitos de enchimento com partículas de diferentes formas e possuindo diferentes distribuições de valores de D_p .

Os conjuntos de dados experimentais de Kim (1985) incluem também a zona de escoamento não linear, pelo que é possível fazer a comparação directa entre valores previstos e experimentais das constantes A e B . Na Tabela 4.9 são apresentados e comparados os valores destas constantes, tendo-se considerado como na situação de escoamento linear redes uniformes com $C = 4$ e $C = 6$, assumindo-se que $\sum K_j = 1.5$. Como esperado, os valores previstos de A possuem o mesmo comportamento qualitativo já observado para a permeabilidade, visto que ambos os parâmetros podem ser obtidos um a partir do outro (ver Apêndice B.5).

Em relação ao parâmetro B observa-se também que os valores experimentais se encontram também entre os valores previstos para $C = 4$ e $C = 6$. Em relação à situação de escoamento laminar constata-se a concordância com os dados experimentais para $C = 4$. Também, para

$C = 6$ os valores previstos são muito maiores que os valores experimentais. Como em relação à descrição do escoamento em regime laminar a única diferença é a necessidade de se definir um valor de $\sum K_j$. Este foi definido tomando em conta os valores disponíveis na literatura para expansões e contracções (White, 1994). Os resultados mostram que o valor usado não é adequado para caracterizar o escoamento em leitos de enchimento, e que o valor de $\sum K_j$ deverá ser função das características geométricas e de escoamento ao nível local. Apesar do modelo IQM ter sido desenvolvido com o objectivo de determinar $\sum K_j$ a partir dessa informação, os resultados previstos não estão de acordo com o comportamento qualitativo esperado para o escoamento através de um meio poroso, razão pelo qual este não foi usado. (ver Apêndice B.3).

Para os seis conjuntos de dados experimentais KIM determinaram-se os valores de $\sum K_j$ que permitem obter os valores experimentais de B , sendo estes apresentados na Tabela 4.9. Os valores calculados mostram uma forte influência de C . Para $C = 6$ o modelo prevê valores de $\sum K_j$ inferiores a 1.5, em concordância com as correlações disponíveis na literatura para contracções e expansões simples (White, 1994), que seria o caso de termos apenas um canal de entrada e saída para qualquer câmara da rede. No entanto os resultados para escoamento sugerem que $C = 4$ é um valor mais adequado. Além do facto anterior, como as câmaras da rede possuem normalmente mais do que um canal de entrada e de saída de fluido, o que resulta na mistura do fluido nas câmaras, deve resultar em $\sum K_j$ superiores a 1.5 de modo a tomar em conta esses efeitos. De acordo com os resultados da Secção anterior $\sum K_j$ deverá estar entre os valores de 3 e 4.

Os conjuntos de dados experimentais de Kim (1985) incluem também as curvas completas da queda de pressão em função do caudal volumétrico total para o escoamento em cada um dos leitos de enchimento considerados e permitem tirar conclusões mais correctas sobre os valores de C e de $\sum K_j$ adequados para descrever o comportamento. Na Figura 4.61 os pontos experimentais do conjunto de dados experimentais KIM são comparados com as curvas de F^* em função de Re^* para $C = 6$ e $C = 4$, usando-se valores de $\sum K_j$ dentro da gama prevista para os valores deste parâmetro. Os resultados experimentais reportados no conjunto de dados KIM foram estendidos para valores de Re^* mais elevados (pontos vazios) usando os valores reportados por Kim (1985) para facilitar a comparação entre valores experimentais e

previstos. Para $C = 6$ e $\sum K_j = 1.2$ a concordância entre dados experimentais e valores previstos (curva a tracejado) é boa para valores elevados do número de Reynolds mas é inadequada para regime linear de escoamento. Para $C = 4$ a concordância é boa para qualquer dos três valores de $\sum K_j$ considerados: 2, 3 e 4. Para valores elevados de Re^* o melhor acordo entre valores previstos e experimentais observa-se quando $\sum K_j \approx 3$, em acordo com o valor de $\sum K_j = 3.48$ obtido a partir do valor experimental de B (ver Tabela 4.9). Por outro lado, é também para $\sum K_j \approx 3$ que se observa a melhor concordância em todos os regimes de escoamento, em particular na zona de transição que é particularmente bem descrita.

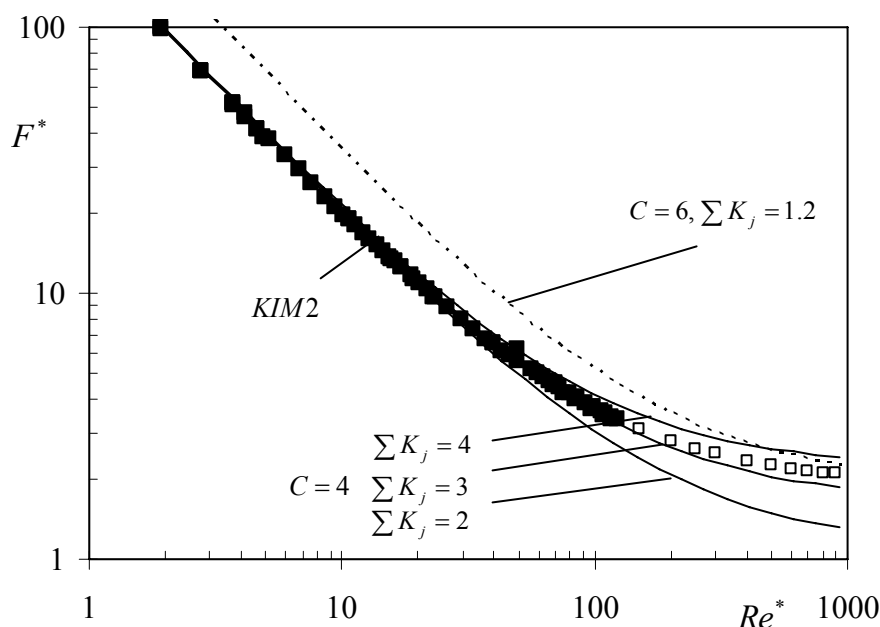


Figura 4.61 Comparação entre os valores previstos pelo simulador hidrodinâmico e o conjunto de dados experimentais KIM2 para o modelo T2S em função de C e $\sum K_j$.

4.8 Conclusões

Neste capítulo foi descrito e analisado o modelo proposto para a descrição do escoamento através de um meio poroso. Ao contrário da maior parte dos modelos propostos na literatura (Sahimi, 1995), este modelo toma em conta explicitamente a influência no escoamento dos vários tipos de elementos presentes na rede. Na literatura apenas nos trabalhos de Thauvin *et al.* (1998) e Wang *et al.* (1999) estes efeitos são tomados em conta na descrição do comportamento hidrodinâmico de uma rede de elementos. No entanto, estes autores não

procuraram comparar as previsões do seu modelo com dados experimentais, o que é efectuado neste trabalho recorrendo ao modelo geométrico.

Os resultados mostram que apenas quando a influência das câmaras é tomada em conta na modelização do escoamento é que o simulador hidrodinâmico permite descrever todos os regimes de escoamento num meio poroso. O modelo ICAM permite descrever qualquer regime de escoamento separando a influência das forças viscosas, resultantes da fricção do fluido nas paredes dos canais, das forças inerciais, resultantes da variação de velocidade do fluido na entrada ou na saída do fluido das câmaras. Desta forma, o modelo verifica as condições limites de escoamento, em que cada um dos tipos de forças é dominante, e permite uma descrição qualitativamente adequada da zona de transição entre as zonas de escoamento linear e não linear.

A análise de sensibilidade das características geométricas e das distribuições das dimensões características dos elementos da rede mostrou que são as características geométricas da rede ao nível macroscópico que determinam os valores dos parâmetros macroscópicos que caracterizam o escoamento. Os critérios obtidos para assegurar que os resultados obtidos são estatisticamente significativos são idênticos aos obtidos no Capítulo 3, permitindo concluir que o escoamento é dependente sobretudo da estrutura da rede. Apenas quando se consideram as restrições de não intersecção dos canais associados a uma câmara é que as alterações nas distribuições inicialmente impostas ao gerador da rede podem ter uma influência decisiva no comportamento da rede. Também é possível concluir que as características do escoamento ao nível macroscópico dependem não só das distribuições dos elementos da rede mas também da estrutura local da rede, em particular quando na geração da rede se faz a remoção de elementos da rede.

Mostrou-se também que são os canais oblíquos os elementos que controlam a resistência da rede ao escoamento. Consequentemente, a remoção de canais horizontais apenas influencia o comportamento previsto pelo simulador de uma forma completamente distinta das outras formas de remoção de elementos implementada no gerador da rede. A comparação entre as previsões do modelo para uma rede uniforme e os resultados obtidos para redes não uniformes mostra que a utilização de uma rede uniforme é adequada para caracterizar o comportamento qualitativo previsto pelo simulador de escoamento. A concordância é mesmo quantitativa desde que as distribuições das dimensões características dos elementos da rede sejam estreitas.

A análise dos valores de A e B previstos pelos modelos geométricos permite concluir que θ e C devem ser função das características do leito de enchimento, em particular de ε . Deste modo, os modelos completos T1 e T2 não são válidos, pois estes assumem que θ é constante e independente das características do meio poroso. Das expressões de $\theta = f(\varepsilon)$ propostas no Capítulo 3, seleccionou-se a equação CR visto ser aquela que se baseia em dados experimentais obtidos em leitos de enchimento formados por partículas com uma distribuição apertada de diâmetros, logo, mais de acordo com as condições de aplicabilidade do modelo geométrico. No entanto, as diferenças entre os dois modelos não são muito significativas, e os valores previstos pelas duas equações podem ser usados para prever o comportamento qualitativo de um meio poroso real.

A comparação com dados experimentais mostrou que o modelo geométrico é adequado para descrever o comportamento de meios porosos com uma estrutura não regular desde que formados por partículas com uma forma aproximadamente esféricas e com uma distribuição apertada de diâmetros. Os resultados permitem concluir que para leitos de enchimento com um valor de porosidade próxima da normalmente encontrada na prática, $\varepsilon \approx 0.4$, $C = 4$ de acordo com os dados experimentais disponíveis. As mesmas conclusões são obtidas para regime de escoamento não linear, prevendo também que $\sum K_j$ deverá estar entre 3 e 4 para descrever o comportamento de leitos de enchimento reais.

Os resultados obtidos mostram que o modelo é capaz de descrever adequadamente e mesmo de prever o comportamento do escoamento através de um meio poroso. As limitações do modelo devem-se sobretudo às limitações do modelo geométrico, aplicável sobretudo para leitos de enchimento formados por partículas com forma aproximadamente esférica com uma distribuição apertada das suas dimensões características, e à forma como os valores de R_j^{ET} são determinados. Em relação a este aspecto, deve-se concluir o desenvolvimento do modelo completo, permitindo determinar a resistência associada ao escoamento para a saída de fluido de uma câmara da rede. A análise do escoamento neste tipo de geometrias poderá exigir a realização de simulações de *CFD* (*Computational Fluid Dynamics*) para a determinação dos termos R_j^{ET} em função das características geométricas das câmaras e dos canais associados entre si, em particular os valores de D_i , d_j e θ .

5. Modelização do transporte de massa

5.1 Introdução

A revisão bibliográfica efectuada na Secção 2.4 permitiu concluir que o transporte de massa através de um meio poroso depende das características geométricas e do escoamento ao nível local. Neste capítulo é usado o modelo de redes introduzido no Capítulo 3 para descrever a estrutura local de um meio poroso e o método proposto no Capítulo 4 para a descrição do comportamento hidrodinâmico. Estes servem de base para a descrição e caracterização do transporte de massa através de um meio poroso.

O modelo proposto baseia-se na determinação da resposta dos elementos da rede a uma perturbação imposta à entrada de fluido na rede. Esta estratégia é análoga à utilização de um traçador para determinar as características macroscópicas do escoamento através de um meio poroso. Como o comportamento dos elementos da rede depende das características geométricas e de escoamento, o bloco do simulador correspondente ao transporte de massa encontra-se a seguir aos blocos do gerador da rede e do simulador hidrodinâmico. O comportamento de um meio poroso é obtido a partir da evolução do perfil do traçador no espaço e no tempo nos elementos da rede, após a imposição de uma perturbação à entrada de fluido na rede. Deste modo, é possível determinar simultaneamente a influência das características da estrutura da rede no transporte de massa e os parâmetros que o caracterizam ao nível macroscópico.

5.2 Modelo para o transporte de massa

5.2.1 Descrição geral

Neste trabalho é proposto um modelo para descrever o transporte de massa através da rede que combina características dos modelos baseados na escrita de equações de balanço material com os modelos do tipo *Particle Tracking* (para uma discussão dos dois tipos de modelos ver Secção 2.4). De acordo com as características assumidas para o escoamento através dos elementos da rede (ver Secção 4.1), consideraram-se as seguintes hipóteses.

- Os canais comportam-se como reactores pistão. Deste modo, a velocidade de uma partícula de traçador não depende da sua posição radial no canal.
- As câmaras comportam-se como reactores perfeitamente agitados.
- Não ocorre transferência de massa entre as fases sólida e fluida.
- Assume-se que a presença do traçador no fluido não modifica as suas propriedades de transporte. Por isso, os possíveis efeitos de convecção natural devido às diferenças de densidade entre o traçador e o fluido não foram considerados na escrita das equações de balanço material. Esta hipótese é válida desde que a concentração do traçador seja baixa (Nigam e Saxena, 1986).

De acordo com as hipóteses anteriores, diferentes mecanismos de transporte de massa encontram-se associados aos elementos da rede. Aos canais estão associados os mecanismos convectivos, visto que não é considerada a difusão de massa. Deste modo, a resposta é funcionalmente idêntica à entrada, observando-se um atraso entre as duas. Nas câmaras dominam os mecanismos dispersivos de transporte de massa. Estas actuam como nós de mistura de traçador, redistribuindo-o na rede de acordo com os valores da velocidade do fluido nos canais de saída. Este efeito é independente da distribuição dos diâmetros das câmaras e do efeito da difusão de massa, dependendo apenas da estrutura geométrica da rede ao nível local.

O comportamento dos elementos da rede é descrito pelas equações de balanço material em estado transiente, de acordo com as hipóteses listadas atrás. Estas são escritas usando como variáveis a concentração de traçador e o tempo. O sistema de equações diferenciais é

resolvido usando um método de *Time Marching*, em que se descreve a evolução temporal e espacial do perfil de concentração de soluto nos elementos da rede.

5.2.2 Modelização do comportamento dos elementos da rede

A descrição do comportamento de cada um dos tipos de elementos é efectuada separadamente. Nesta secção são escritas as equações de balanço material em estado transiente para as câmaras e os canais e que permitem caracterizar, quando resolvidas simultaneamente, o transporte de massa através da rede de elementos. Na Secção 5.3 as equações de balanço material são estudadas e as suas propriedades tomadas em conta de modo a ser possível resolvê-las de modo eficiente.

5.2.2.1 Descrição do comportamento dos canais

Os canais comportam-se como reactores pistão, pelo que a mistura de traçador por difusão nas direcções radial e axial é desprezável. Assumindo que os efeitos de entrada e saída dos canais são desprezáveis, a evolução do perfil de concentrações nos canais é função apenas da coordenada axial do canal, z , e do tempo, t . Para o canal j a equação de balanço material é dada por

$$\frac{\partial C_j(z,t)}{\partial t} + v_j \frac{\partial C_j(z,t)}{\partial z} = 0 \quad (5.1)$$

em que v_j é a velocidade média através do canal e $C_j(z,t)$ é a concentração de traçador no canal. A equação diferencial deve ser resolvida usando o seguinte conjunto de condições inicial e fronteira

$$C_j(z, t \leq 0) = C_j^S \quad (5.2)$$

$$C_j(0, t) = C_j^E(t) \quad (5.3)$$

em que C_j^S é a concentração de traçador à entrada da rede para $t > 0$ e $C_j^E(t)$ é a concentração de traçador à entrada do canal. De modo a simplificar a implementação do modelo, foram consideradas duas situações para $t < 0$. Na mais simples, considera-se que não existe traçador no fluido que entra na rede antes da aplicação da perturbação, ou seja $C_j^S = 0$. Na segunda situação assume-se que a concentração no interior dos canais é uniforme independente da sua posição na rede.

As funções $C_j^E(t)$ dependem das características da perturbação imposta e da posição do canal na rede. Duas situações podem ocorrer.

- Se o canal se encontra na entrada de fluido na rede, $C_j^E(t)$ é definido pela própria perturbação imposta na rede. Esta condição não limita o tipo de perturbações que é possível definir na rede, podendo ser usadas por exemplo perturbações temporais em degrau, pulso, ou impulso. Apesar do modelo implementado permitir definir perturbações em qualquer elemento da rede, apenas foram efectuadas simulações para perturbações definidas nos canais de entrada de fluido na rede. Estas perturbações podem ser uniformemente espaçadas, pontuais ou impostas em determinadas posições do espaço. Como a caracterização do transporte de massa é mais simples para perturbações espacialmente uniformes, em que a concentração de traçador na entrada da rede é independente da posição na entrada de fluido, estas vão ser usadas preferencialmente.
- Caso o canal não se encontre associado à entrada de fluido na rede, de acordo com a hipótese de mistura perfeita nas câmaras, a concentração de entrada é igual à da câmara associada à entrada de fluido no canal, com um atraso associado.

5.2.2.2 Descrição do comportamento das câmaras

Ao escrever a equação de balanço material para as câmaras da rede devem-se tomar em conta os canais de entrada de fluido associados a estas, como se exemplifica na Figura 5.1 para uma rede sem canais horizontais.

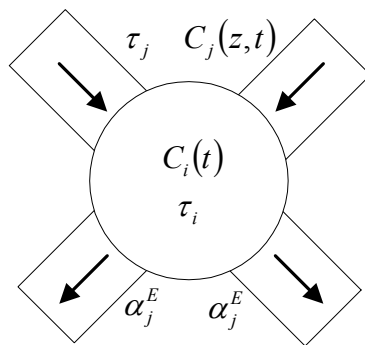


Figura 5.1 Exemplo de câmara da rede, sem canais horizontais, com dois canais de entrada e dois canais de saída de fluido. Os sentidos de escoamento nos canais em relação à câmara são apresentados.

De acordo com a Figura 5.1 e tomando em conta que a mistura nos nós da rede é perfeita, a concentração de traçador em cada câmara, $C_i(t)$, é função apenas do tempo, dada pela seguinte equação de balanço material

$$V_i \frac{dC_i(t)}{dt} + C_i(t) \sum q_j^O = \sum q_j^E C_j(l_j, t) \quad (5.4)$$

em que V_i é o volume da câmara i e $C_j(l_j, t)$ representa a concentração em função do tempo à saída dos canais de entrada de fluido na câmara. Os somatórios referem-se aos canais de saída, para os termos q_j^O , e aos canais de entrada, para os termos q_j^E , associados à câmara i da rede. Notar que, apesar de na Figura 5.1 não serem apresentados canais horizontais, a Equação 5.4 é válida independentemente do número de coordenação da câmara i .

Como a presença do traçador não modifica o comportamento hidrodinâmico, o balanço material global à câmara i permite escrever a seguinte relação

$$\sum q_j^O = \sum q_j^E = Q_i \quad (5.5)$$

Os valores de Q_i podem ser determinados directamente das características do campo de escoamento na rede. A equação diferencial de primeira ordem deve ser resolvida usando a seguinte condição inicial

$$C_i(t \leq 0) = C_i^S \quad (5.6)$$

em que C_i^S representa a concentração de traçador em estado estacionário anterior à aplicação da perturbação. As situações aplicáveis nos canais para as funções C_j^S também são aplicáveis nas câmaras para as funções C_i^S . Por exemplo, se antes da aplicação da perturbação a concentração de traçador à entrada de fluido na rede for nula, então $C_i^S = 0$.

Para a situação em que os valores de D_i são nulos, a Equação 5.4 modifica-se, pois desaparecem os termos relacionados com a acumulação de traçador na câmara, reduzindo-se a equação de balanço material à forma

$$C_i(t) \sum q_j^O = \sum q_j^E C_j(l_j, t) \quad (5.7)$$

A expressão obtida é uma equação algébrica. A condição inicial definida para as câmaras deixa de ter sentido, devendo-se na resolução das equações algébricas atender à forma como ocorrem os atrasos das câmaras. Na literatura a maior parte dos estudos em que se modeliza o transporte de massa usando modelos de redes assume que o volume das câmaras é nulo. No entanto, concluiu-se no Capítulo 4 que apenas quando os efeitos das ligações entre as câmaras

e os canais são tomados em conta é que o simulador hidrodinâmico descreve quantitativamente todos os regimes de escoamento num meio poroso. Deste modo, é de se esperar que somente quando existem dois tipos de elementos na rede é que o modelo de transporte de massa permite descrever adequadamente o transporte de massa num meio poroso. Neste trabalho apenas vão ser consideradas redes em que as câmaras têm um diâmetro não nulo.

5.2.2.3 Modelo completo

Por conveniência de cálculo e análise dos resultados, as equações de balanço material escritas nas secções anteriores para as câmaras e canais da rede devem ser reescritas usando grupos adimensionais e, tanto quanto possível, adimensionalizadas. Ao contrário do modelo de dispersão axial, em que é possível definir sem ambiguidades quais os parâmetros a ser usados na adimensionalização das equações de balanço material, no modelo de redes, diferentes grupos adimensionais devem ser definidos para cada tipo de elemento. As características das perturbações também devem ser tomadas em conta na adimensionalização das equações, influenciando o modo como as variáveis podem ser normalizadas e como deve ser efectuado este procedimento.

Definindo os tempos de passagem do fluido através de um canal

$$\tau_j = \frac{V_j}{q_j} \quad (5.8)$$

e através de uma câmara

$$\tau_i = \frac{V_i}{Q_i} \quad (5.9)$$

e a variável adimensional

$$x = \frac{z}{l_j} \quad (5.10)$$

as equações de balanço material dos canais e das câmaras, Equações 5.1 e 5.4, podem ser reescritas na forma

$$\tau_j \frac{\partial C_j(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial C_j(x,t)}{\partial x} = 0 \quad (5.11)$$

$$\tau_i \frac{dC_i(t)}{dt} + C_i(t) = \sum \alpha_j^E C_j(l, t) \quad (5.12)$$

em que o somatório se refere aos canais de entrada de fluido na câmara i e o parâmetro α_j^E é definido por

$$\alpha_j^E = \frac{q_j^E}{Q_i} \quad (5.13)$$

Para uma câmara qualquer da rede existe um número de valores de α_j^E igual ao número de canais de saída do fluido da câmara, como se pode observar na Figura 5.1. De notar que os valores de α_j^E não podem ser considerados isoladamente mas sempre associados a uma câmara da rede. De acordo com o balanço material global nas câmaras, os valores de α_j^E associados a uma câmara devem verificar a seguinte condição

$$\sum \alpha_j^E = 1 \quad (5.14)$$

Um parâmetro equivalente, α_j^O , pode ser definido para os canais de entrada de fluido nas câmaras, através da expressão

$$\alpha_j^O = \frac{q_j^O}{Q_i} \quad (5.15)$$

Do mesmo modo, para uma câmara existe um número de valores de α_j^O igual ao número de canais de entrada de fluido na câmara, devendo estes verificar também a condição $\sum \alpha_j^O = 1$.

Notar que os valores de α_j^O e α_j^E associados a um canal qualquer da rede são diferentes pois os dois parâmetros são definidos em câmaras diferentes. No entanto, de acordo com a sua definição, para o mesmo canal o caudal volumétrico é fixado variando apenas Q_i . Dependendo das características geométricas e de escoamento na rede, este valor pode variar localmente. No entanto, observa-se que na grande maioria dos casos a sua variação espacial é pouco significativa, mostrando-se na Secção 5.4.3.4 que as distribuições dos valores de α_j^O e α_j^E numa rede são praticamente idênticas.

Estes parâmetros são indicadores da importância das heterogeneidades do campo de escoamento através da rede de câmaras e canais no transporte de massa, função por sua vez das características da estrutura geométrica da rede. Deste modo, a distribuição espacial dos valores de α_j^E e α_j^O representa uma medida da importância do transporte de massa por mecanismos dinâmicos e da influência das características do campo de escoamento neste. O algoritmo implementado neste trabalho apenas toma em conta a distribuição de valores de α_j^E , de acordo com a equação geral de balanço material para as câmaras, Equação 5.22, e a forma como o sistema de equações de balanço material nos elementos da rede são resolvidos (ver Secção 5.3.1).

Quando os nós de mistura não possuem volume, correspondente à situação em que $D_i = 0$, a equação de balanço normalizada pode ser escrita na forma

$$C_i(t) = \sum \alpha_j^E C_j(1, t) \quad (5.16)$$

O sistema de equações de balanço material deverá ser resolvido usando-se o seguinte conjunto de condições fronteira e iniciais

$$C_j(0, t) = C_j^E(t) \quad (5.17)$$

$$C_j(x, t \leq 0) = C_j^S \quad (5.18)$$

$$C_i(t \leq 0) = C_i^S \quad (5.19)$$

em que as concentrações C_j^E , C_j^S e C_i^S foram definidas nas Secções 5.2.2.1 e 5.2.2.2.

A adimensionalização da concentração pode ser obtida usando um valor referência da concentração de traçador, C_0 , que depende das características da perturbação, em particular da distribuição espacial de traçador à entrada da rede. Se a perturbação for espacialmente uniforme e $C_j^E(t)$ for constante para valores de tempo elevados, C_0 é naturalmente igual a esse valor limite. Caso contrário, deverá ser definido um valor médio que depende das características da perturbação imposta, ou então são usadas as equações de balanço material na sua forma dimensional. Para as perturbações mais usuais (como por exemplo, perturbações em degrau ou impulso) e outras em que é possível definir sem ambiguidades, a forma mais correcta para adimensionalizar a resposta prevista pelo simulador de transporte de massa é

discutida no Apêndice C.7. Para perturbações espacialmente não uniformes ou sem um valor limite para tempos elevados, os resultados são apresentados sem normalização.

Definindo as seguintes concentrações adimensionais

$$F_j(x,t) = \frac{C_j(x,t)}{C_0} \quad (5.20)$$

$$F_i(t) = \frac{C_i(t)}{C_0} \quad (5.21)$$

e introduzindo nas equações 5.23 e 5.22 obtém-se

$$\tau_j \frac{\partial F_j(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial F_j(x,t)}{\partial x} = 0 \quad (5.22)$$

$$\tau_i \frac{dF_i(t)}{dt} + F_i(t) = \sum \alpha_j^E F_j(1,t) \quad (5.23)$$

Para uma rede sem câmaras, a forma equivalente da Equação 5.16 obtida da equação anterior pode ser expressa na forma

$$F_i(t) = \sum \alpha_j^E F_j(1,t) \quad (5.24)$$

As equações de balanço material adimensionalizadas devem ser resolvidas para o seguinte conjunto de condições inicial e fronteira

$$F_j(0,t) = F_j^E(t) \quad (5.25)$$

$$F_j(x,t \leq 0) = F_j^S \quad (5.26)$$

$$F_i(t \leq 0) = F_i^S \quad (5.27)$$

As funções F_j^E , F_j^S e F_i^S são as concentrações adimensionais correspondentes a C_j^E , C_j^S e C_i^S , definidas de forma análoga às concentrações de traçador nas câmaras e canais.

Observa-se que com ou sem normalização do valor de concentração nos elementos da rede a forma das equações de balanço material e o conjunto de condições iniciais e fronteira que caracterizam o transporte de massa na rede é similar. Em particular, o mesmo conjunto de

parâmetros caracteriza o comportamento dos elementos da rede nas duas situações. A implementação do algoritmo para a descrição do transporte de massa é idêntica em qualquer das situações. Por este motivo não se diferenciou na Secção 5.3 os casos com e sem normalização da concentração de traçador, sendo a descrição apresentada independentemente deste aspecto.

Ao contrário do modelo de dispersão axial, não é possível definir em qualquer das situações anteriores um tempo adimensional através da definição de um valor médio das distribuições dos valores de τ_i e τ_j . Esta opção pode ser adequada para a caracterização local do comportamento de transporte de massa ao nível macroscópico mas não ao nível local. Como a equação de balanço material escrita para o modelo de dispersão axial é válida para descrever o comportamento macroscópico de um meio poroso, é natural definir um tempo adimensional usando o tempo de passagem global através do meio poroso. De modo a permitir a comparação dos valores obtidos pelo simulador de transporte de massa com as previsões do modelo de dispersão axial, um tempo de passagem global da rede foi definido, sendo este igual à razão entre o volume de vazios da rede e o caudal total de fluido que a atravessa.

5.3 Implementação do modelo de descrição do transporte de massa

Na secção anterior mostrou-se que a possibilidade ou não de normalizar o valor da concentração de traçador na rede resulta em equações de balanço material distintas mas formalmente similares. Em particular, os parâmetros e a estrutura das equações diferenciais são idênticos, permitindo deste modo, tratá-las do mesmo modo. Assim, apenas vai ser descrito o algoritmo implementado para resolver as equações de balanço material nos elementos da rede quando é possível adimensionalizar $C_i(t)$ e $C_j(x,t)$ (notar que a coordenada espacial nos canais é sempre normalizável).

O sistema de equações dado pelas Equações 5.23 e 5.22 juntamente com as condições iniciais e fronteira definidas pelas Equações 5.25, 5.26 e 5.27, foi resolvido por um método baseado em *Particle Tracking/Time Marching*. Neste caso foi seguido o perfil de concentrações de traçador na rede e não a evolução de uma nuvem de partículas. Como se utilizam concentrações em vez do número de partículas, a inclusão do comportamento transiente das câmaras e da reacção química é bastante simplificada. A resolução eficiente das equações de balanço deve tomar em conta as suas características e a forma como as câmaras e os canais se relacionam entre si.

As equações de balanço material para os canais têm um carácter hiperbólico, sendo a resposta do canal qualitativamente similar à perturbação sentida no seu início. Qualitativamente a progressão do traçador através dos canais pode ser vista como similar à propagação de uma onda de concentração, em particular nos instantes a seguir à chegada da perturbação imposta na entrada da rede a um ponto qualquer de um qualquer canal da rede. Como se assume que as partículas do traçador se deslocam com a mesma velocidade média do fluido, vai existir um atraso na resposta, sendo este igual ao tempo de passagem através do canal, τ_j .

As equações de balanço material para as câmaras são equações diferenciais de primeira ordem. Quando o traçador é não reactivo, as soluções são combinações de funções exponenciais, sendo a sua forma dependente do percurso do traçador até à câmara.

5.3.1 Descrição geral

De acordo com as características do escoamento dos canais, o perfil de concentrações nos elementos da rede pode ser obtido resolvendo apenas as equações de balanço material das câmaras. Pela Equação 5.22, o cálculo de $F_i(t)$ em cada um dos incrementos requer apenas que seja conhecida a concentração de traçador no extremo dos canais de entrada de fluido na câmara, $F_j(1, t)$. O valor de $F_j(1, t)$ é igual à concentração observada na câmara no outro extremo do canal para o tempo $t - \tau_j$. Deste modo, a Equação 5.22 pode ser escrita na forma

$$\tau_i \frac{dF_i(t)}{dt} + F_i(t) = \sum \alpha_j^E F_j(t - \tau_j) \quad (5.28)$$

em que $F_j(t - \tau_j)$ representa o valor de concentração na câmara associada ao canal j de entrada de fluido na câmara e τ_j é o tempo de passagem do fluido nesse canal. O somatório da equação de balanço material adimensional refere-se aos canais de entrada de fluido na câmara i .

O termo $F_j(t - \tau_j)$ representa o atraso derivado do escoamento nos canais. Deste modo, o tempo de passagem das partículas através de um meio poroso é tomado em conta explicitamente e a velocidade de propagação da perturbação de concentração do traçador ao longo da rede é finita. Este comportamento contrasta com o comportamento previsto pelo modelo de dispersão axial, em que se prevê uma propagação da perturbação a uma velocidade infinita. De acordo com Sundaresan *et al.* (1980) e Westerterp *et al.* (1995a e 1995b),

qualquer modelo que pretenda descrever o transporte de massa através de um meio poroso tem de possuir esta propriedade.

A inclusão dos atrasos devidos aos canais torna a resolução numérica do sistema de equações diferenciais mais complexa. Na literatura, equações diferenciais deste tipo são designadas por DDE, *Delay Differential Equations*, para as diferenciar das equações diferenciais em que a solução não é função dos valores da solução para tempos anteriores. Como os tempos de passagem dos canais são constantes e não influenciam as derivadas das equações, as equações diferenciais dizem-se de atrasos constantes ou puros (Baker *et al.*, 1994 e 1995; Shampine e Thompson, 2001). Equações deste tipo surgem na modelização da transmissão de doenças infecciosas (Hairer *et al.*, 1986; Nelson e Perelson, 2002), sistemas de controle (Ramirez e Puebla, 1999), proliferação celular (Baker *et al.*, 1998), dinâmica de sistemas predador-presa em ecologia (Hairer *et al.*, 1986; Bocharov e Rihan, 2000), além de outras aplicações, como se pode ler na revisão bibliográfica de Baker *et al.* (1995). A comparação de equações diferenciais com e sem atrasos mostra que o comportamento dos dois tipos de equações pode ser completamente diferente, mesmo tendo as equações a mesma forma. Em particular, a inclusão dos atrasos pode resultar na ocorrência de descontinuidades na solução, devendo estes factores ser tomados em conta na resolução numérica deste tipo de equações diferenciais.

A resolução numérica de equações diferenciais com atrasos requer que a solução seja conhecida ao longo do tempo. Os métodos numéricos usados normalmente para resolver sistemas de equações diferenciais sem atrasos são aplicáveis a equações com atrasos, desde que a influência dos atrasos seja tida em consideração. Outro aspecto importante na resolução numérica de equações diferenciais com atrasos é a identificação de possíveis descontinuidades na solução, em particular nas derivadas da solução. Hairer *et al.* (1986) e Shampine e Thompson (2001) mostraram que o erro e a ordem de convergência de métodos para a integração numérica de equações diferenciais com atrasos depende do tipo de descontinuidades que ocorrem na solução da equação diferencial.

Diferentes estratégias foram propostas na literatura para tomar em consideração os atrasos associados aos canais (Hairer *et al.* 1986; Paul e Baker, 1992; Baker *et al.* 1994; Paul, 2000; Shampine e Thompson, 2001). A grande maioria envolve a adaptação de métodos numéricos usados para integração de equações diferenciais sem atrasos. No caso geral, Hairer *et al.* (1986) sugerem que devem ser usados preferencialmente métodos em que seja possível estimar a solução global desde o início da integração. No entanto, como se pretende que o

simulador de transporte de massa permita caracterizar diferentes tipos de perturbações, com respostas dos elementos da rede (em particular das câmaras) diferentes, não é possível definir uma função válida para todos os casos possíveis. Como os valores dos atrasos dos canais são constantes e função apenas das condições de escoamento, foi considerada outra estratégia, que se baseia na discretização espacial dos canais (ver Secção 5.3.3).

Para resolver o sistema de equações diferenciais que permite caracterizar o comportamento da rede, foi seleccionado um método de Runge-Kutta de quarta ordem (ver por exemplo, Chapra e Canale, 1992). Este método permite determinar uma estimativa de $F_i(t + \Delta t)$ conhecido $F_i(t)$, sendo Δt o passo de integração. O valor adequado deste parâmetro é função das características geométricas e do escoamento na rede, da perturbação imposta na rede e da precisão pretendida.

Na aplicação deste método é conveniente escrever as equações de balanço material das câmaras, Equação 5.28, na seguinte forma

$$\frac{dF_i(t)}{dt} = f(t, \tau_i, \tau_j, \alpha_j^E) \quad (5.29)$$

$$f(t, \tau_i, \tau_j, \alpha_j^E) = \frac{1}{\tau_i} \{ \sum \alpha_j^E F_j(t - \tau_j) - F_i(t) \} \quad (5.30)$$

Na função f estão incluídos os efeitos das características geométricas da rede e do escoamento. Se os atrasos dos canais não fossem tidos em conta, o método numérico estimaria $F_i(t + \Delta t)$ usando apenas os valores de $F_i(t)$ e f calculados para o tempo t . Aqui o cálculo de f requer conhecer $F_j(t - \tau_j)$, correspondente aos valores da concentração nas câmaras nos extremos dos canais de entrada de fluido na câmara i mas não associados a esta.

De acordo com a Equação 5.28, não é necessário conhecer a função $F_i(t)$ desde o início da simulação até ao tempo t , mas apenas entre os tempos t e $t - \tau_j$. No limite, apenas é necessário guardar para cada câmara os valores associados aos canais de entrada de fluido na câmara. De acordo com a estrutura geométrica da rede, o número de valores a guardar é no máximo igual a 5, correspondente ao caso limite de uma câmara com seis canais associados e apenas um canal de saída de fluido. No entanto, na implementação do método numérico é necessário guardar outros valores de concentração, como se mostra na Secção 5.3.3.

O valor de Δt deve ser escolhido de modo a permitir uma descrição adequada do comportamento transiente dos elementos da rede, sendo este controlado pelos valores de τ_i e τ_j . Como a resposta de um elemento da rede é tanto mais rápida quanto menor for o valor do tempo de passagem neste, Δt vai depender sobretudo dos valores mais baixos das distribuições de valores de τ_i e τ_j . Esta restrição impõe um limite superior em Δt que pode ser usado pelo método numérico, mesmo para a situação em que o passo de integração seja variável. Neste trabalho considerou-se como valor limite uma dada percentagem do valor mínimo das distribuições de valores de τ_i e τ_j . Como as equações de balanço material para as câmaras e canais da rede se encontram associadas entre si, ambas as distribuições devem ser consideradas simultaneamente. De modo a simplificar a implementação do método numérico para a resolução do sistema de equações diferenciais, Δt é constante e fixado no início da simulação.

5.3.2 Resolução das equações de balanço material das câmaras

Como os canais se comportam como atrasos puros, a resolução das equações de balanço material nas câmaras pode ser feita de modo a minimizar o número de equações que devem ser resolvidas simultaneamente em cada um dos passos de integração.

Logo após a aplicação da perturbação à entrada de fluido na rede, não é necessário resolver as equações de balanço material em nenhuma câmara da rede, visto que o traçador ainda não teve tempo de alcançar as câmaras na linha de entrada de fluido na rede. Deste modo, entre $t = 0$ e o menor valor do tempo de passagem nos canais oblíquos de entrada de fluido na câmara, apenas é actualizado o perfil de concentrações associado a estes canais.

Apenas no momento em que o traçador alcança a primeira câmara no topo da rede é que passa a ser necessário resolver a equação de balanço material nesta. Esta estratégia pode ser estendida a todas as câmaras da rede, pois é possível determinar os tempos mínimos de chegada do traçador a cada uma das câmaras da rede, t_i^{act} . Ao incrementar o tempo de integração, apenas são resolvidas as equações de balanço material para as câmaras cujo tempo de chegada do traçador é menor ou igual ao tempo actual de simulação, correspondente à parte da rede em que a perturbação se fez sentir. De modo a simplificar a implementação do algoritmo, foi definido também o tempo mínimo de activação de uma linha da rede, t_l^{act} . Este parâmetro permite saber, em cada passo de integração, o número de linhas a partir da entrada

de fluido na rede em que a influência da perturbação já se fez sentir. Apenas as equações de balanço material nas câmaras que se encontram nestas linhas são consideradas pelo algoritmo. Deste modo deixa de ser necessário verificar para todas as câmaras da rede a chegada da perturbação para cada incremento temporal mas apenas para as linhas em que o tempo de simulação, t^* , seja inferior a t_l^{act} . Os valores de t_i^{act} e de t_l^{act} podem ser determinados facilmente da distribuição de tempos de passagem nos canais, que depende apenas do perfil de velocidades através destes. A estrutura geral do algoritmo implementado no simulador do transporte de massa é apresentada na Figura 5.2.

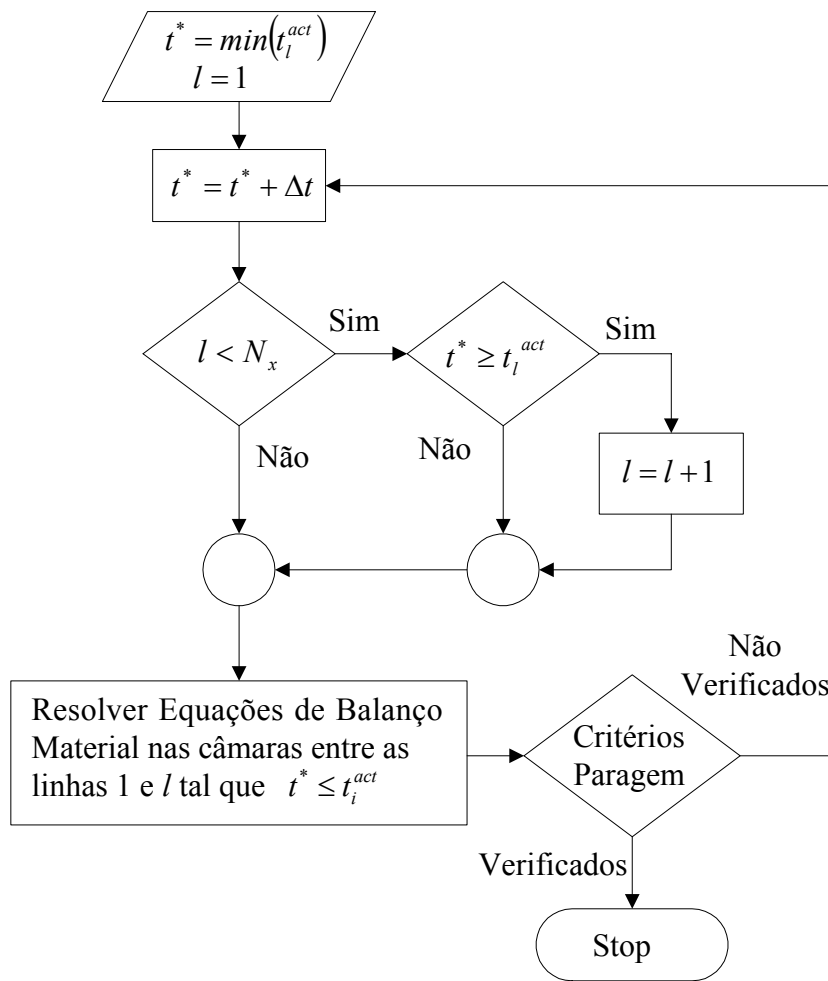


Figura 5.2 Algoritmo implementado para a resolução do sistema de equações de balanço material nas câmaras da rede.

Este possui uma estrutura modular e o parâmetro mais importante é a relação entre os valores de t^* e de t_l^{act} . Aspectos importantes como por exemplo os critérios de convergência ou a simplificação e optimização do sistema de equações diferenciais são considerados nas secções seguintes. O algoritmo descrito é válido independentemente das características geométricas e de escoamento na rede, da forma como os atrasos são tomados em conta e dos critérios de

paragem implementados (ver Secção 5.3.4). Em algumas situações, nas quais se incluem a maior parte dos casos mais importantes do ponto de vista prático, é possível simplificar a implementação do algoritmo geral e reduzir o esforço necessário para resolver o sistema de equações diferenciais (ver Secção 5.3.5).

5.3.3 Estratégia implementada para tomar em conta os atrasos dos canais

O factor mais importante na resolução do sistema de equações de balanço material definido pela Equação 5.28 é a forma como os atrasos associados aos canais devem ser tomados em conta. A inclusão destes requer que a concentração de traçador no interior das câmaras seja conhecida não apenas para o t^* correspondente ao incremento de tempo imediatamente anterior mas também para outros incrementos anteriores. Deste modo, a história da evolução da concentração de traçador é tomada em conta explicitamente pelo simulador.

5.3.3.1 Descrição geral

A utilização de um método de Runge-Kutta com um passo fixo para a resolução do sistema de equações diferenciais requer que a evolução no tempo seja conhecida pelo menos no intervalo entre $t - \tau_j$ e t . Nestas condições, a definição de um valor constante de Δt é equivalente a dividir os canais em vários intervalos igualmente espaçados, sendo o número de incrementos, N_j^{INC} , dado pela expressão

$$N_j^{INC} = \text{Int}\left(\frac{\tau_j}{\Delta t}\right) \quad (5.31)$$

De notar que o número de incrementos é proporcional ao valor do tempo de passagem no canal. Este parâmetro encontra-se relacionado com a dinâmica dos elementos, sendo esta tanto mais rápida quanto menor for τ_j . De modo a assegurar que o comportamento dos elementos é descrito adequadamente, N_j^{INC} deve ser superior a 3. Esta restrição impõe o limite superior a Δt que é possível definir na rede, embora também seja necessário tomar em conta as distribuições das dimensões características dos elementos da rede.

Como nos canais se assume escoamento pistão, entre incrementos sucessivos de tempo a onda de traçador vai-se deslocar Δx_j , distância equivalente ao espaçamento entre dois incrementos do canal, definido por

$$\Delta x_j = v_j \Delta t \quad (5.32)$$

N_j^{INC} tem que ser definido como um número inteiro, pois caso contrário a onda de concentração vai alcançar a câmara no extremo do canal entre dois incrementos de tempo. Este é o caso geral em que existe uma distribuição espacial dos tempos de passagem das câmaras e dos canais da rede.

Este aspecto é de particular importância logo após a chegada da perturbação do traçador a uma câmara da rede, visto ser nos instantes seguintes que se observam as maiores variações na resposta destas. Uma das estratégias que permite evitar este problema baseia-se no cálculo de um valor de Δt tal que todos os valores de N_j^{INC} sejam inteiros. Em teoria é possível calcular este valor determinando o máximo divisor das distribuições dos tempos de passagem nas câmaras e nos canais. No entanto, quando as distribuições dos diâmetros das câmaras e dos canais não são pontuais, Δt calculado seria um valor muito baixo, quando comparado com a gama de valores de τ_j e τ_i . Nestes casos o tempo de simulação necessário para descrever o comportamento da rede seria demasiado grande, pelo que esta estratégia não foi considerada no modelo proposto.

5.3.3.2 *Análise do comportamento de uma rede simples*

Para melhor analisar a forma como o algoritmo implementado neste trabalho descreve a evolução no tempo dos perfis de concentração nos elementos da rede e como os atrasos associados aos canais são tomados em conta, considere-se uma rede simples formada por três canais e duas câmaras em série (ver Figura 5.3). Assume-se que para o primeiro canal, $\tau_1 = 1.0$, para o segundo canal, $\tau_2 = 1.1$, $\Delta t = 0.5$ e que a perturbação imposta na rede é um degrau.

Após a imposição da perturbação no canal 1, a onda de concentração vai-se deslocar nesse canal, alcançando a primeira câmara após dois incrementos. Como $\Delta t = 0.5$ e τ_1 são múltiplos, a posição do segundo incremento no canal 1 coincide com a entrada da câmara. Ao incrementar $t^* = 1.0$ para $t^* = 1.5$, a equação de balanço material na câmara entre os canais 1 e 2 deve ser resolvida. Como se assume que a mistura nas câmaras é perfeita, considera-se que atraso associado às câmaras é nulo. Deste modo, a concentração no primeiro incremento do canal 2 é igual à concentração obtida resolvendo o balanço material na primeira câmara. Ao incrementar t^* para 2.0 o valor de concentração para o primeiro incremento do canal 2

deve ser actualizado usando o novo valor de concentração obtido e resolvendo o balanço material na câmara imediatamente antes. O valor de concentração no segundo incremento é obtido tomando em conta que o transporte de massa nos canais apenas se dá por convecção e que o avanço da perturbação é equivalente a uma onda, como se pode observar na Figura 5.3.

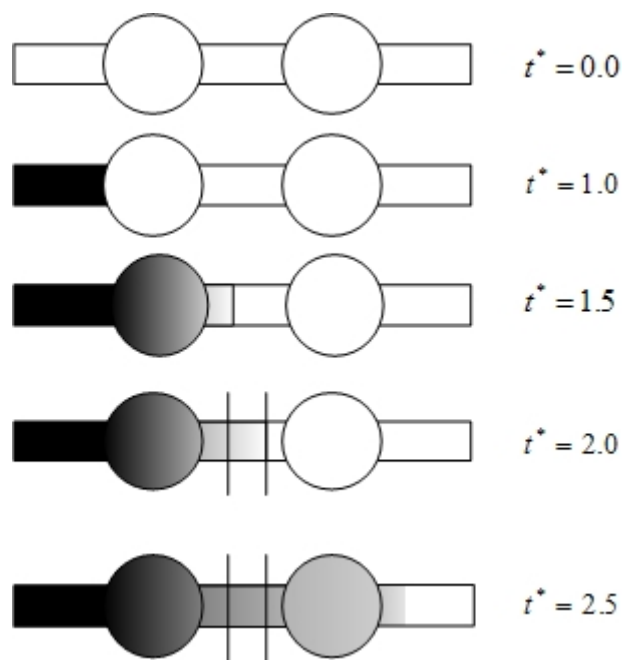


Figura 5.3 Evolução da concentração de traçador numa rede formada por duas câmaras e dois canais.

Incrementando o tempo de simulação para $t^* = 2.5$, o traçador vai alcançar a segunda câmara durante a aplicação do incremento (ver Figura 5.3). A resolução da equação de balanço material na segunda câmara deve ser efectuada a partir de $t^* = 2.1$ e não a partir de $t^* = 2.0$, visto ser esse o instante em que o traçador alcança a câmara. Ao resolver a equação de balanço material nesta câmara, o valor do passo de integração a usar pelo método de integração é 0.4 e não 0.5. Por outro lado, a integração da equação de balanço material na segunda câmara requer o conhecimento da concentração de saída de traçador na primeira câmara para $t^* = 1.0$. Como os canais actuam como atrasos puros, os valores de concentração de saída de traçador da primeira câmara atingem a segunda câmara para $t^* = 1.1$.

Deste modo, o incremento de tempo para $t^* = 2.5$ deve ser dividido em duas partes, para tomar em conta explicitamente a chegada do traçador à segunda câmara, permitindo reduzir o erro numérico associado.

Para redes pequenas a integração das equações de balanço material nas câmaras poderia ser efectuada de modo a tomar em conta a chegada do traçador às diferentes câmaras da rede. No

caso geral teriam de ser considerados todos os canais de entrada de fluido nas câmaras e os diferentes tempos de chegada de traçador por cada um destes. Apesar de ser possível definir os intervalos em que as equações de balanço material devem ser resolvidas para cada um dos incrementos de tempo, a implementação do algoritmo é muito complexa. Em particular, o passo de integração deixaria de ser constante e passaria a ser necessário associar a cada incremento dos canais o valor de tempo correspondente ao valor de concentração de traçador neste.

De forma a simplificar a implementação do modelo, não se considerou explicitamente o momento de chegada do traçador a uma câmara na resolução das equações de balanço material. Quanto menor for Δt menor é o erro numérico associado ao facto de se considerar exactamente a chegada do traçador às câmaras. Assim, escolhendo Δt suficientemente baixo, o erro cometido é pouco significativo. Este aspecto é analisado em detalhe na Secção 5.4.1.

5.3.3.3 Extensão a uma rede geral

A descrição anterior pode ser estendida ao caso geral de uma rede com qualquer tipo de estrutura. A generalização do algoritmo descrito na secção anterior requer que alguns casos particulares sejam tomados em conta, em particular o modo como os valores de concentração de traçador nos vários incrementos dos canais são determinados.

Para o primeiro incremento do canal, duas situações diferentes podem-se definir conforme a posição do canal relativamente à entrada de fluido na câmara. Se o canal for oblíquo e se encontrar na linha de entrada de fluido na rede, o valor de concentração é obtido directamente da perturbação imposta na rede. Caso contrário, é utilizado o valor de concentração obtido resolvendo a equação de balanço material na câmara associada ao extremo por onde o fluido entra no canal.

Para os restantes incrementos, o valor de concentração é calculado usando o valor de concentração imediatamente anterior. Na ausência de reacção química, o valor da concentração de traçador não se modifica entre duas posições contíguas do canal quando se incrementa t^* de um valor Δt .

A actualização dos valores de concentração nos canais é efectuada partindo do fim do canal para o início, como se descreve na Secção 5.3.6.2. O valor de concentração do primeiro incremento é igual à concentração de soluto na câmara associada ao primeiro incremento espacial do canal. A actualização dos valores de concentração nos canais de saída de fluido de

uma câmara é equivalente à propagação de uma onda de concentração centrada nesta, devendo ser actualizados em cada câmara um número de incrementos igual ao maior valor dos canais de saída de fluido associados. Ao resolver as equações de balanço material nas câmaras a jusante da câmara apenas é necessário conhecer o número de incrementos nos canais de saída de fluido e usar o valor de concentração adequado, que, em acordo com o algoritmo implementado, é igual em todos os canais. Na implementação do modelo, a actualização dos valores de concentração nos canais é efectuada sempre após resolver as equações diferenciais dos balanços materiais nas câmaras.

5.3.4 Critérios de paragem do simulador de transporte de massa

A simulação de qualquer fenómeno físico requer que sejam definidos critérios ou condições que devem ser verificados para terminar os cálculos. Ao contrário da simulação do escoamento através da rede de elementos, em que é necessário resolver um sistema de equações algébrico e é fácil definir sem ambiguidades critérios de convergência (e naturalmente de paragem), na simulação do transporte de massa a mesma situação não se verifica. Como se trata de uma simulação dinâmica, não é correcto falar de convergência no sentido restrito da palavra. Apesar de para alguns tipos de perturbações, como por exemplo perturbações em degrau espacialmente uniforme, ser possível saber qual é o comportamento previsto pelo modelo para tempos grandes, no caso geral isso é impossível, visto que os critérios mais adequados dependem em grande medida das características da perturbação imposta na entrada da rede.

Foram definidos três critérios de paragem no simulador de transporte, tendo-se usado em todas as simulações dois critérios em simultâneo. Independentemente dos critérios usados, estes só começam a ser verificados apenas quando a influência da perturbação alcança a saída da rede, ou seja, quando a concentração de saída de traçador da rede é diferente de zero.

Em todas as simulações foi usado um critério de paragem independente das características da perturbação e baseado na definição de um tempo máximo de simulação, t_{max} , até onde a simulação do transporte de massa é efectuada. Este valor é definido como um múltiplo do tempo de passagem global do fluido através da rede, τ_G , ou seja

$$\tau_G = \frac{V_V}{q_T} \quad (5.33)$$

em que V_v representa o volume total de vazios da rede, calculado a partir das características geométricas dos elementos da rede e q_T é o caudal total através da rede. O múltiplo de τ_G é definido no conjunto inicial de dados do simulador de transporte de massa, devendo ser maior que 1 de modo a permitir que a influência da perturbação seja sentida em todos os elementos da rede. O valor adequado de $t_{\max}$ depende das características geométricas das redes, e em particular dos valores médios e dos valores dos desvios padrão das distribuições de diâmetros das câmaras e dos canais (ver Secção 5.4.4.2).

A definição e a utilização dos restantes critérios dependem das características das perturbações impostas. Em particular, se a resposta da rede tender para um valor constante de concentração para tempos elevados (pelo menos $t^* > \tau_G$) critérios especiais podem ser definidos com base na diferença entre o valor médio de concentração à saída da rede e o valor limite esperado. Quando a diferença é menor que um valor limite, definido pelo utilizador, a simulação termina e pode-se assumir que a resposta da rede alcançou o estado estacionário. Esta estratégia pode também ser aplicada para reduzir o número de equações diferenciais a resolver para cada incremento de tempo, como se descreve em detalhe na Secção 5.3.5.2.

O critério anterior pode ser aplicado no simulador a perturbações em degrau, impulso, pulso e degrau invertido, incluindo portanto o tipo de perturbações que normalmente são usadas para caracterizar o transporte de massa num meio poroso. Para perturbações em que a resposta da rede possui um máximo (como por exemplo na resposta a um pulso), o critério deverá ser aplicado após este ter sido alcançado. Como o critério se baseia na comparação de valores sucessivos da concentração média de saída de soluto da rede, este é aplicável independentemente da forma como a distribuição é imposta à entrada da rede.

Critérios de paragem mais rigorosos podem ser definidos com base na verificação do balanço material global para o traçador da rede. No estado de desenvolvimento do simulador de transporte de massa estes são aplicáveis para perturbações espacialmente uniformes e em que a resposta da rede à perturbação imposta tende para um valor limite para tempos elevados. Diferentes variantes deste critério podem ser definidas em função das características da perturbação, sendo os casos implementados no simulador de transporte apresentados de seguida.

- Para perturbações em pulso o número total de moles de traçador que entram na rede pode ser determinado com base nas características da perturbação. Comparando este valor com

o número total de moles de traçador que sai da rede ao longo do tempo, quando a diferença entre os dois é menor que um certo valor limite, a simulação do transporte de massa deverá parar.

- Para perturbações em degrau, quando os elementos da rede se aproximam das condições de saturação a diferença entre o número de moles de traçador que entra e sai da rede entre t^* e $t^* + \Delta t$ tende para zero. Nestas condições, os elementos da rede e em particular as câmaras encontram-se perto das condições de saturação e não ocorre acumulação de traçador nos elementos da rede. Este critério é aplicável a perturbações em que a concentração de soluto à entrada não é constante mas sim uma função conhecida do tempo, como por exemplo uma função rampa.
- Para perturbações em degrau invertido, como os elementos da rede se encontram inicialmente saturados de soluto, é possível determinar o número total de moles que se encontra no seu interior. A evolução do perfil de concentrações para esta perturbação é equivalente a remover o soluto da rede, pelo que para tempos elevados o número total de moles que saiu da rede aproxima-se do valor inicial. Quando a diferença entre estes dois valores é menor que um dado valor limite, a simulação termina.

Qualquer dos três tipos de critérios de paragem descritos pode ser aplicado para a resposta normalizada ou não da rede. A utilização de mais do que um critério de paragem assegura a obtenção de resultados mesmo quando um dos critérios não é verificado, sendo estes por vezes adequados do ponto de vista qualitativo e mesmo quantitativo.

No entanto, a verificação dos critérios de paragem não assegura que os resultados previstos pelo simulador de transporte de massa são válidos. Em particular, é possível verificar o balanço material global para perturbações em degrau e em pulso e mesmo assim os resultados não serem os correctos. Na Secção 5.3.7 é descrita a forma como os resultados obtidos pelo simulador de transporte de massa são validados.

5.3.5 Simplificação da resolução do sistema de equações diferenciais

Para redes com um elevado número de elementos, o número de equações diferenciais a resolver em cada passo de integração é muito elevado. Na Secção 5.3.2 foi descrita uma estratégia que permite reduzir o esforço necessário para resolver o sistema de equações de balanço material, em particular após a imposição da perturbação. Tomando em conta as

características desta e do escoamento na rede é possível reduzir ainda mais o tempo de simulação e o erro cometido, como será descrito nas secções seguintes.

5.3.5.1 Câmaras na linha de topo da rede

As câmaras em que as maiores variações na concentração de traçador se vão verificar, em particular logo após a chegada do traçador, são as que se encontram associadas à entrada de fluido na rede. As câmaras nas linhas a seguir à linha do topo não possuem variações tão acentuadas, devido ao efeito “amortecedor” das câmaras existentes no trajecto entre estas e a entrada da rede.

Quando as perturbações são espacialmente uniformes e com formas simples, como por exemplo perturbações em degrau, impulso e pulso, os valores de concentração de traçador no tempo para as câmaras na linha de topo são determinadas usando expressões analíticas. Estas tomam em conta as possíveis diferenças entre os tempos de passagem (que resultam em diferentes tempos de chegada da perturbação à câmara) nos canais de entrada de fluido na rede. Mesmo quando existem canais horizontais associados às câmaras, esta estratégia pode ser usada no intervalo de tempo entre a chegada do traçador pelos canais oblíquos e pelos canais horizontais. A partir do instante em que o traçador alcança a câmara também pelos canais horizontais, a equação de balanço material na câmara é resolvida sempre numericamente. As expressões teóricas obtidas para algumas perturbações tipo são apresentadas no Apêndice C.6, sendo descritas ainda as respectivas condições de utilização no simulador de transporte de massa.

Para outros tipos de perturbações ou para as câmaras nas linhas a seguir ao topo da rede as equações de balanço material são sempre resolvidas numericamente. Como no caso geral esta estratégia pode não ser aplicável, na determinação do valor mínimo das distribuições de valores de τ_i e τ_j também são considerados os canais oblíquos de entrada de soluto na rede.

5.3.5.2 Redução do número de equações a resolver em alguns tipos de perturbações

Na Secção 5.3.4 foi descrito um tipo de critério de paragem do simulador de transporte de massa baseado na resposta da rede para tempos elevados para alguns tipos de perturbação. Em qualquer dos casos considerados, o comportamento dos elementos da rede vai ser qualitativamente similar à resposta macroscópica da rede, em particular a concentração de traçador no interior das câmaras.

Este comportamento qualitativo foi tomado em conta para reduzir o número de equações de balanço material a resolver em cada um dos passos de integração, em particular para tempos elevados, em que a estratégia descrita na Secção 5.3.4 não é efectiva. Após a chegada do traçador a uma câmara, a diferença entre os valores de concentração de traçador na câmara, normalizada ou não, entre dois passos consecutivos é calculada. Quando esta é menor que um dado valor limite, $F_{\min}$, definido no ficheiro de dados a introduzir no simulador de transporte de massa, a equação de balanço material nessa câmara deixa de ser resolvida, passando o valor de concentração na câmara a ser constante.

Quando as duas estratégias de redução do número de equações diferenciais a resolver simultaneamente são consideradas, observa-se que este possui um máximo que depende das características geométricas e do escoamento na rede. Esta situação é equivalente à definição de uma zona correspondente às equações de balanço material nas câmaras, que se desloca na rede ao longo da simulação do transporte de massa. Na Secção 5.4.1.5 a influência das características de saturação e do valor de $F_{\min}$ são estudadas.

Como já se referiu anteriormente, a utilização desta estratégia requer a definição de um critério adicional de paragem da simulação, a utilizar em conjunto com qualquer dos critérios descritos na Secção 5.3.4. Para tempos suficientemente elevados o número de equações a resolver tende para zero, visto que o comportamento limite é alcançado. Quando deixa de haver equações de balanço material a resolver, o perfil de concentrações nos elementos da rede deixa de sofrer alterações. Nestas condições, como o comportamento em estado estacionário já foi alcançado, não tem significado prosseguir com a simulação, parando esta então.

5.3.6 Estrutura geral do simulador de transporte de massa

Nas secções anteriores foram descritos aspectos fundamentais do modelo proposto neste trabalho para simular o transporte de massa através de uma rede de elementos. Nesta secção é descrita a forma como estes são combinados de modo a permitir a resolução eficiente do sistema de equações de balanço material nas câmaras.

5.3.6.1 Dados necessários e preliminares

No *package* desenvolvido neste trabalho o bloco do simulador do transporte de massa é dependente do gerador da rede e do simulador hidrodinâmico, usando os resultados destes, em

particular as distribuições das dimensões características das câmaras e dos canais e os valores das velocidades nos canais. No entanto, alguns parâmetros específicos do simulador de transporte de massa devem ser considerados, sendo estes listados de seguida.

- As características das perturbações no espaço e no tempo são definidas separadamente. Deste modo, é possível definir perturbações do mesmo tipo mas espacialmente não uniformes. Por exemplo, é possível ter perturbações em degrau mas espacialmente uniformes, pontuais, ou que o traçador só entra na rede através de alguns canais oblíquos, seleccionados pelo utilizador. Os tipos de perturbações definidos explicitamente no simulador de transporte de massa são descritos no Apêndice C.6, incluindo-se nestes perturbações em degrau, impulso e pulso. As características das perturbações podem ser definidas no conjunto de dados fornecido ao simulador de transporte de massa.
- Para perturbações espacialmente uniformes consideraram-se duas hipóteses para os conjuntos de condições fronteira que podem ser aplicados na entrada de fluido na rede. Notar que por perturbação espacialmente uniforme se considera a situação em que o valor de concentração de entrada de traçador na rede definida pela perturbação é independente da posição. Uma assume que a concentração de traçador à entrada é constante, independente da posição do canal de entrada. A outra assume que o fluxo molar de traçador é independente do canal de entrada de fluido. Esta condição fronteira requer o conhecimento da distribuição de caudais do fluido nos canais de entrada para determinar os valores de concentração de traçador correspondente a cada um dos canais de entrada de fluido na rede. Em qualquer dos casos, a quantidade total de traçador que entra na rede e a concentração definida nos dados do problema é a mesma, variando apenas a sua distribuição espacial na entrada da rede. Na Secção 5.4.1.3 a influência das características da perturbação é analisada em detalhe nos valores previstos pelo simulador de transporte de massa. Para perturbações espacialmente não uniformes, a perturbação imposta é definida sempre em termos de concentração de soluto, pois deixa de ter significado definir um fluxo de entrada de traçador na rede.
- O passo de integração, Δt , é uma percentagem, definida pelo utilizador, do valor mínimo dos tempos de passagem nas câmaras e canais da rede. O valor da percentagem a escolher deve ser suficiente para caracterizar adequadamente o comportamento transiente dos elementos da rede. Na Secção 5.4.1.4 é analisada a influência do valor usado de Δt nos

resultados obtidos pelo simulador de transporte de massa, e como as características geométricas e de escoamento na rede interferem no valor ótimo deste parâmetro,

- Os critérios de paragem são seleccionados, tomando em conta a perturbação imposta na rede. Para o critério geral, o múltiplo de τ_G a usar na definição de $t_{\max}$ depende das características das distribuições das dimensões características dos elementos da rede, em particular os valores dos desvio padrão e do número de linhas de câmaras, N_x .

5.3.6.2 Discretização espacial dos canais

Como é descrito na Secção 5.3.3.1, os canais da rede são discretizados no espaço de acordo com o valor do passo de integração a usar no método de Runge-Kutta. Este valor é uma percentagem do valor mínimo das distribuições dos tempos de passagem nos elementos da rede, τ_i e τ_j , tomadas em conta simultaneamente. O valor adequado depende das características geométricas e de escoamento na rede, devendo permitir a descrição adequada do comportamento transiente de todos os elementos da rede. Na Secção 5.4.1.4 a influência deste parâmetro é estudada em detalhe.

Conhecido Δt , o número de incrementos associados ao canal j , N_j^{INC} , é definido por

$$N_j^{INC} = \text{Int} \left(\frac{\tau_j^{\min}}{\Delta t} + 0.5 \right) \quad (5.34)$$

em que $\tau_j^{\min}$ é o mínimo das distribuições dos tempos de passagem nas câmaras e nos canais. Caso a parcela 0.5 não tivesse sido considerada no cálculo do número de elementos da rede o algoritmo estimaria por defeito o número de incrementos associados. Desta forma, em particular em redes com um número elevado de canais, o número de canais com um número de incrementos superior ou inferior ao real é similar, reduzindo o erro cometido ao resolver o sistema de equações de balanço material. A expressão anterior é válida para qualquer canal da rede. No entanto, quando a gama de variação de valores de velocidade é grande, o que se verifica em particular para redes com canais horizontais (ver Secção 5.4.3.4), a distribuição de tempos de passagem é muito larga. Deste modo, Δt será muito baixo, resultando em canais com um número elevado de incrementos, aumentando as necessidades de memória para a simulação e o tempo de simulação necessário para descrever o comportamento da rede.

Este problema pode ser tomado em conta usando as distribuições dos valores de α_j^E das câmaras e dos tempos de passagem nos canais, τ_j . Quando a distribuição de valores de velocidade nos canais é larga, situação que ocorre em particular quando existem canais horizontais, vão existir canais com valores de α_j^E baixos e consequentemente valores de τ_j muito elevados. Verifica-se nesta situação que a influência destes no comportamento da rede é pouco significativa (ver Apêndice C.9). Assim, é possível desprezar a influência destes canais na descrição do comportamento da rede, permitindo a utilização de valores mais elevados de Δt na resolução das equações de balanço material.

Na implementação do modelo os dois aspectos devem ser tomados em conta de formas distintas. Em qualquer deles deve-se definir um critério que determina em que condições o comportamento dos canais devem ser ou não tomados em conta na descrição do transporte de massa na rede de elementos. Em relação à distribuição dos valores de α_j^E é possível definir um valor limite deste parâmetro, α^{lim} , a partir do qual os canais deixam de ser considerados na descrição do comportamento da rede. Para os valores de τ_j , o valor limite deve ser definido tomando em conta as características da distribuição de valores, em particular os valores mais elevados que correspondem a um valor elevado de incrementos nos canais. Além deste aspecto a distribuição dos valores de τ_i deve ser também tomada em conta, visto esta também ser tomada em conta na determinação de Δt e na discretização espacial dos canais.

A estratégia proposta deve tomar em conta que a definição do tempo de passagem global através da rede, Equação 5.33, se baseia no volume dos elementos da rede alcançados pelo traçador. Quando um canal não é tomado em conta na descrição do comportamento da rede, o volume associado a este não pode ser considerado no cálculo de τ_G . No caso mais geral, τ_G é obtido usando a seguinte expressão

$$\tau_G = \frac{V_V^*}{q_T} \quad (5.35)$$

em que V_V^* representa o volume total dos elementos cujo comportamento transiente é descrito pelo simulador de transporte de massa. Na Secção 5.4.3.4 é analisada a validade desta estratégia no comportamento da rede, em função das suas características geométricas e de escoamento.

A actualização dos valores de concentração nos incrementos dos canais depende da resolução das equações de balanço material nas câmaras. O método de Ruge-Kutta usado na sua resolução baseia-se na extrapolação do valor de concentração para o tempo $t^* + \Delta t$, com base nos valores conhecidos para o tempo t^* . Assim, o procedimento de actualização nos canais de saída de fluido das câmaras deve ser feito apenas após determinar os novos valores de concentração nos canais da rede.

Na Figura 5.4 é apresentado o algoritmo geral para descrever o comportamento transiente dos canais. Notar que o fluxograma apresentado corresponde ao bloco de resolução das equações de balanço material das câmaras e actualização dos incrementos espaciais das câmaras, de acordo com o fluxograma geral do simulador de transporte de massa apresentado na Figura 5.2.

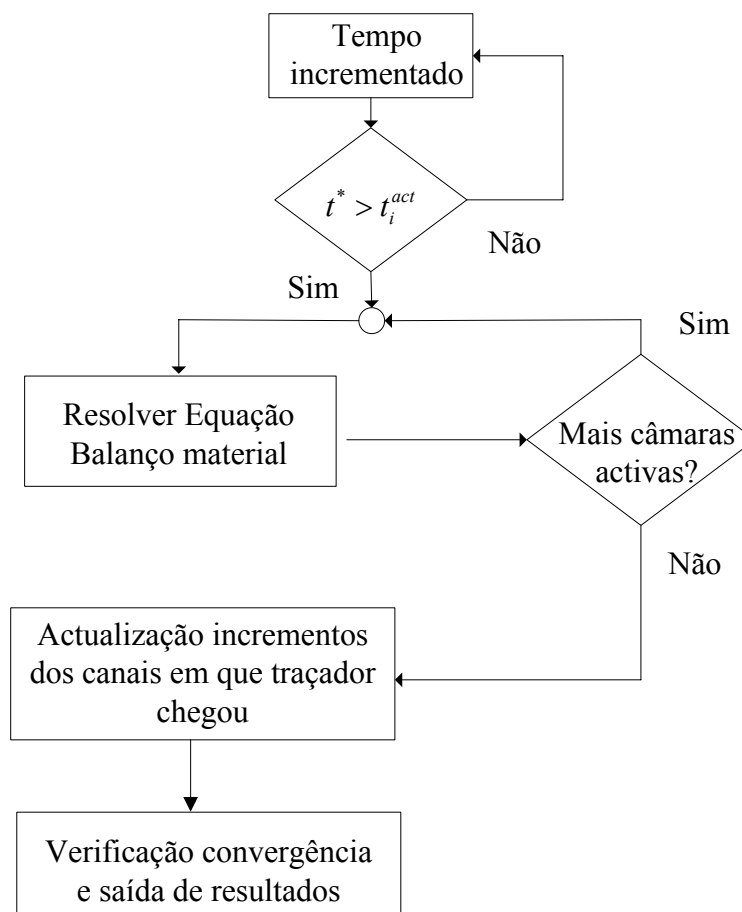


Figura 5.4 Algoritmo de actualização dos valores de concentração de traçador nos canais da rede.

O algoritmo toma em conta os atrasos associados aos canais, visto que em cada incremento do tempo de simulação apenas são consideradas as câmaras nas quais $t^* = t_i^{act}$, significando que

a influência da perturbação de traçador imposta na entrada de fluido da rede já as alcançou. Esta estratégia permite reduzir o esforço necessário na resolução do sistema de equações diferenciais, como foi descrito na Secção 5.3.5.2.

5.3.6.3 Implementação computacional do modelo

As secções anteriores analisaram alguns dos aspectos mais importantes a tomar em conta na aplicação do modelo proposto para descrever o transporte de massa numa rede de elementos. Em particular, prestou-se especial atenção à redução do esforço necessário para resolver o sistema de equações de balanço material.

Na Figura 5.5 é apresentado o fluxograma geral do simulador de transporte. Independentemente das características geométricas da rede, do escoamento e da perturbação imposta na rede, três períodos de simulação podem ser definidos em função do tempo de simulação. Entre a imposição da perturbação e a chegada desta à primeira câmara não é necessário resolver nenhuma equação de balanço material. A partir desse instante, passa a ser necessário resolver equações de balanço material nas câmaras.

O segundo período decorre entre a chegada do traçador à primeira câmara no topo da rede e a primeira saída de traçador da rede. As equações de balanço material nas câmaras são resolvidas de acordo com o tempo de chegada do traçador às câmaras, tomando em conta todos os aspectos referidos nas secções anteriores.

Quando $t \geq t_s$, sendo t_s o tempo mínimo que o soluto necessita para atravessar a rede, passam a ser verificados os critérios de convergência, de acordo com a estratégia descrita na Secção 5.3.4. Neste instante os valores da concentração média de saída de soluto da rede (definida na Secção 5.3.7) são armazenados em ficheiro, para posterior análise dos resultados obtidos. Quando um dos critérios de convergência é verificado, o ficheiro de resultados é fechado, passando-se para a fase de tratamento de resultados. Na Secção 5.3.7 são descritas as estratégias consideradas neste trabalho para tratamento dos resultados e posterior determinação dos parâmetros que caracterizam o transporte de massa na rede de elementos.

A análise de resultados baseada nos valores de concentração média à saída da rede é adequada para caracterizar o comportamento macroscópico da rede. De modo a permitir analisar as características locais da estrutura da rede no comportamento da rede, foi implementada a possibilidade de se guardarem os perfis instantâneos de concentração no interior da rede. Apenas são armazenados os valores de concentração no interior das câmaras, visto serem os

valores obtidos pela resolução das equações de balanço material. Os diferentes perfis instantâneos de concentração podem ser combinados entre si de modo a gerar um filme, em que a evolução no tempo e no espaço do perfil de concentrações pode ser seguido facilmente (ver Apêndice C.2).

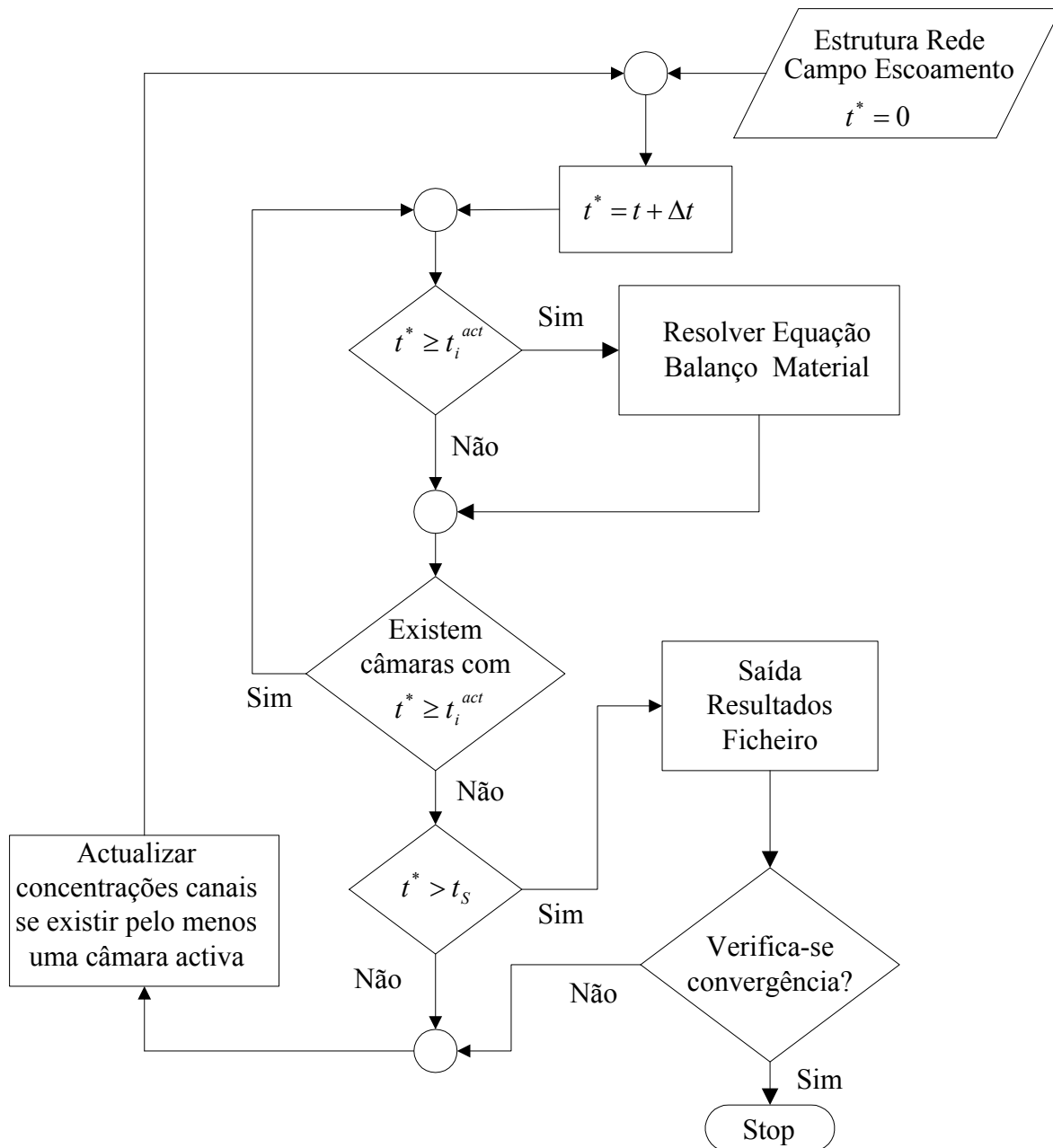


Figura 5.5 Blocos principais do diagrama de fluxo do modelo de transporte de massa, tomando-se em conta o tempo de simulação.

5.3.7 Tratamento e verificação dos resultados obtidos pelo simulador

O tratamento e a verificação dos resultados obtidos pelo simulador de transporte de massa dependem do tipo de perturbação imposta e dos parâmetros que se pretendem calcular. A maior parte dos resultados disponíveis na literatura baseia-se na análise da resposta na saída de

fluido de um meio poroso a uma perturbação de traçador espacialmente uniforme imposta na entrada de fluido no meio poroso, sendo apresentado normalmente o valor do coeficiente de dispersão longitudinal, D_L . Nestas condições, descrever o transporte de massa é semelhante a simular uma experiência de traçador, podendo ser usados critérios disponíveis na literatura para validar os resultados obtidos.

O modelo proposto neste trabalho não requer o conhecimento do valor de D_L para caracterizar o transporte de massa através de um meio poroso. Usando os modelos geométricos e de escoamento propostos nos Capítulos 3 e 4 respectivamente, é possível, a partir das características do meio poroso, usar o modelo proposto neste trabalho para prever os parâmetros que caracterizam o transporte de massa através de um meio poroso sem recorrer a dados experimentais.

Os valores do número de Peclet, Pe , e de D_L são determinados usando a distribuição de tempos de residência, $E(t)$, prevista pelo simulador de transporte de massa, igualando o valor do segundo momento estatístico previsto com a expressão analítica do modelo de dispersão axial (ver Secção 5.3.7.1). Os dois parâmetros referidos permitem descrever o comportamento macroscópico da rede. Como o modelo permite caracterizar o transporte de massa ao nível local, foram propostos outros parâmetros para caracterizar o comportamento da rede, sendo estes descritos em detalhe nas Secções 5.3.7.3 e 5.3.8.

5.3.7.1 Determinação das distribuições de tempos de residência

As distribuições de tempos de residência foram sempre determinadas a partir das respostas a perturbações espacialmente uniformes, em particular a um degrau. Nestas condições, foram usadas quase sempre as equações de balanço material em que a concentração de traçador foi normalizada, o que simplifica o tratamento, pelo que apenas se descreve a estratégia de tratamento de dados para estas condições. Apesar de ser possível usar outros tipos de perturbações para determinar a $E(t)$, o tratamento dos resultados obtidos e a implementação da perturbação para um degrau espacialmente uniforme é bastante mais simples.

De acordo com Danckwerts (1953), a resposta a uma perturbação em degrau designa-se por curva F . Para a rede de elementos, esta pode ser determinada a partir dos valores de concentração de traçador à saída da rede de acordo com a expressão

$$F(t) = \frac{\sum_{j=1}^{N_s} F_{sj}(t) q_{sj}}{\sum_{j=1}^{N_s} q_{sj}} \quad (5.36)$$

em que: N_s representa o número de canais de saída de fluido da rede; $F_{sj}(t)$ é a concentração adimensional de traçador no canal j de saída de fluido da rede, e q_{sj} é o caudal através desse canal. De notar que na expressão anterior os valores de concentração são adimensionalizados por C_0 , valor de concentração igual ao valor constante definido pela perturbação em degrau.

Quando as características da perturbação não permitem a normalização da resposta da rede (ver Secção 5.2), a expressão anterior pode ser aplicada desde que as funções $F_{sj}(t)$ sejam substituídas pelas funções $C_{sj}(t)$, valores de concentração nos canais de saída de fluido da rede, obtendo-se a seguinte expressão equivalente

$$C_M(t) = \frac{\sum_{j=1}^{N_s} C_{sj}(t) q_{sj}}{\sum_{j=1}^{N_s} q_{sj}} \quad (5.37)$$

em que $C_M(t)$ representa a concentração média de saída da rede não normalizada. Para uma perturbação em degrau espacialmente uniforme, as funções $C_M(t)$ e $F(t)$ são equivalentes.

A distribuição de tempos de residência, $E(t)$, pode ser determinada a partir da função $F(t)$,

$$E(t) = \frac{dF(t)}{dt} \quad (5.38)$$

Fazendo a mudança de variável $\Theta = t/\tau_G$, em que τ_G é o tempo de passagem global do fluido através da rede e Θ representa um tempo adimensional, obtém-se a distribuição de tempos de residência adimensional,

$$E(\Theta) = \tau_G E(t) \quad (5.39)$$

Notar que a definição de Θ pode ser aplicada quando a resposta da rede é expressa na forma de $F(t)$ e $C_M(t)$, bastando apenas mudar a escala do tempo. No entanto, como a análise e a determinação dos parâmetros que caracterizam o transporte de massa são mais simples para

perturbações em degrau ou impulso espacialmente uniformes, são estas as situações analisadas mais de perto e utilizadas ao longo dos estudos de transporte de massa.

Para uma perturbação em impulso ou em pulso, a distribuição de tempos de residência é determinada a partir da resposta normalizada no tempo da rede (no caso do impulso corresponde à curva C de Danckwerts)

$$E(\Theta) = \frac{C(\Theta)}{\int_0^{\Theta^*} C(\Theta) d\Theta} \quad (5.40)$$

O integral definido no denominador deve ser calculado para valores de Θ^* suficientemente elevados para assegurar que o valor limite da resposta é o mais próximo possível de zero e que a rede se possa assumir como se encontrando em estado estacionário. A mesma restrição deve também ser tomada em conta ao analisar a resposta a uma perturbação em degrau.

Os momentos da função $E(\Theta)$ são determinados usando as seguintes expressões gerais (Nauman e Buffham, 1983)

$$M_1 = \bar{\Theta} = \int_0^{\Theta^*} \Theta E(\Theta) d\Theta \quad (5.41)$$

$$M_2 = \int_0^{\Theta^*} (\Theta - 1)^2 E(\Theta) dt \quad (5.42)$$

em que Θ^* representa o valor de tempo adimensional até onde a simulação foi efectuada. O valor adequado de Θ^* depende das características geométricas da rede, do escoamento e da perturbação imposta na rede. O primeiro momento é aproximadamente igual a 1. A diferença entre 1 e $\bar{\Theta}$ é uma medida do desvio da idealidade de um reactor em relação aos limites de mistura perfeita (reactor perfeitamente agitado) e segregação total (reactor em escoamento pistão).

O valor do segundo momento estatístico é uma medida dos efeitos da estrutura da rede e do campo de escoamento no transporte de massa. No modelo de dispersão axial, a expressão analítica do segundo momento depende do conjunto de condições fronteira considerado para resolver a equação de balanço material. De acordo com as características do escoamento na

rede, as condições fronteira mais adequadas são fechadas à difusão à entrada e à saída, obtendo-se nestas condições a seguinte expressão para M_2 (Wen e Fan, 1975)

$$M_2 = \frac{2}{Pe} - \frac{2}{Pe^2} [1 - \exp(-Pe)] \quad (5.43)$$

em que Pe é o número de Peclet, definido pela expressão

$$Pe = \frac{v_T L_X}{D_L} \quad (5.44)$$

Igualando os dois valores de M_2 , Pe é obtido resolvendo a equação não linear resultante. Como V_T e L_X podem ser obtidos directamente das características do escoamento e da rede respectivamente, D_L é obtido facilmente.

Na comparação das previsões do modelo com dados experimentais ou correlações publicadas na literatura (em que se usa o modelo geométrico), outras formas de definição do número de Peclet são mais convenientes. Estas serão apresentadas ao longo do capítulo sempre que tal seja necessário. No entanto, o cálculo de D_L baseia-se sempre na definição de Pe feita na Equação 5.44.

5.3.7.2 Validação dos resultados obtidos

Ao contrário da modelização do escoamento, em que a verificação dos critérios de convergência assegura que os resultados são válidos, a verificação dos critérios de paragem na simulação de transporte de massa não assegura a validade dos resultados. Mesmo quando as condições de balanço material são verificadas (ver Secção 5.3.4), os resultados podem ser fisicamente incorrectos.

Esta situação está relacionada com a forma como os tempos de passagem nos elementos da rede são calculados. Os valores de τ_i e τ_j controlam o comportamento transiente da rede, sendo essencial no seu cálculo tomar em conta de uma forma correcta o volume de vazios da rede. Para melhor compreender este problema, assumase que no cálculo de τ_j o volume da calote esférica comum entre as câmaras e os canais não é tomado em conta. Assim, os valores de τ_j vão ser superiores aos valores reais. Como os tempos de passagem nos canais correspondem aos atrasos do escoamento, esta situação vai resultar na deslocação da resposta

para tempos mais elevados. Esta situação ocorre independente da verificação dos critérios de paragem baseados na verificação do balanço material, visto estes dependerem apenas do comportamento transiente das câmaras.

Como a grande maioria dos resultados foram obtidos usando perturbações em degrau espacialmente periódicas, os valores previstos pelo modelo de transporte de massa foram validados usando resultados da teoria da distribuição de tempos de residência (Levenspiel, 1979). Para uma perturbação em degrau espacialmente uniforme, uma resposta típica da rede não normalizada é apresentada na Figura 5.6. Se os resultados da simulação forem correctos, o valor da área a tracejado é igual a $C_0\tau_G$, em que τ_G é o tempo de passagem global do fluido através da rede.

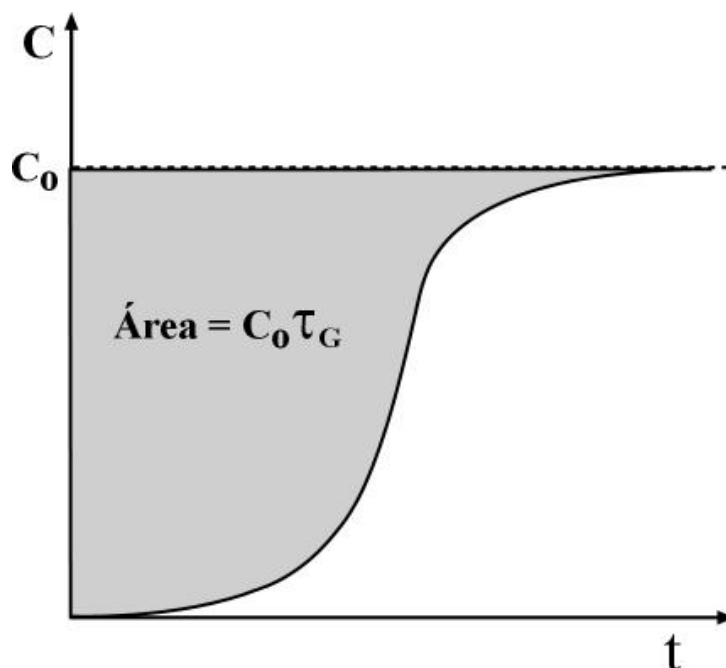


Figura 5.6 Resposta típica do modelo de redes a uma perturbação em degrau espacialmente uniforme, com indicação da área cujo valor é igual a $C_0\tau_G$.

Comparando os valores de τ_G determinados desta forma e com base nas características geométricas e do escoamento na rede de elementos ou na modelização do transporte de massa, quando estes são iguais os resultados da simulação são válidos. Na prática, devido à resolução numérica das equações de balanço material, os valores de τ_G calculados das duas formas não são idênticos mas similares. Neste trabalho, assumiu-se que estes resultados são adequados desde que a diferença percentual entre os dois valores seja inferior a 0.1%.

O critério anterior pode também ser usado com a resposta normalizada na concentração por C_0 e no tempo por τ_G , sendo neste caso a área a tracejado aproximadamente igual a 1. Como os dois critérios são equivalentes, foram usados preferencialmente os resultados obtidos usando os resultados não normalizados. No entanto, outro critério foi utilizado com base na curva F , através da função $E(\Theta)$, determinada da primeira usando a Equação 5.38. De acordo com Levenspiel (1979), a área debaixo da curva deve ser igual a um. Na realidade, o valor é próximo de um, devendo a curva estar aproximadamente “centrada” no valor $\theta = 1$. Qualitativamente, é de se esperar a existência de uma cauda na distribuição de tempos de residência, sendo a importância desta função das características geométricas dos elementos da rede (ver Secção 5.4.4.2).

Para os restantes tipos de perturbações não é possível desenvolver critérios adequados para a verificação dos resultados. No entanto, é possível assumir com segurança que, quando os resultados obtidos com uma perturbação em degrau espacialmente uniforme são válidos, os valores previstos para qualquer tipo de perturbação são válidos também. A validação dos resultados foi usada também durante a implementação do modelo para detectar possíveis erros de programação, e na determinação dos valores dos parâmetros do método numérico que asseguram a validade dos resultados obtidos pelo simulador de transporte de massa (ver Secção 5.4.1.4).

5.3.7.3 Parâmetros qualitativos de caracterização do transporte de massa

Além dos parâmetros descritos na Secção 5.3.7.3, foram considerados mais dois parâmetros que permitem caracterizar outros aspectos dos mecanismos de transporte de massa na rede e das relações existentes com as características geométricas e de escoamento.

Referiu-se anteriormente (ver Secção 5.2.1) que aos diferentes elementos da rede foram associados diferentes mecanismos de transporte de massa. Deste modo, a importância relativa da convecção e dispersão de massa é função das características geométricas dos elementos da rede, através dos respectivos tempos de passagem. De modo a tomar em conta estes efeitos é proposto um parâmetro geométrico, α , definido pela seguinte expressão

$$\alpha = \frac{V_{can}}{V_v} \quad (5.45)$$

em que V_v e V_{can} representam respectivamente o volume total de vazios e o volume de canais respectivamente. O parâmetro α pode variar entre 1, para uma rede sem câmaras, e um valor próximo de zero, quando o diâmetro médio das câmaras é muito superior aos dos canais. Deste modo, para valores de α próximos de 1, os mecanismos convectivos de transporte de massa serão dominantes. Para valores próximos de zero, os mecanismos dispersivos serão dominantes. De notar que quando α tende para 1 não implica que não se dê transporte de massa por mecanismos dispersivos. Mesmo quando o volume das câmaras é nulo, vai existir sempre mistura de traçador nos nós de mistura, devido aos diferentes valores de velocidade nos canais da rede e ao volume de intersecção dos canais nos nós da rede. Apenas os efeitos dispersivos devido à acumulação de massa nas câmaras são desprezáveis. Nesta forma, o parâmetro α representa a importância relativa do transporte de massa por convecção no comportamento da rede.

Na Secção 5.3.8.2 é proposto um parâmetro geométrico adimensional baseado nos valores médios das dimensões características das câmaras e dos canais que formam a rede a partir da análise do comportamento de uma rede uniforme. O estudo das condições em que cada parâmetro é mais adequado para caracterizar a influência das características geométricas da rede no transporte de massa através da rede será efectuado nas Secções 5.3.8.2, 5.4.3 e 5.4.4.

O tempo adimensional de *breakthrough*, Θ_b , é definido como o tempo em que a perturbação de soluto imposta à entrada da rede alcança a saída dividido pelo tempo de passagem global do fluido na rede, τ_G . Quando este valor é comparado com 1 é possível ter também uma ideia da importância relativa dos mecanismos convectivos e dispersivos de transporte de massa na rede. Quanto menor for o seu valor, mais significativo é o transporte de massa por dispersão e a influência da acumulação de massa nas câmaras. Por outro lado, o valor deste parâmetro também é uma medida dos efeitos das características geométricas e do escoamento da rede no transporte de massa, em particular dos valores dos desvios padrão das distribuições das dimensões características das câmaras e dos canais.

5.3.8 Caso particular de rede uniforme

Na Secção 4.4.3 mostrou-se que para uma rede uniforme (com fronteiras periódicas e distribuições pontuais das dimensões características dos elementos da rede) as características do campo de escoamento podem ser determinadas analiticamente. Em particular, mostrou-se que os caudais nos canais oblíquos são todos iguais e nos canais horizontais são nulos. Deste

modo, os tempos de passagem nos canais horizontais são infinitos e, como o transporte de massa por difusão não é tomado em conta, estes não interferem no transporte de massa na rede ao nível macroscópico. Além deste aspecto, os valores de α_j^E são iguais a zero para canais horizontais ou 0.5 para canais oblíquos, sendo independentes da posição da câmara na rede, indicando que os efeitos de mistura numa rede uniforme não dependem das características geométricas da rede. A influência destes canais apenas se vai sentir nos valores previstos do coeficiente de dispersão longitudinal, mas não no número de Peclet.

De acordo com as características geométricas e do escoamento numa rede uniforme, os valores de τ_i e τ_j não dependem da posição dos elementos na rede. Assim, o tempo de chegada do traçador da entrada até uma câmara qualquer da rede é independente do trajecto das partículas da entrada de fluido até esta câmara. Basta então descrever a evolução da concentração de traçador para um dos trajectos possíveis para caracterizar completamente a resposta da rede. Deste modo, o comportamento de uma rede de câmaras e canais é equivalente a uma rede de câmaras e canais em série, como se pode observar na Figura 5.7 para uma rede 4×4.

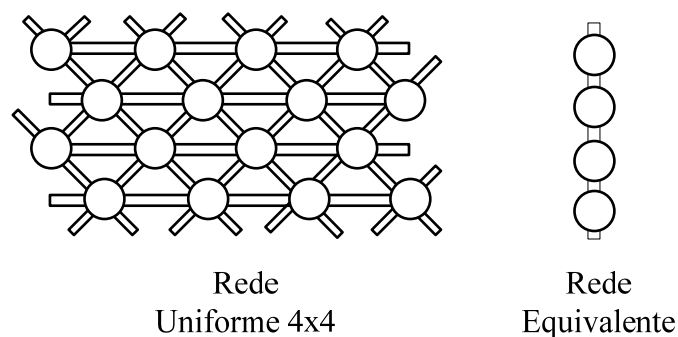


Figura 5.7 Rede uniforme 4×4 e rede equivalente a usar na descrição do transporte de massa.

A analogia é válida desde que a perturbação de soluto imposta à entrada da rede seja espacialmente uniforme. Para perturbações espacialmente não uniformes a resposta de qualquer câmara da rede depende do percurso entre esta e a entrada de soluto na rede, pelo que deve-se considerar a posição das suas câmaras. Por outro lado, a definição de fronteiras periódicas implica que para perturbações pontuais ou locais o soluto pode atravessar o lado da fronteira e surgir do lado oposto, situação fisicamente impossível. Como os caudais nos canais oblíquos de entrada de fluido na rede são todos iguais, as duas possibilidades para as condições fronteira à entrada da rede são equivalentes, de acordo com o análogo apresentado na Figura 5.7.

A analogia apresentada na Figura 5.7 é válida desde que os tempos de passagem dos elementos da rede equivalente sejam iguais aos da rede uniforme. Deste modo, os canais da rede equivalente possuem um tempo de passagem igual a τ_j . O tempo de passagem das câmaras deve tomar em conta que existem sempre dois canais oblíquos associados a uma câmara na rede uniforme. Assim, o tempo de passagem nas câmaras da rede uniforme, τ_i^* é dado pela expressão

$$\tau_i^* = \frac{V_i}{2q_j} \quad (5.46)$$

De acordo com a expressão anterior as câmaras da rede equivalente possuem um volume igual a metade do volume das câmaras da rede uniforme, para que os dois tipos de elementos possuam o mesmo comportamento dinâmico. Assim, uma forma de relacionar as redes uniformes e equivalente é definir um diâmetro equivalente para as câmaras da rede equivalente (ver Apêndice C.3).

5.3.8.1 Determinação da distribuição de tempos de residência para uma rede uniforme

Como se assume que não ocorre reacção química ou transferência de massa entre fases, o comportamento dos elementos da rede é descrito por equações lineares. Nestas condições, é possível usar a Transformada de Laplace nas equações de balanço material e obter a função de transferência da rede, e a partir desta caracterizar o comportamento da rede.

A rede equivalente (ver Figura 5.7) é um sistema de câmaras e canais em série. Nestas condições, a função de transferência para uma rede uniforme com N_x linhas é escrita na forma

$$G(s) = \left(\frac{1}{1 + \tau_i^* s} \right)^{N_x} \exp[-(N_x + 1)\tau_j s] \quad (5.47)$$

Invertendo a função de transferência obtém-se a $E(t)$ da rede uniforme

$$E(t) = \begin{cases} 0 & t < (N_x + 1)\tau_j \\ \frac{[t - (N_x + 1)\tau_j]^{N_x - 1}}{(N_x - 1)!(\tau_i^*)^{N_x}} \exp\left[-\frac{t - (N_x + 1)\tau_j}{\tau_i^*}\right] & t \geq (N_x + 1)\tau_j \end{cases} \quad (5.48)$$

A função $E(\Theta)$ pode ser obtida facilmente da Equação 5.48

$$E(\Theta) = \begin{cases} 0 & \Theta < \Theta_B \\ \beta^{N_x} \frac{[\Theta - \Theta_B]^{N_x-1}}{(N_x-1)!} \exp[-\beta(\Theta - \Theta_B)] & \Theta \geq \Theta_B \end{cases} \quad (5.49)$$

em que $\beta = \tau_G / \tau_i^*$ e Θ_B é o tempo adimensional de *breakthrough* do traçador da rede. Este parâmetro pode ser determinado tomando em conta as características geométricas e de escoamento na rede uniforme. Como os canais se encontram em série, a resposta a uma perturbação de soluto vai estar atrasada $(N_x + 1)\tau_j$ em relação à perturbação. A influência das características da rede, em particular os valores médios das dimensões características dos elementos da rede é efectuada na Secção 5.3.8.3.

5.3.8.2 Determinação dos parâmetros que caracterizam a resposta de uma rede uniforme

De acordo com a definição de Θ_B (ver Secção 5.3.7.3), para uma rede uniforme este parâmetro pode ser expresso na forma

$$\Theta_B = \frac{(N_x + 1)\tau_j}{\tau_G} \quad (5.50)$$

Para a rede equivalente a uma rede uniforme (ver Figura 5.7) e tomando em conta que $\tau_G = (N_x + 1)\tau_j + N_x\tau_i^*$ (ver Apêndice C.3), é possível exprimir Θ_B na seguinte forma geral

$$\Theta_B = 1 - \frac{1}{1 + \frac{N_x + 1}{N_x} \frac{\tau_j}{\tau_i^*}} \quad (5.51)$$

A expressão anterior é válida independentemente de se considerar ou não o volume de vazios associado às calotes formadas pelas ligações entre as câmaras e os canais da rede. Para uma rede em que o volume das calotes não é tomado em conta, a expressão anterior simplifica-se

$$\Theta_B = 1 - \frac{1}{1 + \frac{N_x + 1}{N_x} \frac{3d^2l}{D^3} \frac{\tau_j}{\tau_i^*}} = \frac{3d^2l}{D^3} \frac{\tau_j}{\tau_i^*} \quad (5.52)$$

No entanto, na descrição do transporte de massa no modelo de redes deve-se tomar em conta explicitamente o volume das calotes formadas pelas ligações entre as câmaras e os canais (ver Secção 3.4.5). De acordo com a analogia entre as redes uniforme e equivalente (ver Figura 5.7), é necessário tomar em conta que existem dois tipos de canais. Em particular, os canais

de entrada e saída de fluido da rede equivalente uma calote associada e os restantes canais dois canais associados. Associando o volume das calotes ao volume dos canais (significa que a correcção no volume de vazios é efectuada nos canais), a razão τ_j/τ_i^* é dada por

$$\frac{\tau_j}{\tau_i^*} = \frac{3d^2l}{D^3} - 2K_{N_x} \frac{V_{cal}}{V_i} \quad (5.53)$$

em que K_{N_x} é função apenas de N_x . Este toma em conta o diferente número de calotes associadas aos canais da rede equivalente, sendo dado pela seguinte expressão

$$K_{N_x} = 1 - \frac{1}{N_x + 1} \quad (5.54)$$

Para redes grandes K_{N_x} tende para a unidade, visto que o número de canais com duas calotes associadas é muito superior ao número de canais com apenas uma calote associada. A dedução das duas expressões anteriores é efectuada em detalhe no Apêndice C.4.

Nestas condições, a razão τ_j/τ_i^* é dada na pela expressão

$$\frac{\tau_j}{\tau_i^*} = \frac{3d^2l}{D^3} - K_{N_x} \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{d}{D}\right)^2} \right]^2 \left[1 + 0.5 \sqrt{1 - \left(\frac{d}{D}\right)^2} \right] \quad (5.55)$$

Substituindo a equação anterior na expressão geral de Θ_B , Equação 5.51, obtém-se

$$\Theta_B = 1 - \frac{1}{1 + \frac{N_x + 1}{N_x} \left\{ \frac{3d^2l}{D^3} - K_{N_x} \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{d}{D}\right)^2} \right]^2 \left[1 + 0.5 \sqrt{1 - \left(\frac{d}{D}\right)^2} \right] \right\}} \quad (5.56)$$

A inclusão explícita do volume das calotes traduz-se na inclusão de um termo correctivo adicional na expressão de Θ_B . Quando $d \ll D$, este termo é desprezável, pois o volume das calotes é desprezável. Apenas para redes pequenas ou quando $d \approx D$ é que se esperam efeitos significativos. No entanto, a análise do comportamento de redes uniformes usando o parâmetro τ_j/τ_i^* é independente de se ter tomado em conta ou não o volume associado às calotes. Apenas a restrição $D > d$ é que poderá ser significativa, como se verá mais à frente.

As expressões anteriores de Θ_B mostram que para uma rede uniforme este parâmetro é função dos valores médios das dimensões características dos elementos da rede e das dimensões segundo o sentido principal do escoamento. A largura da rede não é significativa no comportamento previsto da rede, de acordo com as hipóteses impostas para o escoamento numa rede uniforme. Para valores elevados de N_x , a razão entre o número de filas segundo o sentido principal de escoamento tende para 1, sendo a influência das dimensões da rede pequena. O parâmetro τ_j/τ_i^* é equivalente à razão entre os volumes de vazios das câmaras e dos canais da rede equivalente, representando este parâmetro uma medida directa da importância relativa dos mecanismos de transporte de massa por convecção e por dispersão na rede.

Na Figura 5.8 são apresentados os valores previstos de Θ_B em função da razão τ_j/τ_i^* para redes uniformes para diferentes valores de N_x : 5, 10, 100, 500 e 1000. Observa-se que a influência de N_x é pouco significativa, em particular se $N_x > 100$. Para redes com valores elevados de N_x , a razão $N_x + 1/N_x$ tende para 1, permitindo concluir que é o valor da razão τ_j/τ_i^* o parâmetro mais significativo no valor de Θ_B .

Para valores elevados τ_j/τ_i^* , a que corresponde a situação $\tau_j \gg \tau_i$, Θ_B tende para um. Nestas condições, o volume dos canais é muito superior ao volume das câmaras, o que se traduz no domínio dos mecanismos convectivos de transporte de massa. Assim, o comportamento da rede vai-se aproximar ao comportamento de um conjunto de $N_x + 1$ reactores pistão em série, equivalente a ter $\Theta_B \approx 1$, de acordo com a Equação 5.50.

Os valores de τ_j/τ_i^* e Θ_B são proporcionais quando τ_j/τ_i^* toma valores muito baixos. Nestas condições, o volume de vazios associado às câmaras é muito superior ao volume dos canais, não sendo significativo o atraso induzido pelos canais da rede. Sendo assim, a influência da perturbação faz-se sentir na saída da rede quase a seguir à imposição desta, sendo os efeitos dispersivos dominantes nessas condições.

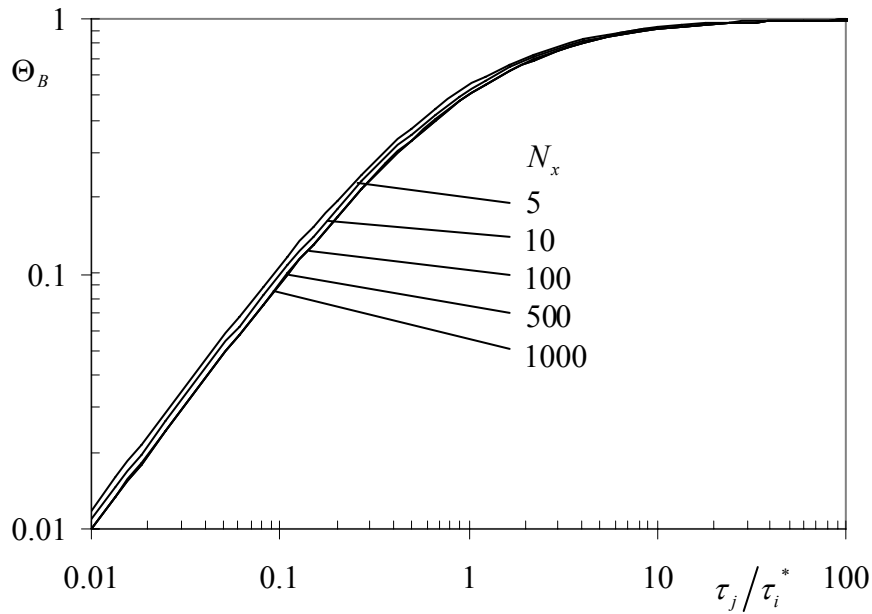


Figura 5.8 Valores de Θ_B previstos em função da razão τ_j/τ_i^* , para vários valores de N_x .

Os momentos estatísticos da $E(\Theta)$ podem também ser obtidos a partir da função de transferência, Equação 5.47, usando o teorema de Van der Laan (Nauman e Buffham, 1983)

$$M_1 = 1 \quad (5.57)$$

$$M_2 = \frac{1}{N_x} \left(\frac{1}{1 + \frac{N_x + 1}{N_x} \frac{\tau_j}{\tau_i^*}} \right)^2 \quad (5.58)$$

Comparando a Equação 5.58 com a Equação 5.52, verifica-se a existência de um termo comum, na forma

$$\gamma = \frac{N_x + 1}{N_x} \frac{\tau_j}{\tau_i^*} \quad (5.59)$$

Este parâmetro inclui a influência das dimensões da rede e dos valores médios das dimensões características das câmaras e dos canais. Como os tempos de passagem são definidos em termos dos volumes dos elementos da rede e do caudal volumétrico de fluido através destes, γ é formalmente idêntico ao parâmetro α , definido pela Equação 5.45. Deste modo, valores elevados de α próximos de 1 correspondem a valores elevados de γ e valores de α

próximos de 0 correspondem a valores baixos de γ . No entanto, o parâmetro α toma em conta as distribuições das dimensões características dos elementos da rede, sendo aplicável quaisquer que sejam as características geométricas da rede. O parâmetro γ é estritamente válido para redes uniformes mas pode ser uma medida da importância relativa dos diferentes mecanismos de transporte de massa e dos efeitos de mistura devido à não uniformidade da estrutura da rede (ver Secção 5.4.3). Deste modo, γ é um parâmetro adimensional análogo a um número de Peclet modificado, visto que a convecção e a difusão são atribuídos a elementos da rede e a razão dos volumes dos canais e das câmaras é então a medida da importância relativa dos dois mecanismos de transporte de massa.

As expressões da razão τ_j/τ_i^* para os casos em que as calotes não são tomadas em conta ou consideradas na escrita do balanço dos volumes encontram-se nas Equações 5.52 e 5.56 respectivamente. A definição de γ é independente do volume das calotes ser tomado em conta ou não. Este facto deve ser tomado em conta no seu cálculo, mas o comportamento qualitativo do modelo em função de γ pode ser determinado sem tomar em conta este aspecto. Usando este parâmetro adimensional, Θ_B e M_2 são expressos pelas seguintes expressões gerais

$$\Theta_B = 1 - \frac{1}{1 + \gamma} \quad (5.60)$$

$$M_2 = \frac{1}{N_x} \left(\frac{1}{1 + \gamma} \right)^2 \quad (5.61)$$

Igualando as Equações 5.43 e 5.58 é possível obter Pe correspondente a uma rede uniforme. O valor de D_L pode ser obtido a partir da definição de Pe , Equação 5.44, visto que a velocidade superficial do fluido através da rede e o comprimento da rede segundo a direcção principal de escoamento são determinados respectivamente pelo simulador hidrodinâmico (ver Secção 4.4.3) e gerador da rede (ver Capítulo 3).

A constante β usada na definição de $E(\Theta)$ para rede uniforme, Equação 5.49, pode ser também expressa usando a definição de γ , obtendo-se a seguinte expressão geral

$$\beta = N_x(1 + \gamma) \quad (5.62)$$

Se $Pe > 5$, o termo exponencial da Equação 5.43 é desprezável com um erro inferior a 0.1%. Nestas condições Pe é obtido resolvendo uma equação quadrática, sendo a solução fisicamente válida expressa na forma

$$Pe = \frac{1 + \sqrt{1 - 2M_2}}{M_2} = N_x(1 + \gamma) \left[1 + \gamma + \sqrt{(1 + \gamma)^2 - \frac{2}{N_x}} \right] \quad (5.63)$$

Para valores de N_x elevados (superiores a 100), M_2 tende para zero. Nestas condições, a expressão anterior simplifica-se, obtendo-se a seguinte expressão

$$Pe = 2N_x(1 + \gamma)^2 \quad (5.64)$$

Nas condições de aplicabilidade da expressão anterior, os valores de γ são independentes de N_x , sendo então Pe função apenas de τ_j/τ_i^* . Na Figura 5.9 é apresentado o erro em percentagem cometido ao estimar Pe usando as Equações 5.63 e 5.64 em coordenadas logarítmicas para diferentes valores de γ . Como era de esperar, o erro cometido é maior para a aproximação linear do que para a aproximação quadrática, nunca sendo superior a 10 % em todos os casos estudados.

Observa-se que quanto maiores forem os valores de N_x e de γ , menor é o erro cometido na aproximação. Se γ for fixado, M_2 é tanto menor quanto maior for N_x . Para a gama de valores de γ e N_x considerada na Figura 5.9, a expressão quadrática pode ser usada desde que $N_x > 50$.

Para valores elevados de N_x , ou quando γ é elevado, Pe é uma função linear de N_x . Comparando a Equação 5.64 com a expressão limite obtida para um conjunto de reactores perfeitamente agitados (Fogler, 1992), verifica-se que inclui um termo adicional, que toma em conta a existência de dois tipos de elementos na rede equivalente. De acordo com a definição de γ e tomando em contas as expressões obtidas para τ_j/τ_i^* , valores elevados deste parâmetro correspondem a tempos de passagem dos canais mais elevados que os das câmaras e a volume de vazios associado aos canais superior aos das câmaras. Nestas condições, o transporte de massa na rede dá-se principalmente por convecção e $\Theta_B \approx 1$, visto este caso aproximar-se do caso limite de um reactor pistão.

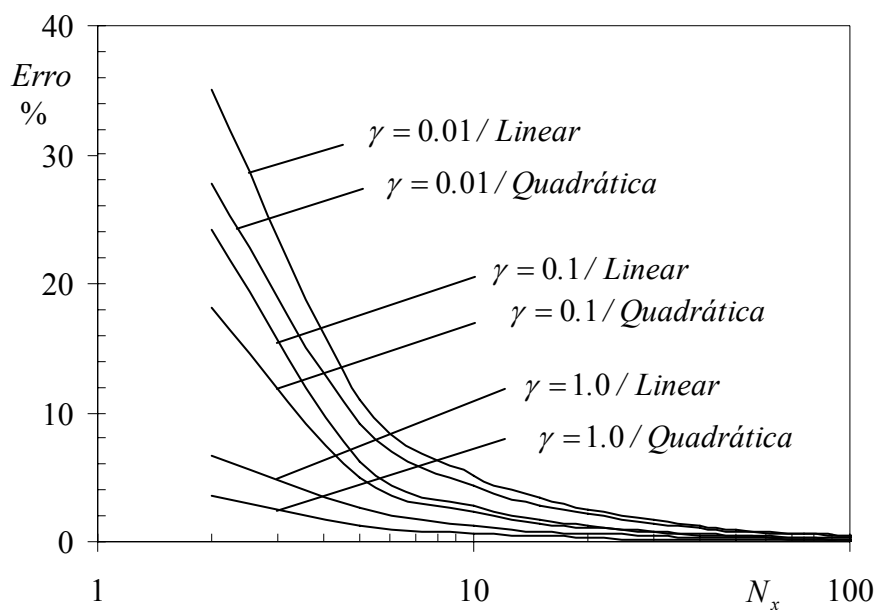


Figura 5.9 Erro percentual cometido ao estimar o valor de Pe em função de N_x usando as Equações 5.63 e 5.64.

Na Figura 5.10 são comparados os valores de Pe previstos para uma rede uniforme em função de γ , para diferentes valores de N_x , em coordenadas logarítmicas. Independentemente de N_x , observa-se comportamentos limite distintos para os valores limite de γ . Para valores baixos de γ , o tempo de passagem nas câmaras é muito superior ao dos canais, sendo a resposta da rede controlada pelas câmaras, ou seja, pelos mecanismos dispersivos de transporte de massa. De acordo com a Equação 5.61, nestas condições M_2 é função apenas de N_x , tendendo para um valor constante.

Para valores elevados de γ , os mecanismos de transporte de massa por convecção são dominantes, resultando em valores elevados do número de Peclet. A aproximação linear definida pela Equação 5.64 é válida, prevendo um declive igual a dois na zona linear, o que se verifica graficamente.

Tomando em conta a definição de Pe , Equação 5.44, e assumindo que N_x é grande, é possível mostrar que D_L é uma função linear da velocidade superficial equivalente através da rede, dada pela expressão

$$D_L = \frac{L_x}{2N_x(1+\gamma)^2} v_T \quad (5.65)$$

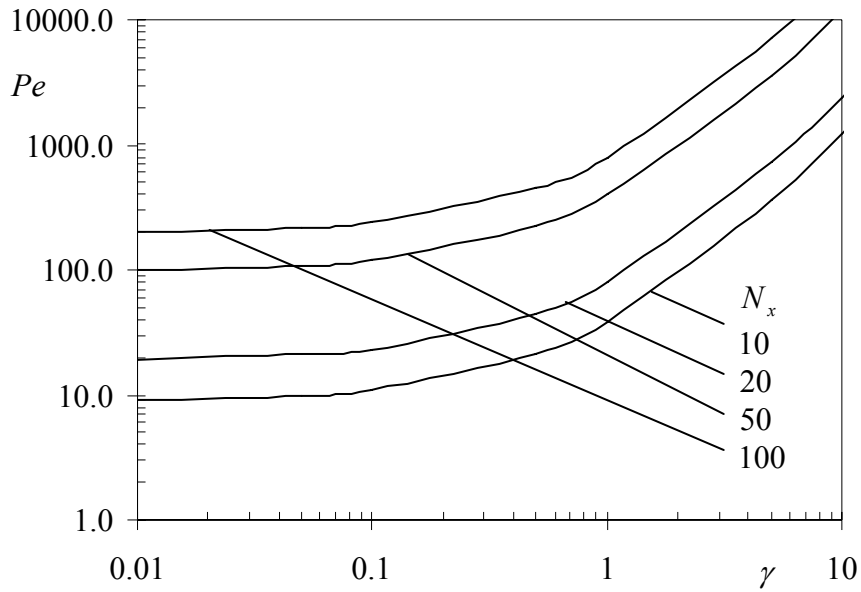


Figura 5.10 Valores de Pe previstos para a rede uniforme em função de γ para diferentes valores de N_x .

Como uma rede uniforme é análoga a um modelo de tanques agitados em série, a expressão prevê que D_L varia linearmente com v_T . A mesma conclusão é obtida para o modelo de tanques agitados no qual a influência dos atrasos não é tomada em conta. O comprimento da rede pode ser expresso na forma geral por $L_x = (N_x + 1)(l + D - 2h)\cos\theta$. Substituindo a expressão anterior obtém-se

$$D_L = \frac{N_x + 1}{N_x} \frac{(l + D - 2h)\cos\theta}{2(1 + \gamma)^2} v_T \quad (5.66)$$

A relação típica é verificada experimentalmente quando a convecção é o mecanismo principal de transporte de massa (Dullien, 1992), indicando que na sua forma actual o modelo de redes é válido nessas condições. Esta questão será analisada em detalhe na Secção 5.4.2.1.

5.3.8.3 Análise do comportamento de uma rede uniforme

Em relação a uma rede real, em que existe uma distribuição de valores de velocidade nos canais, não existem numa rede uniforme os efeitos de mistura devidos aos diferentes tempos de chegada do traçador às câmaras. A dispersão de massa numa rede uniforme deve-se apenas ao comportamento transiente das câmaras. Esta característica permite diferenciar entre os efeitos da mistura derivados da existência de uma distribuição de velocidades de fluido nos canais da rede e do comportamento transiente das câmaras. Em particular, neste trabalho são

definidos dois grupos adimensionais, Pe^* e Θ_B^* , definidos como sendo a razão entre os valores previstos pelo simulador de transporte de massa e para uma rede uniforme para redes com as mesmas características geométricas. Ambos os parâmetros permitem caracterizar a influência das características geométricas da rede, campo de escoamento e possíveis efeitos de entrada e dimensões da rede, como se vai ver nas Secção 5.4 e subsecções inclusas.

Para uma rede sem câmaras, $D_i = 0$, uma rede uniforme comporta-se como uma sequência de reactores pistão em série. A mistura de fluido nos nós de mistura (equivalentes às câmaras) não altera a forma da resposta, visto que em cada instante as concentrações de soluto à saída dos canais associados num nó da rede são sempre iguais. A resposta da rede é igual à perturbação imposta à entrada da rede, com um atraso igual a $(N_x + 1)\tau_j$, com $\Theta_B = 1$ e $\gamma \rightarrow \infty$. Quando existem câmaras na rede, as respostas da rede são diferentes e dependentes das dimensões da rede e das dimensões características dos seus elementos. No entanto, como $d_j < D_i$ para as câmaras e canais associados entre si, vai existir sempre alguma mistura na rede, não se alcançando o caso limite da resposta para $D_i = 0$. Estas questões são analisadas em detalhe nas Secções 5.4.3.1 e 5.4.4.1.

Numa rede uniforme os canais horizontais não influenciam o escoamento nem o transporte de massa através da rede. Deste modo, o valor do número de Peclet não é influenciado pela existência ou não de canais horizontais, influenciando estes apenas os valores dos parâmetros macroscópicos que caracterizam o comportamento da rede. Este é o caso de D_L , de acordo com a definição de Pe .

Nas secções anteriores mostrou-se que o comportamento de uma rede uniforme era função de γ . Este parâmetro é função sobretudo dos valores médios das dimensões características dos elementos da rede, sendo a influência de N_x pouco significativa. No entanto, de acordo com a Equação 5.64, Pe é uma função linear de N_x . Com o objectivo de esclarecer a natureza da influência de γ em função de N_x , foram determinadas as curvas da função $E(\Theta)$ em função de γ para dois valores de N_x : 10 e 30. As curvas obtidas são comparadas na Figura 5.11. Observa-se que quanto maior γ mais marcado é o carácter Gaussiano da resposta, no sentido em que as curvas se tornam mais simétricas em torno de $\Theta = 1$, e menor a dispersão em torno do valor médio. É possível concluir que a importância dos mecanismos de transporte de

massa convectivos é tanto mais marcada quando maior for γ , como já se tinha concluído anteriormente.

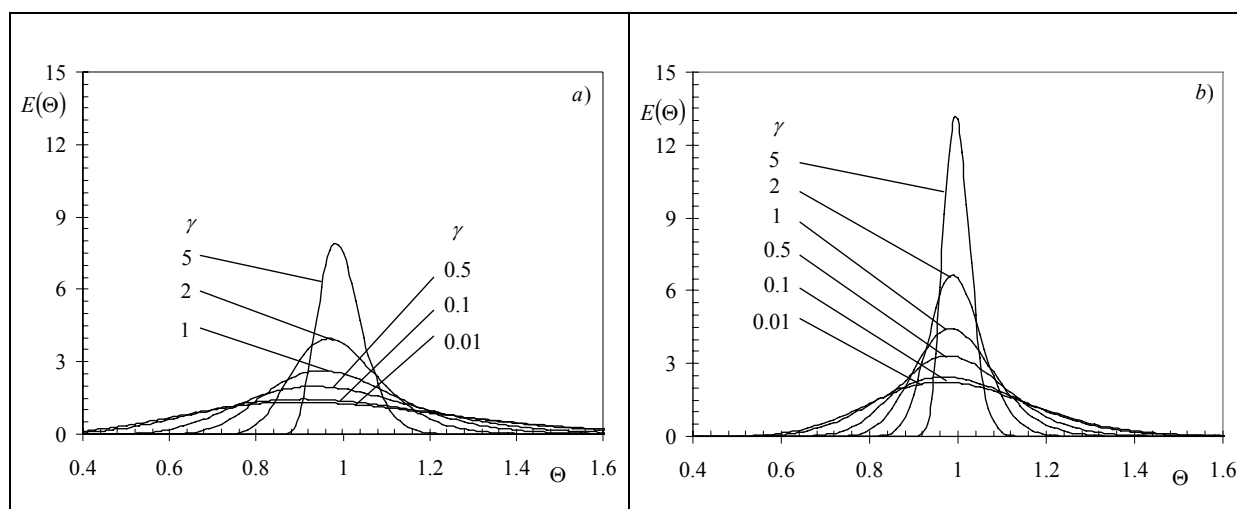


Figura 5.11 Curvas da distribuição de tempos de residência adimensional em função de γ , para: a) $N_x = 10$; b) $N_x = 30$.

Para igual valor de γ , aumentar N_x resulta em distribuições de tempos de residência adimensional com menores valores de desvio padrão, a que correspondem Pe mais elevados. Este comportamento era esperado e é idêntico ao observado no modelo de tanques em série, em que os atrasos não são tomados em conta (Fogler, 1992). No entanto, comparando as curvas de $E(\Theta)$ para o mesmo valor de N_x , observa-se o mesmo comportamento qualitativo nas duas figuras. Deste modo, a inclusão dos atrasos associados aos canais de ligação das câmaras da rede equivalente resulta em comportamentos da rede de elementos não previstos caso os atrasos associados aos canais não sejam tomados em conta.

Apesar de para uma rede real, em que as distribuições das dimensões características dos elementos da rede não são pontuais, terem de ser tomados em conta os efeitos dos diferentes valores de velocidade nos canais e o comportamento transiente das câmaras distinto, os resultados anteriores mostram que o comportamento qualitativo pode ser controlado variando os valores relativos dos diâmetros médios das câmaras e dos canais e o comprimento dos canais. Este aspecto pode ser decisivo no projecto de unidades envolvendo leitos de enchimento e em que o desempenho da unidade dependa do transporte de massa no seu interior.

A análise efectuada não toma em conta as restrições entre os valores de d_j e D_i dos canais e das câmaras associados entre si, em particular a condição $d_j < D_i$. Esta restrição restringe

apenas a gama de valores possíveis de τ_j/τ_i^* para o conjunto de valores de D , d e l_0 usados para caracterizar os elementos da rede, continuando as conclusões obtidas a ser válidas. Como a utilização do modelo usado neste trabalho implica a verificação necessariamente da restrição $d_j < D_i$, não é relevante determinar a gama de valores possíveis de τ_j/τ_i^* , visto esta condição ter sido incluída directamente pelo gerador da rede antes de se efectuar a simulação do transporte de massa.

5.4 Análise de sensibilidade

Como no Capítulo 4, a influência das características geométricas da rede e do escoamento (visto que o transporte de massa é dependente do comportamento hidrodinâmico da rede) nos valores previstos pelo simulador de transporte de massa vai agora ser analisada. No entanto, ao contrário da estratégia seguida no Capítulo 4, não foram determinadas as condições que asseguram que os resultados obtidos são estatisticamente válidos, tendo-se assumido que os critérios de validade dos resultados previstos pelo simulador hidrodinâmico são aplicáveis ao simulador de transporte de massa.

A razão principal é a diferença entre os recursos computacionais necessários para descrever o transporte de massa na rede de elementos, muito superiores aos necessários para a descrição do escoamento. Este aspecto é de particular importância para a situação em que existem canais horizontais na rede. Os caudais volumétricos nestes canais são muito inferiores aos observados nos canais oblíquos, resultando em valores do tempo de passagem mais elevados. Apesar deste aspecto ter sido tomado em conta pelo algoritmo implementado para a resolução do sistema de equações de balanço material implementado neste trabalho, o algoritmo ainda está limitado à simulação de redes com um número pequeno de elementos, caso existam canais horizontais. Por este motivo foram consideradas quase sempre nas secções seguintes redes sem canais horizontais, essencialmente por razões computacionais.

Por outro lado, de acordo com os resultados apresentados na Secção 5.3.8.3, para redes com um número elevado de elementos ou quando γ é elevado, correspondendo a valores elevados da razão d/D e domínio dos mecanismos de transporte de massa convectivos, os valores previstos pelo simulador de transporte de massa não devem ser sensíveis a variações nos parâmetros das distribuições das dimensões características dos elementos da rede. Assim, a influência das características geométricas, do escoamento e do tipo de condições fronteira

implementadas é mais visível para redes com um número pequeno de elementos. Apesar de os resultados obtidos nestas não serem estatisticamente significativos, o comportamento qualitativo é o mesmo. A mesma situação já foi observada no Capítulo 4, em que o comportamento limite dos parâmetros do escoamento poderia ser obtido a partir dos resultados obtidos em redes com um número de elementos inferior ao que assegura resultados estatisticamente significativos.

Para simplificar a análise de sensibilidade do simulador hidrodinâmico, esta foi dividida em quatro partes. Na Secção 5.4.1 é analisada a influência dos parâmetros do modelo de redes implementado para descrever o transporte de massa, em particular o tipo de condições fronteira e o passo de integração. Na Secção 5.4.2 é estudada a influência das características de escoamento no comportamento previsto pelo modelo de redes. Na Secção 5.4.3 é analisada a influência das características geométricas da rede, em particular o número total de elementos, tipo de fronteiras e influência da distribuição das dimensões características e dos números de coordenação na rede. Na Secção 5.4.4 é estudada a influência dos parâmetros das distribuições das dimensões características da rede, em particular a razão entre o diâmetro médio dos diâmetros das câmaras e dos canais e dos valores dos seus desvios padrão.

A grande maioria das simulações de transporte de massa efectuadas usou um conjunto de parâmetros e condições para a geração da rede e de escoamento comuns. Assim, para evitar a sua repetição na apresentação de resultados, estes não são apresentados. Qualquer valor diferente é sempre referido explicitamente na apresentação de resultados.

Em todas as simulações usou-se $\varepsilon = 0.4$ e $\theta = \pi/4$ na geração da rede. A influência destes parâmetros é analisada em detalhe na Secção 5.4.3.5, em que é justificada a utilização destes valores. Por outro lado, de acordo com as conclusões do modelo geométrico e da sua utilização na comparação de dados experimentais, apenas foi tomada em conta a restrição $d_j < D_i$ em todos os resultados apresentados nas Secções 5.4.1 a 5.4.4. A geração da rede foi também efectuada em todos os casos sem remoção de câmaras e/ou canais, resultando em distribuições uniformes dos números de coordenação das câmaras da rede. Assim, em nenhuma das descrições das condições de simulação são apresentados os valores de ε e θ , assim como a restrição imposta entre os diâmetros das câmaras e dos canais associados entre si e a remoção de câmaras e/ou canais.

Foram também considerados em grande parte das simulações $l = 0.007m$, $D = 0.004m$, fronteiras periódicas e redes sem canais horizontais, correspondentes a redes tipo 10. A

análise da influência destas restrições é efectuada nas Secções 5.4.3.2, 5.4.3.4, 5.4.4.1 e 5.4.4.3. Em relação ao diâmetro médio das câmaras, quando é analisada a influência da razão d/D é assumido que $D = 0.004$ mantendo-se este valor constante, variando d . Apesar dos valores médios de D e d influenciarem as características do transporte de massa através da rede de elementos, como se conclui na Secção 5.3.8.3, as variações de d deverão ser mais pronunciadas visto serem os canais que controlam o escoamento, em particular o valor do seu diâmetro.

Em relação às características do escoamento, todos os resultados apresentados na Secção 5.4 e subsecções inclusas foram obtidos usando o modelo ICAM para a determinação da resistência dos ramos da rede ao escoamento, não sendo portanto a indicação explícita no texto. O modelo ICAM requer a definição do valor do parâmetro $\sum K_j$, tendo-se usado na maior parte dos resultados apresentados $\sum K_j = 1.5$. Além deste parâmetro, assumiu-se em grande parte das simulações $\Delta P_T = 10000 \text{ Pa}$. Na Secção 5.4.2 a influência dos valores de $\sum K_j$ e ΔP_T é analisada em detalhe, justificando-se a utilização do valor usado para o segundo parâmetro.

Também na descrição do transporte de massa a maior parte das simulações foram efectuadas para o mesmo conjunto de condições. Em particular, consideraram-se quase sempre perturbações em degrau espacialmente uniformes com $C_p = 1$, em que C_p é o valor limite da perturbação para tempos elevados, por duas razões. Primeiro, a implementação deste tipo de perturbações no modelo é fácil e do ponto de vista físico mais correcta, visto ser imposta logo após o arranque da simulação. Segundo, é possível usar mais do que um critério de paragem do simulador, tendo em conta a resposta da rede para tempos elevados (ver Secção 5.3.4) e a possibilidade de se verificar o balanço material e a validade dos resultados obtidos (ver Secção 5.3.7.2). Nas Secções 5.4.1.1 e 5.4.1.2 é analisada a influência das características da perturbação no comportamento previsto pelo simulador. Além da condição anterior, de acordo com as condições de validade da comparação entre os segundos momentos estatísticos das respostas previstas pelo modelo de redes e de dispersão axial, assumiu-se que o fluxo de entrada de traçador na rede é constante e espacialmente uniforme (ver Secção 5.3.6.1). A influência das condições fronteira é estudada na Secção 5.4.1.3. Na resolução do sistema de equações usou-se sempre $\Delta t = 2\%$ do mínimo das distribuições de valores de τ_i e τ_j , sendo a escolha deste parâmetro justificada na Secção 5.4.1.4.

5.4.1 Análise do modelo proposto para a descrição do transporte de massa

Nesta secção vai ser analisado o modelo aqui proposto para a descrição do transporte de massa através de uma rede de câmaras e canais. Apenas foram analisados nesta secção os parâmetros directamente ligados ao simulador de transporte de massa.

- É estudada a influência do tipo de perturbações de concentração de soluto na entrada de fluido na rede (Secção 5.4.1.2). Os resultados obtidos com perturbações em degrau e em impulso são comparados, com o objectivo de determinar qual destas é a perturbação mais adequada para caracterizar o transporte de massa na rede de elementos.
- A influência do tipo de condições iniciais é analisada na Secção 5.4.1.3. São analisadas diferentes formas de impor a perturbação na concentração de soluto à entrada da rede, e a influência destas na caracterização do transporte de massa na rede.
- Na Secção 5.4.1.4 é analisada a influência dos parâmetros do algoritmo de resolução do sistema de equações de balanço material nos resultados obtidos, em particular Δt . Apesar de nas Secções 5.4.3 e 5.4.4 as características da rede e das distribuições das dimensões características dos elementos serem analisadas em detalhe, as influências dos valores do desvio padrão e das dimensões da rede são aqui tomadas em conta.

Os resultados obtidos nesta secção são tomados em conta nas Secções 5.4.2, 5.4.3 e 5.4.4, em particular as conclusões relacionadas com o tipo de perturbação e condições fronteira mais adequados para serem usados pelo modelo na caracterização do transporte de massa, e parâmetros do método numérico implementado para resolver o sistema de equações de balanço material.

5.4.1.1 Influência do tipo de perturbação na determinação da distribuição de tempos de residência

A distribuição de tempos de residência da rede foi determinada para perturbações de traçador em degrau ou impulso. Na Secção 5.3.7.1 foi descrito como é que a distribuição de tempos de residência adimensional, $E(\Theta)$, pode ser determinada da resposta da rede a perturbações em degrau e impulso, assumindo que à entrada da rede estas são espacialmente uniformes e o fluxo de entrada de traçador na rede é independente da coordenada transversal. Nesta secção é analisada a influência das características da perturbação nas curvas $E(\Theta)$ obtidas pelo simulador de transporte de massa.

Na Figura 5.12 são comparadas as curvas $E(\Theta)$ e a diferença percentual entre as respostas obtidas pelo simulador de transporte de massa para perturbações em degrau e em impulso espacialmente uniformes, para as mesmas características geométricas da rede e de escoamento. Foram consideradas redes 60×25 , com $\sigma_d = \sigma_D = 0.05$ e $d/D = 0.5$. Para os restantes parâmetros foram usados os valores apresentados anteriormente e que são comuns à maior parte dos resultados apresentados neste capítulo. Nestas condições, Θ_B é independente das características da perturbação imposta. Na integração do sistema de equações de balanço material nos elementos da rede usou-se um passo de integração suficientemente pequeno para assegurar que o erro cometido é pouco significativo (na Secção 5.4.1.4 são determinados critérios que asseguram que o erro cometido na resolução do sistema de equações de balanço é desprezável). Em ambos os casos $C_p = 1$, de modo a simplificar a normalização dos valores de concentração obtidos pelo simulador de transporte de massa (a influência de C_p é analisada na Secção 5.4.1.2). Verifica-se que as curvas obtidas são praticamente idênticas, mostrando que o tipo de perturbação imposta não é relevante na determinação da $E(\Theta)$.

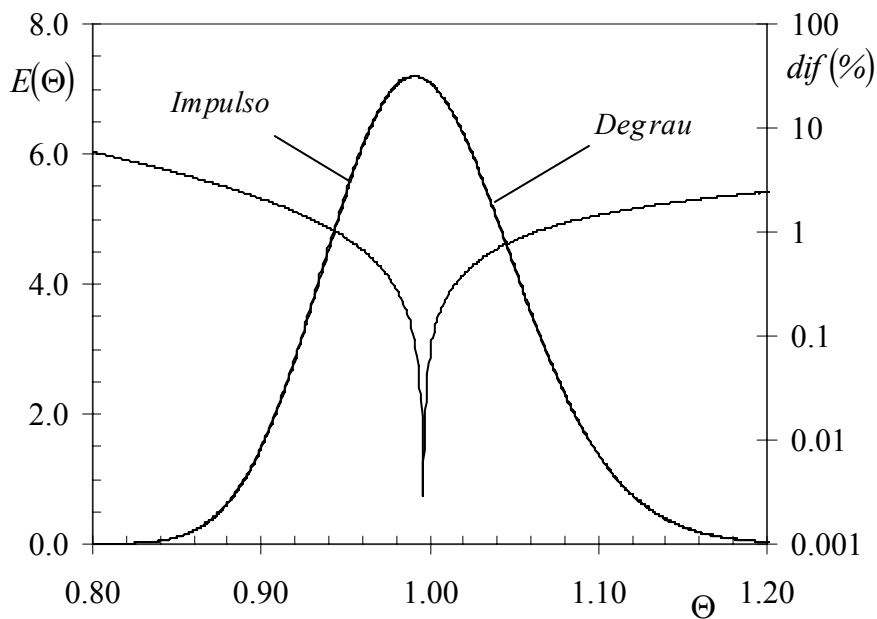


Figura 5.12 Comparação das $E(\Theta)$ previstas e diferença percentual da resposta da rede a uma perturbação em degrau e em impulso para as mesmas características geométricas da rede e de escoamento.

Observa-se que o erro diminui para valores de Θ na vizinhança do máximo da resposta da rede. As diferenças são significativas apenas quando os valores de $E(\Theta)$ são baixos, correspondentes à parte da resposta imediatamente após a chegada da perturbação à saída da rede ou quando as condições de estado estacionário estão prestes a serem alcançadas. As

diferenças entre as duas curvas são então pouco significativas, podendo a distribuição de tempos de residência adimensional e os parâmetros que caracterizam o transporte de massa ser determinados usando perturbações em degrau ou em impulso. Perturbações de traçador em degrau foram usadas preferencialmente nas simulações do transporte de massa pois é mais fácil a sua implementação computacional e tratamento dos resultados em relação a um impulso de Dirac.

Como as perturbações consideradas são espacialmente uniformes, é possível determinar o valor do número de Peclet a partir das curvas de $E(\Theta)$, com o objectivo de confirmar se as diferenças observadas nas curvas de $E(\Theta)$ são significativas. Para a perturbação em degrau obtém-se $Pe = 638.7$ e para o impulso obtém-se $Pe = 637.9$. Os valores diferem apenas 0.13%. Como experimentalmente o valor do número de Peclet é determinado quase sempre com um erro maior, é possível concluir que os resultados são independentes das características da perturbação imposta na rede.

Como se referiu anteriormente, no modelo desenvolvido neste trabalho é mais fácil e fisicamente mais correcto usar perturbações em degrau. Os resultados obtidos permitem concluir que é adequado usar este tipo de perturbações, pelo que os resultados apresentados nas secções seguintes foram obtidos usando perturbações em degrau espacialmente uniformes, salvo indicação em contrário.

Como na Figura 5.12 são apresentados resultados para $C_p = 1$, impõe-se averiguar se o valor de C_p é relevante nas curvas da distribuição de tempos de residência adimensional, influenciando os valores dos parâmetros que caracterizam o transporte de massa através da rede de elementos como por exemplo Pe e Θ_B . Quaisquer alterações nos valores previstos pelo modelo dos parâmetros referidos serão devidas ao algoritmo implementado para resolver o sistema de equações de balanço material, sendo um sinal da sua inadequação.

Na Figura 5.13 são comparadas as curvas da $E(\Theta)$ obtidas para perturbações em degrau espacialmente uniformes para três valores de C_p : 0.01, 1.0 e 100.0. Foram consideradas redes 50×25 , com $\sigma_d = \sigma_D = 0.20$ e $d/D = 0.5$. Observa-se que não é possível distinguir as curvas obtidas para cada um dos valores de C_p considerados.

Por outro lado, como as características geométricas e de escoamento através da rede de elementos são independentes de C_p , os valores de Θ_B devem ser independentes do valor de

C_p , o que é verificado. Nestas condições a influência do algoritmo implementado será visível apenas se os valores previstos de Pe forem diferentes. Estes são praticamente idênticos, mostrando que os resultados previstos pelo modelo são independentes de C_p .

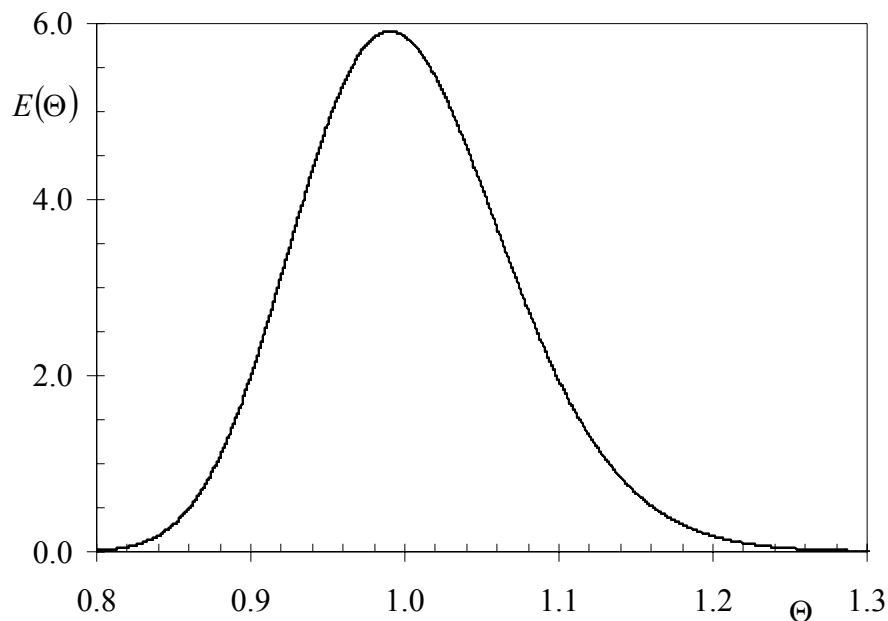


Figura 5.13 Comparação das curvas da distribuição de tempos de residência adimensional obtidas para perturbações em degrau com diferentes valores de C_p .

A comparação das curvas da $E(\Theta)$ efectuada na figura anterior não permite conclusões sobre a resposta real não normalizada do modelo. Na Figura 5.14 são comparadas as respostas não normalizadas obtidas para as mesmas condições consideradas na Figura 5.13. Foram usadas coordenadas logarítmicas de modo a facilitar a comparação das respostas obtidas. Observa-se que as respostas obtidas em todos os casos são qualitativamente similares, em particular na evolução da concentração de saída da rede $C(t)$ em função do tempo. As diferenças entre os valores calculados para a concentração de saída de traçador devem-se aos diferentes valores de C_p considerados.

Os resultados anteriores mostram que a caracterização do transporte de massa através da rede e dos seus parâmetros adimensionais pode ser feita usando perturbações em degrau espacialmente uniformes com $C_p = 1$. Deste modo, nas secções seguintes são geralmente consideradas perturbações com estas características na obtenção de resultados, indicando-se explicitamente as características da perturbação caso outra tenha sido usada.

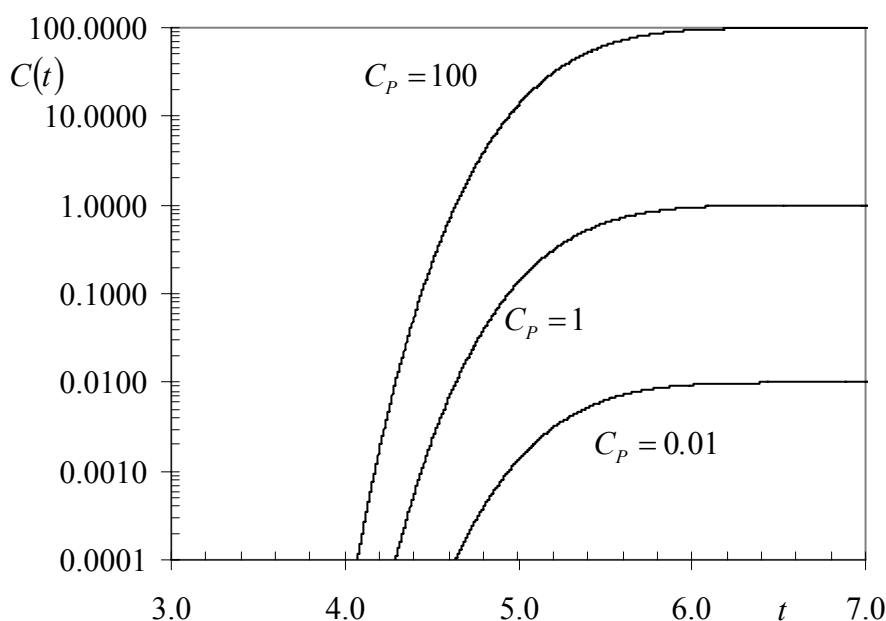


Figura 5.14 Comparação das respostas não normalizadas a perturbações em degrau com diferentes valores de C_p .

5.4.1.2 Exemplos de perturbações

Na Secção 5.4.1.1 mostrou-se que as curvas de $E(\Theta)$ obtidas a partir das respostas do simulador a perturbações em degrau e em impulso espacialmente não uniformes são praticamente idênticas, permitindo concluir que o modelo proposto é válido para perturbações com características distintas. Assim, é possível seleccionar o tipo de perturbação mais adequado, em particular espacialmente não uniformes, para visualizar os efeitos da estrutura e das distribuições das dimensões características dos elementos da rede. Por exemplo, na Figura 5.15 é apresentada a evolução espacial e temporal do perfil de concentrações de soluto para uma perturbação em degrau aplicada pontualmente na entrada de fluido na rede. Foi usada uma rede 30×10 tipo 00, com $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$ e $d/D = 0.5$. A perturbação é aplicada no centro da entrada de fluido na rede, na posição correspondente ao centro da rede segundo a direcção normal em relação ao sentido principal de escoamento.

De acordo com a estrutura geométrica da rede, a largura da pluma aumenta com a distância da entrada de fluido. Por outro lado, os valores de concentração diminuem ao longo da rede, devido à diluição provocada pelo fluido sem traçador que se mistura com fluido com traçador na fronteira da pluma. Para tempos elevados, a resposta alcança as condições de estado estacionário, o que é visualizado graficamente através de um perfil espacial invariável no tempo. O comportamento previsto é similar ao obtido por Yun *et al.* (1998) e

experimentalmente por Gaganis *et al.* (2005) para o modelo de dispersão com transporte de massa nas direcções longitudinal e transversal, tendo estes autores concluído que em certas condições a influência da perturbação de traçador pode não se fazer sentir a toda a largura do meio, como se observa na Figura 5.15.

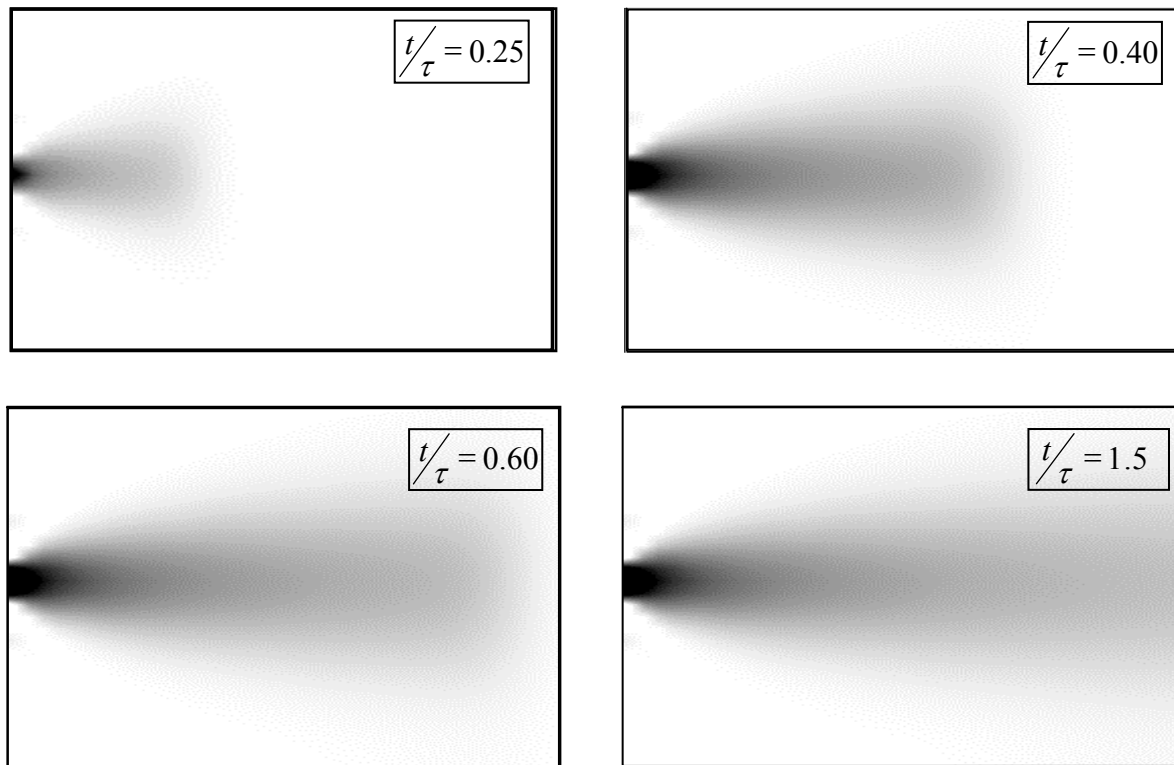


Figura 5.15 Evolução espacial e temporal do perfil de concentrações na rede após a imposição de uma perturbação pontual de soluto na rede.

Na Figura 5.16 é apresentada a evolução espacial e temporal do perfil de concentrações de soluto a uma perturbação em pulso na concentração de traçador à entrada da rede com uma duração igual a $0.3\tau_G$. Foi usada uma rede 40×20 , tipo 00, $d/D = 0.5$, com $\sigma_D = 0.30$ e $\sigma_d = 0.40$. Tal como na Figura 5.15, é possível observar a mistura do fluido e a influência das características locais da rede na evolução espacial e temporal da concentração de traçador no interior da rede.

Perturbações em pulso podem ser consideradas como casos intermédios a perturbações em degrau e em impulso. Se a duração do pulso for grande, a resposta aproxima-se da resposta a um degrau. Para durações do pulso pequenas, no limite vai-se obter a resposta a um impulso. Na Figura 5.17 são comparadas as respostas obtidas pelo simulador de transporte de massa para perturbações em pulso com diferentes durações com a resposta obtida para uma perturbação em degrau, que pode ser vista como um pulso com duração infinita. O valor de

Δt_p é definido em função de τ_G , o tempo de passagem global do fluido através da rede. Foram usadas redes 60×25 , $d/D = 0.5$ com $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$. As curvas obtidas pelo degrau ou pelo pulso são iguais na parte inicial do pulso, em que as duas perturbações são equivalentes. Após terminar o pulso, a concentração média de saída da rede tende para zero, correspondendo à saída do traçador da rede.

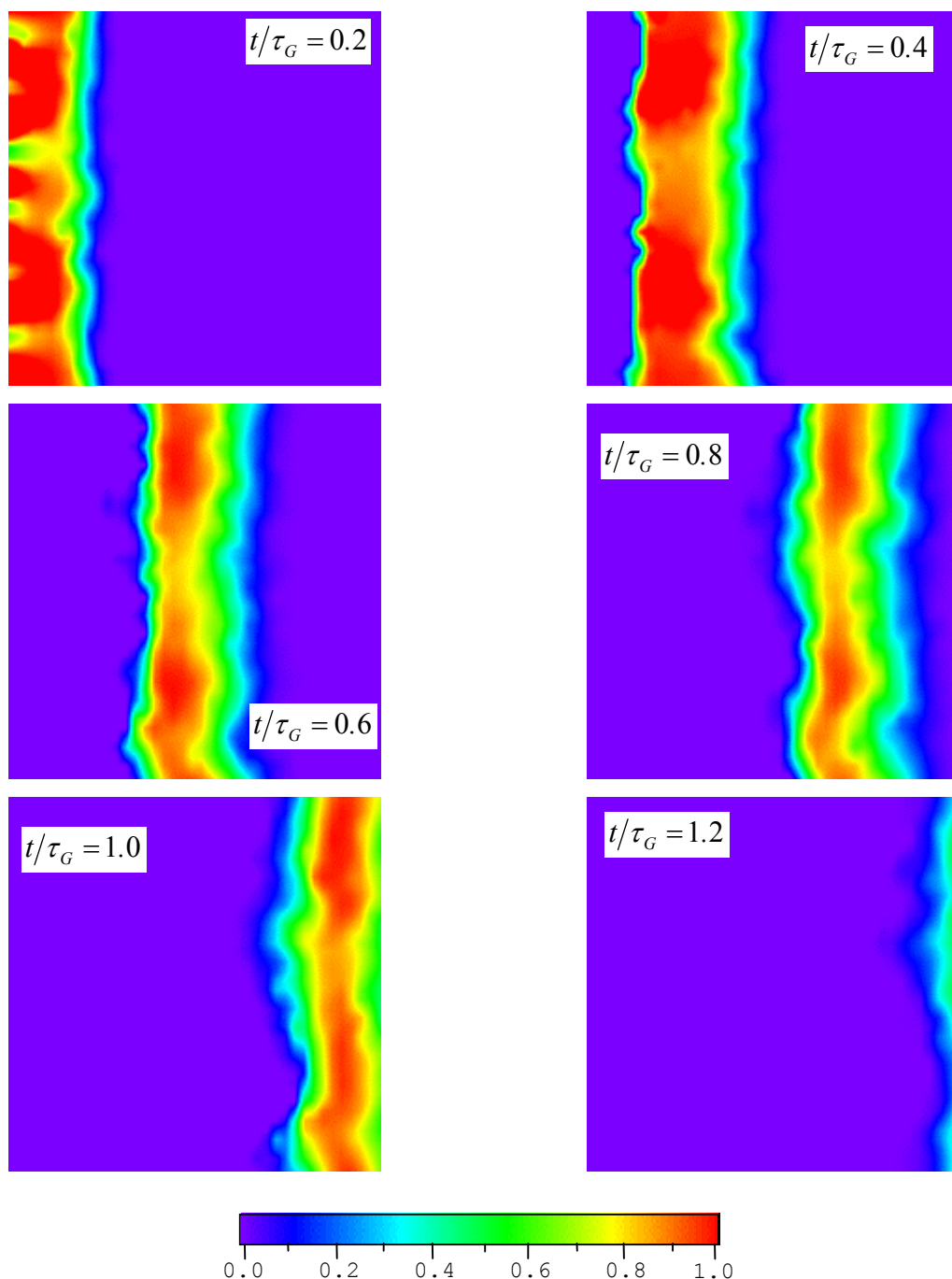


Figura 5.16 Evolução espacial e temporal do perfil de concentrações na rede após a imposição de um pulso na concentração de entrada de soluto na rede

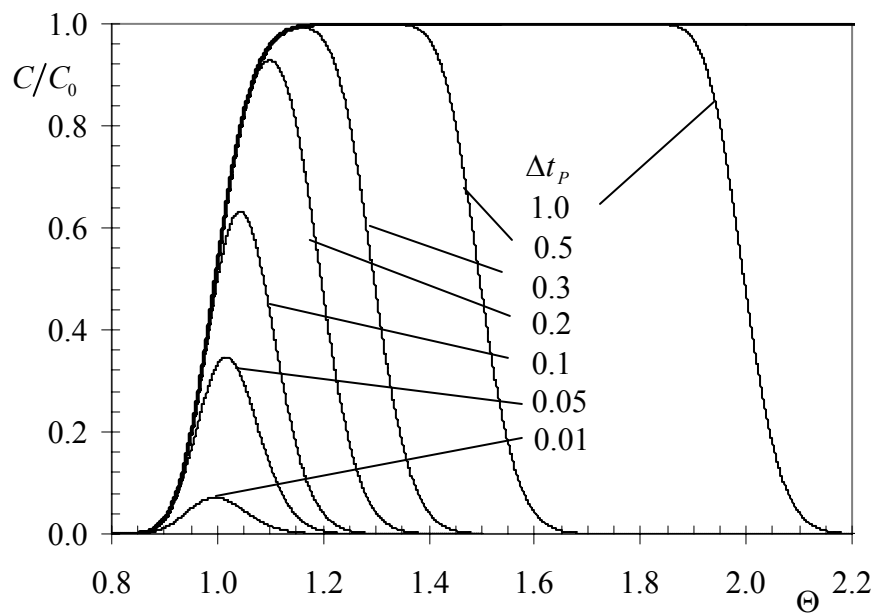


Figura 5.17 Comparação entre as respostas obtidas pelo simulador de transporte de massa para perturbações de traçador em pulso, para diferentes durações, e uma perturbação em degrau.

Nesta secção foram considerados os tipos de perturbações de traçador mais simples de implementar, mesmo experimentalmente, e de analisar os resultados obtidos. O modelo implementado permite usar outros tipos de perturbações, desde que a forma como estas são aplicadas no tempo e no espaço (referido à entrada da rede), sejam conhecidas, tendo sido implementadas directamente no simulador perturbações em degrau invertido, sinusoidal e em rampa. Como é mais simples caracterizar o comportamento da rede usando perturbações em degrau e em pulso, outros tipos de perturbações não foram considerados neste trabalho.

5.4.1.3 Influência das condições fronteira à entrada da rede

A caracterização e a descrição do transporte de massa através de um meio poroso usando o modelo de dispersão requer a imposição de condições fronteira adequadas, em particular à entrada da rede. Dependendo da forma como é imposta a perturbação de traçador num meio poroso e determinada a sua resposta, o conjunto de condições fronteira mais adequado pode variar (Levenspiel e Bischoff, 1962; Wen e Fan, 1975). No entanto, os resultados experimentais e os estudos teóricos mostram que as diferenças entre as respostas previstas apenas são significativas para valores do número de Peclet baixos. Tomando em conta as condições de escoamento na rede, em particular na entrada e saída de fluido, o conjunto de condições fronteira adequado é o proposto por Danckwerts (1953), correspondente a fronteiras fechadas à difusão.

A grande maioria dos estudos teóricos e experimentais assume que a mistura do fluido à entrada do meio é boa, implicando concentração uniforme. Por outro lado, o modelo de dispersão assume que o perfil de velocidades é uniforme no sentido transversal do escoamento. Como resultado das duas hipóteses anteriores, o fluxo molar de traçador à entrada da rede é uniforme. A mesma condição deve ser imposta no modelo de redes de modo a ser válido efectuar a comparação com o modelo de dispersão axial.

A aplicação desta condição não é directa no modelo de redes, visto que no caso geral existe uma distribuição de caudais volumétricos nos canais de entrada de fluido na rede. Deste modo, assumir um valor constante de concentração de entrada de traçador à entrada da rede, C_E , resulta numa distribuição espacial do fluxo molar de entrada de traçador na rede. Para evitar este problema, alguns autores assumiram que o traçador é misturado antes de entrar na rede, de modo a assegurar que o fluxo de entrada é espacialmente uniforme (De Arcangelis *et al.*, 1986; Russel e LeVan, 1997).

Neste trabalho preferiu-se a implementação de uma estratégia diferente, que permite comparar os resultados obtidos impondo concentração de entrada ou fluxo molar constante na entrada de fluido na rede. A primeira condição é de fácil implementação, sendo C_E determinado para cada incremento da simulação usando as características da perturbação imposta na rede. A segunda condição implica conhecer a distribuição espacial dos caudais nos canais de entrada de fluido na rede. Esse valor permite calcular o fluxo total de entrada de traçador na rede, de acordo com as características da perturbação de traçador imposta. Os valores da concentração de entrada de traçador em cada um dos canais da rede são determinados de seguida para assegurar que o fluxo de entrada de traçador na rede é constante. Notar que nos estudos anteriores e no modelo de dispersão axial considerado neste trabalho para determinar Pe se assume que as perturbações são espacialmente uniformes, sendo a análise efectuada nesta secção apenas válida tomando em conta estas restrições.

Para uma rede uniforme as duas situações são equivalentes. Apenas quando existem distribuições das dimensões características dos elementos da rede não pontuais, implicando um perfil de velocidades na rede não uniforme, é que as respostas dependem das condições fronteira assumidas na simulação.

No caso geral a distribuição espacial da concentração de soluto vai ser diferente conforme o tipo de condição fronteira. No entanto, as características do escoamento na rede resultam na mistura lateral do traçador com a consequente uniformização do perfil de concentrações na

direcção normal ao escoamento (ver Secção 5.4.1.2). Este processo de mistura depende das características geométricas da rede, em particular o seu comprimento, proporcional a N_x . Os efeitos do tipo de condições fronteira deverão ser mais marcados para redes com valores baixos de N_x . Na Figura 5.18 são comparadas as curvas de $E(\Theta)$ variando o tipo de condições fronteira. Foram usadas redes 5×20 , $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$, para três valores da razão d/D . Foram considerados valores elevados do desvio padrão para reforçar os efeitos da distribuição das dimensões características dos elementos da rede. Observou-se que os valores previstos de Θ_B são independentes das condições fronteira consideradas. Este parâmetro depende apenas das distribuições de tempos de passagem na rede, podendo ser determinado sem ser necessário simular o transporte de massa na rede de elementos.

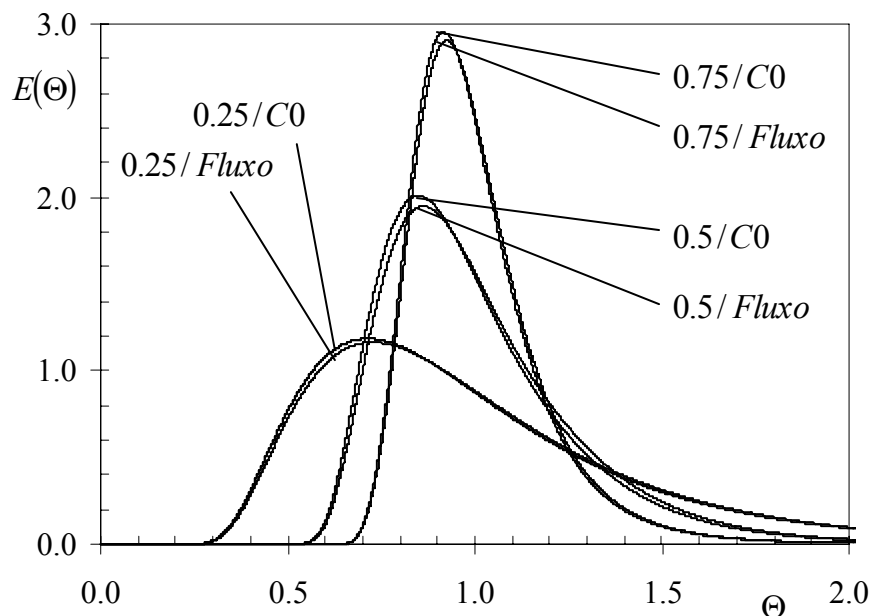


Figura 5.18 Distribuições de tempos de residência normalizadas considerando os dois tipos de condições fronteira em função de d/D para redes 5×20 com $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$.

Para as mesmas características geométricas observa-se que o valor máximo das curvas $E(\Theta)$ obtidas assumindo fluxo molar uniforme de entrada na rede é sempre inferior, embora a diferença não seja significativa em qualquer dos casos estudados. Esta situação observou-se em todos os casos em que se compararam os resultados previstos pelos dois tipos de condições fronteira. A utilização da condição de fluxo constante implica um perfil de concentrações não uniforme na entrada de traçador da rede, resultando numa maior mistura lateral do traçador e consequentemente valores de Pe mais baixos quando comparados com os valores obtidos para a outra condição fronteira.

Quantitativamente a diferença mais elevada correspondente à $E(\Theta)$ prevista para a $d/D = 0.5$. Conclusões similares são obtidas comparando os valores previstos de Pe usando os dois tipos de condições fronteira, como se pode ver na Tabela 5.1. Calculando as diferenças percentuais entre os valores obtidos, observa-se que para valores elevados e baixos da razão d/D os valores calculados são similares. Para valores elevados da razão d/D , o volume de vazios associado às câmaras é muito superior aos dos canais. Deste modo, os mecanismos dispersivos são dominantes e a influência da distribuição de velocidade nos canais é pouco significativa. O comportamento transiente das câmaras uniformiza o campo de concentrações e amortece quaisquer variações induzidas pelo tipo de condições fronteira considerado. Para valores baixos de d/D , o transporte de massa é controlado pelos mecanismos convectivos, sendo a uniformização do campo de concentrações devida à mistura do traçador nas câmaras. Em ambas as situações, a mistura de traçador é suficiente para reduzir a influência do tipo de condições fronteira assumida. Quando d/D toma valores na vizinhança de 0.5, nenhum dos mecanismos de transporte de massa é dominante, sendo deste modo mais marcada a influência do tipo de condições fronteira usadas na simulação.

Tabela 5.1 Comparação dos números de Peclet previstos considerando os dois tipos de condições fronteira, em função de d/D para redes 5×20 com $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$.

d/D	Valor previsto Número de Peclet		Diferença Percentual
	C_E constante	Fluxo constante	
0.25	8.96	8.70	2.9
0.5	28.60	27.00	5.6
0.75	62.56	60.94	2.6

Na Figura 5.19 são comparadas as diferenças percentuais entre as respostas adimensionais previstas pelo simulador de transporte de massa para os dois tipos de condições fronteira. Para todos os valores de d/D observa-se o mesmo comportamento qualitativo, sendo as diferenças mais marcadas na parte inicial da resposta. Esta parte da resposta corresponde ao tempo imediatamente após a imposição da perturbação de traçador na rede, onde a influência da distribuição de velocidades e de traçador à entrada da rede é mais marcada. A diferença entre as duas respostas diminui ao longo do tempo devido à mistura lateral e à saturação dos

elementos da rede. Para tempos elevados, a resposta da rede aproxima-se do comportamento de estado estacionário, em que as condições fronteira escolhidas não são significativas.

Observa-se ainda que quanto menor o valor da razão d/D , mais lenta é a aproximação entre as duas curvas. Diminuir d/D corresponde a aumentar a influência dos mecanismos dispersivos, aumentando a influência do comportamento transiente das câmaras na resposta da rede. Assim, a influência do tipo de condições fronteira usadas é sentida para tempos de simulação mais elevados. No entanto, as diferenças entre os valores de Pe previstos é maior para $d/D = 0.5$, visto que a diferença entre as respostas obtidas é sempre maior nessa situação.

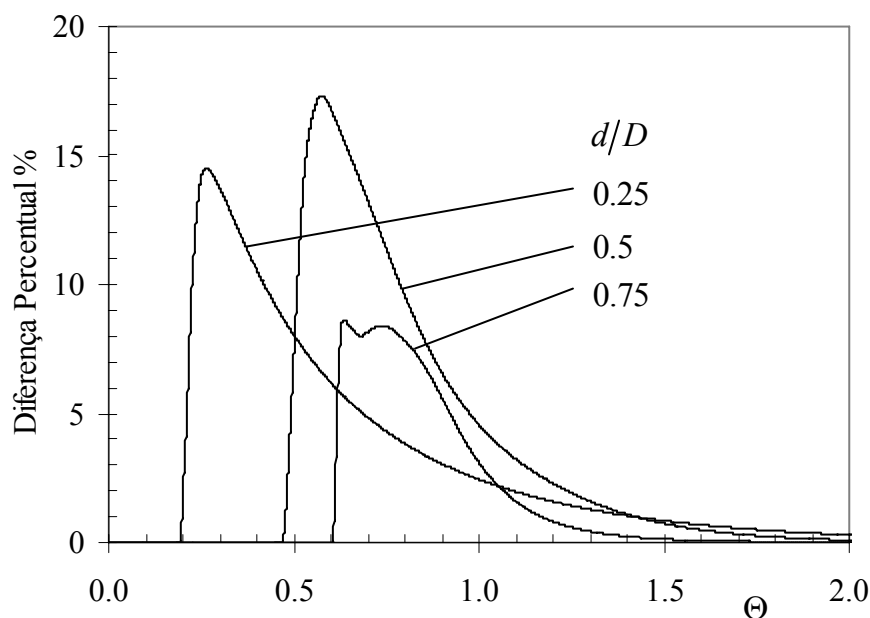


Figura 5.19 Diferença percentual entre as curvas F adimensionais previstas pelo simulador de transporte de massa para três valores da razão entre os valores médios das câmaras e dos canais.

As conclusões anteriores mostram que a influência do tipo de condição fronteira depende das características geométricas da rede, em particular de d/D . De acordo com o modo como a condição fronteira baseada no fluxo constante de traçador na entrada de fluido na rede é imposta, a distribuição dos caudais volumétricos na rede, em particular na entrada de fluido vai influenciar a resposta da rede. Esta distribuição é dependente dos valores dos parâmetros estatísticos das distribuições das dimensões características dos elementos da rede, em particular dos valores do desvio padrão. Para esclarecer a sua influência nos resultados previstos pelo simulador de transporte de massa, foram efectuadas simulações para diferentes combinações de valores de σ_D e σ_d , usando redes com 10×20 e $d/D = 0.5$. As diferenças

percentuais entre as respostas normalizadas para os dois tipos de condições fronteira são apresentadas na Figura 5.20. Como esperado, as diferenças entre as respostas aumentam com o aumento dos valores de σ_D e σ_d . Devido à distribuição mais larga dos valores dos caudais volumétricos à entrada da rede, as diferenças na distribuição de concentração de traçador à entrada da rede vão ser mais marcadas. Por outro lado, as diferenças entre as respostas são significativas para tempos mais elevados, indicando que o efeito da mistura lateral de traçador é função das características da estrutura geométrica da rede de elementos. Estes aspectos são analisados em detalhe na Secção 5.4.4.2.

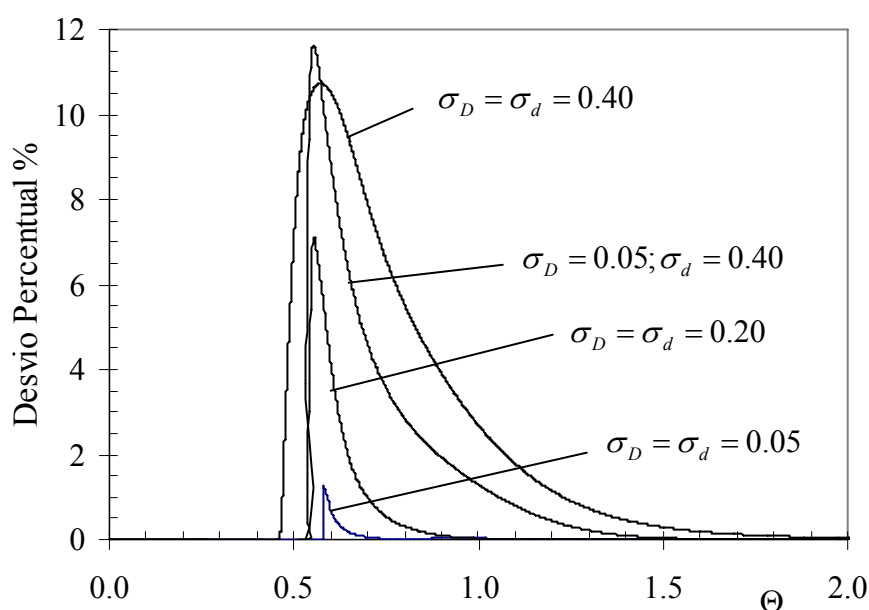


Figura 5.20 Diferença percentual em função dos valores de σ_D e σ_d usando as duas formas de condições fronteiras à entrada da rede para redes 10×20 e $d/D = 0.5$

Além dos efeitos referidos, observa-se que para valores iguais de σ_d , as diferenças entre as respostas previstas para os dois tipos de condição fronteira aumentam com o aumento de σ_D . Uma distribuição mais larga dos diâmetros das câmaras implica distribuições dos valores de τ_i mais largas. Nestas condições observa-se uma grande variação no comportamento transiente das câmaras, influenciando a mistura de traçador e a homogeneização do perfil de concentrações. Situação análoga ocorre quando σ_d aumenta mantendo σ_D constante. Como no caso anterior, a distribuição dos tempos de passagem nos canais é mais larga, obtendo-se um perfil de concentrações mais irregular e dependente da forma como o traçador entra na rede.

Os resultados apresentados permitem concluir que a influência do conjunto de condições fronteira usado na simulação é mais marcada na entrada de fluido na rede e nos instantes iniciais após a imposição da perturbação à entrada da rede. A influência da mistura lateral do traçador na uniformização do campo de concentrações depende da distância percorrida por este na rede, proporcional a N_x . Deste modo, espera-se que a influência das condições fronteira diminua com o aumento das dimensões da rede no sentido principal de escoamento.

Para esclarecer se este comportamento é verificado, foram efectuadas simulações para redes com diferentes valores de N_x para três valores de d/D , tendo-se considerado redes com $N_y = 30$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$. Na Figura 5.21 são apresentadas as diferenças percentuais entre os valores de Pe previstos para os dois tipos de condições fronteira, observando-se o mesmo comportamento qualitativo para todos os valores de d/D considerados. As maiores diferenças são observadas para valores baixos de N_x , situação em que as diferenças entre os perfis de concentração de entrada de traçador na rede ainda não foram amortecidas pela mistura lateral na rede.

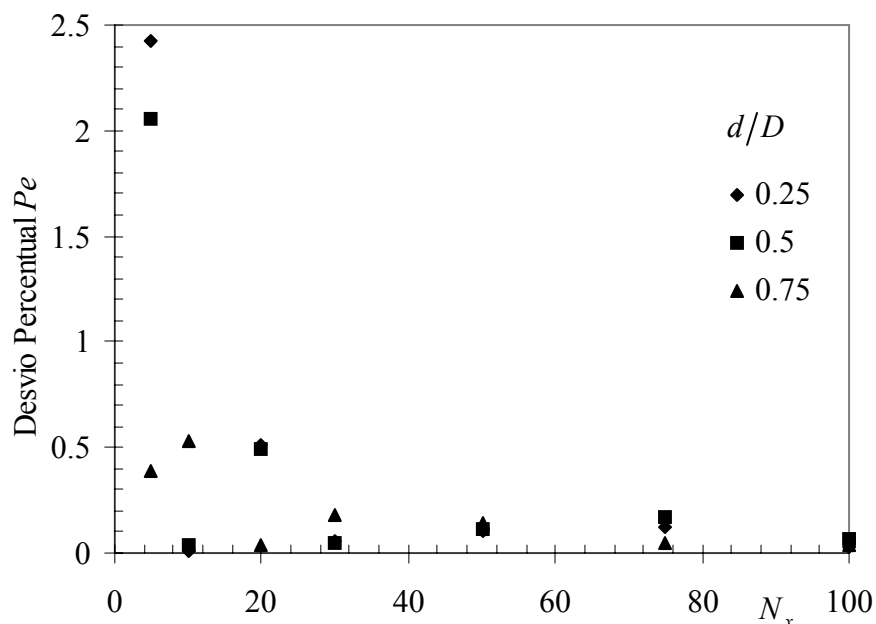


Figura 5.21 Diferença percentual entre os números de Peclet previstos considerando os dois tipos de condições fronteira, em função de N_x para 3 valores de d/D e redes com $N_y = 30$, para $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$..

Quanto maior a dimensão da rede segundo o sentido principal do escoamento, menor é a diferença entre os valores previstos de Pe , indicação que a mistura do traçador na rede uniformizou o campo de concentrações na rede. Para valores elevados de N_x , a diferença

tende para zero, mostrando que a influência das condições fronteira definidas na entrada de fluido na rede diminui com o aumento das dimensões da rede. Mesmo para redes com valores baixos de N_x as diferenças entre os valores previstos de Pe são pouco significativas, não sendo possível observar diferenças significativas nas curvas da $E(\Theta)$ previstas. Estes resultados estão de acordo com os resultados obtidos com o modelo de dispersão axial, em que se observa que as diferenças entre os diferentes conjuntos de condições fronteira são significativas apenas quando os números de Peclet são baixos, correspondentes a situações em que o transporte de massa é dominado por mecanismos difusivos ou para meios porosos pequenos segundo o sentido principal de escoamento (Wen e Fan, 1975). No modelo proposto esta situação corresponde a redes com valores pequenos de N_x .

Os resultados previstos para os dois tipos de condições fronteira são similares, sendo as diferenças significativas apenas para redes com um número pequeno de elementos ou com valores baixos de N_x , indicando que nessas condições as características geométricas da rede são importantes. Para redes com um número elevado de elementos ou um valor elevado de N_x , observam-se sempre diferenças nas respostas previstas. Apesar deste facto, as diferenças são pouco significativas, estando estas dentro da gama de erro numérico cometido na resolução do sistema de equações de balanço material (ver Secção 5.4.1.4) e do erro experimental cometido na caracterização do comportamento de um meio poroso a uma perturbação de traçador.

No entanto, a determinação de D_L através da comparação entre os valores dos segundos momentos estatísticos requer a utilização de condições de fluxo constante. Apesar da implementação destas ser mais complexa, foi esta a opção usada neste trabalho, tomando em conta as excepções consideradas na Secção 5.3.1.

5.4.1.4 Influência do passo de integração seleccionado

O parâmetro mais importante na resolução do sistema de equações diferenciais de balanço material nas câmaras pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem é o passo de integração, Δt . Além do erro numérico associado ao método numérico, a existência dos atrasos associados aos canais representam um termo adicional. Como se referiu anteriormente, o algoritmo implementado não permite tomar em conta de forma exacta a chegada do traçador a todas as câmaras da rede. Assim, as descontinuidades nas derivadas das funções $f_i(t)$ não são

tomadas em conta explicitamente durante a resolução numérica do sistema de equações de balanço material, aumentando o erro cometido.

Qualitativamente, quanto menor Δt menor será o erro cometido (Chapra e Canale, 1992) mas maior será o tempo de computação necessário para descrever o comportamento da rede. Deve-se então tentar obter um compromisso entre o erro cometido e o tempo de simulação. O valor óptimo dependerá das características geométricas e do escoamento na rede e da precisão pretendida.

Na Figura 5.22 são comparadas as curvas $E(\Theta)$ previstas pelo simulador de transporte de massa, para diferentes valores de Δt . Foram consideradas redes com 20×30 , $d/D = 0.5$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$. Como para valores elevados de Δt existe a possibilidade de não se verificar o balanço material de traçador (ver Secção 5.3.4), considerou-se apenas o critério de paragem baseado no tempo de simulação. O múltiplo de τ_G foi seleccionado de modo a assegurar que a resposta alcança as condições de estado estacionário. Nas curvas apresentadas, o valor de Δt não se refere ao valor real do incremento temporal usado na resolução do sistema de equações de balanço material, mas sim à percentagem do menor valor da distribuição de tempos de passagem das câmaras e dos canais. Como as características geométricas da rede e do escoamento não variam, as diferenças observadas nas distribuições de tempo de residência devem-se aos diferentes valores de Δt utilizados.

As curvas de $E(\Theta)$ são qualitativamente similares entre si, deslocando-se para valores mais elevados de Θ à medida que Δt diminui. Este facto pode ser atribuído à redução do erro cometido na chegada de traçador nas câmaras da rede. Como quase sempre o último incremento espacial dos canais não coincide com a chegada do traçador ao canal, quando este alcança pela primeira vez uma câmara da rede existe uma discrepância entre a posição correcta do traçador e a usada no algoritmo. Se o traçador chega a uma câmara entre dois incrementos, como o atraso imposto pelas câmaras é nulo, o espaço percorrido pelo traçador é sempre inferior a um incremento nos canais de saída. No entanto, o deslocamento é igual a um incremento, superior ao valor correcto, resultando num avanço da resposta que se pode observar na resposta à saída da rede, saindo esta mais cedo. Como quanto maior for Δt maior será a distância entre o último incremento dos canais e a entrada das câmaras, as curvas deslocam-se para tempos mais baixos, como se pode observar na Figura 5.22.

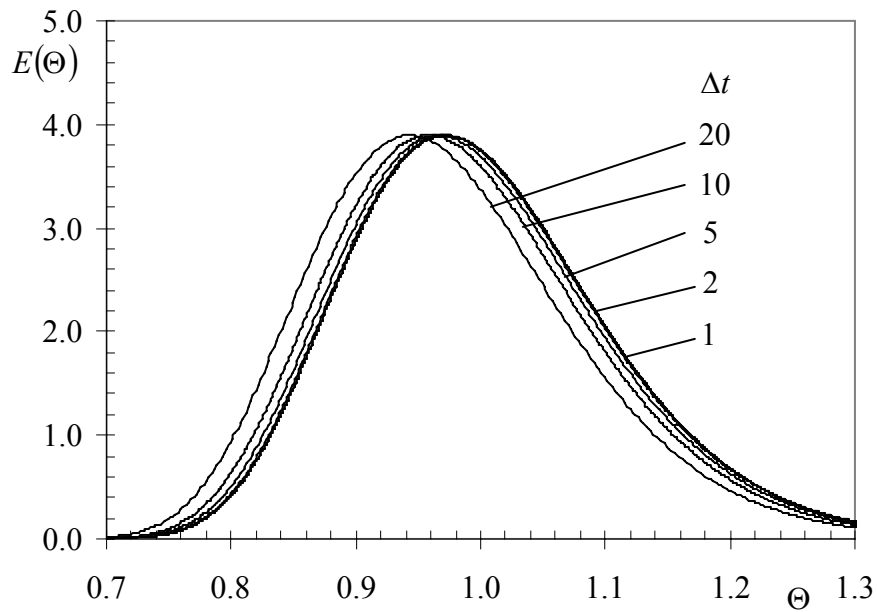


Figura 5.22 Distribuições de tempos de residência obtidas para diferentes valores de Δt para uma rede 20×30 , $d/D = 0.5$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$.

As diferenças entre as curvas diminuem com a diminuição de Δt , como era esperado. Para as condições em que foram efectuadas as simulações da Figura 5.22, as diferenças entre as curvas de $E(\Theta)$ são pouco significativas desde que $\Delta t \leq 2\%$, tendo-se verificado que esta condição é adequada nas simulações efectuadas neste trabalho.

Como o passo de integração é determinado com base na distribuição de valores de τ_i e τ_j , por sua vez função das características geométricas e de escoamento da rede, é de esperar que os parâmetros das distribuições de valores de D_i e d_j influenciem o comportamento do método numérico. Para esclarecer este aspecto foram efectuadas simulações com o mesmo conjunto de condições considerados na Figura 5.22, mas com $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$. Observa-se o mesmo comportamento qualitativo das curvas $E(\Theta)$ em função de Δt já observado anteriormente, mas as diferenças entre as diferentes curvas são mais marcadas. Este facto deve-se à forma como a discretização espacial dos canais é efectuada no algoritmo implementado. Quando as distribuições das dimensões características dos elementos da rede possuem valores do desvio padrão baixos, as distribuições de velocidades nos canais vão ser apertadas (ver Secção 5.4.4.2), resultando em distribuições dos tempos de passagem nos elementos da rede também apertadas. Assim, a maior parte dos canais vai possuir a mesma discretização espacial e o erro associado a não tomar em conta a chegada exacta de traçador às câmaras da rede é similar em todos. Para distribuições dos valores de τ_i e τ_j largas, o

número dos incrementos na maior parte dos canais aumenta, reduzindo-se o erro associado à chegada do traçador às câmaras.

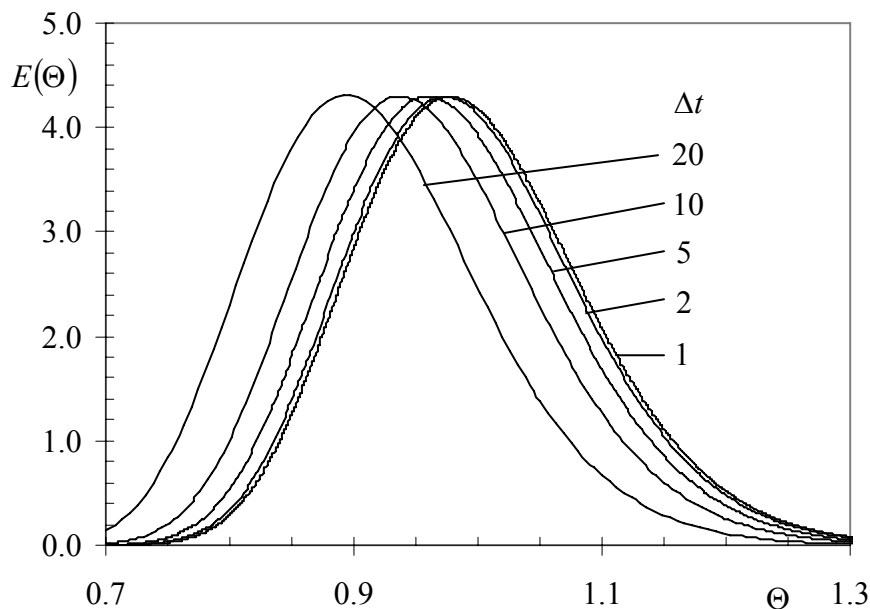


Figura 5.23 Distribuições de tempos de residência obtidas para diferentes valores de Δt para uma rede 20×30 , com fronteiras periódicas sem canais horizontais para $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$.

A comparação directa das curvas da $E(\Theta)$ não permite a determinação fácil do valor adequado de Δt , nem o desenvolvimento de critérios para a selecção do valor do incremento temporal que deve ser usado em função das características geométricas e de escoamento da rede. Dependendo das características da perturbação, diferentes parâmetros podem ser usados para analisar a influência de Δt no comportamento da rede. O parâmetro mais adequado, visto depender apenas da distribuição dos tempos de passagem nos elementos da rede, é Θ_B , tempo de *breakthrough* adimensional (ver Secção 5.3.7.3). Na Figura 5.24 são comparados os valores de Θ_B previstos pelo simulador de transporte de massa em função do inverso de Δt para redes com 20×30 com $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$. Três valores de d/D foram considerados de modo a analisar a influência deste parâmetro. É possível observar que em todos os casos Θ_B tende para um valor constante, função apenas das características geométricas da rede. O mesmo comportamento qualitativo é observado entre as curvas previstas para os diferentes valores da razão d/D , mostrando que são as características das distribuições das dimensões características dos elementos da rede os factores mais importantes na resolução do sistema de equações de balanço material. Os resultados confirmam o critério proposto anteriormente de que se $\Delta t \leq 2$ os resultados obtidos são adequados.

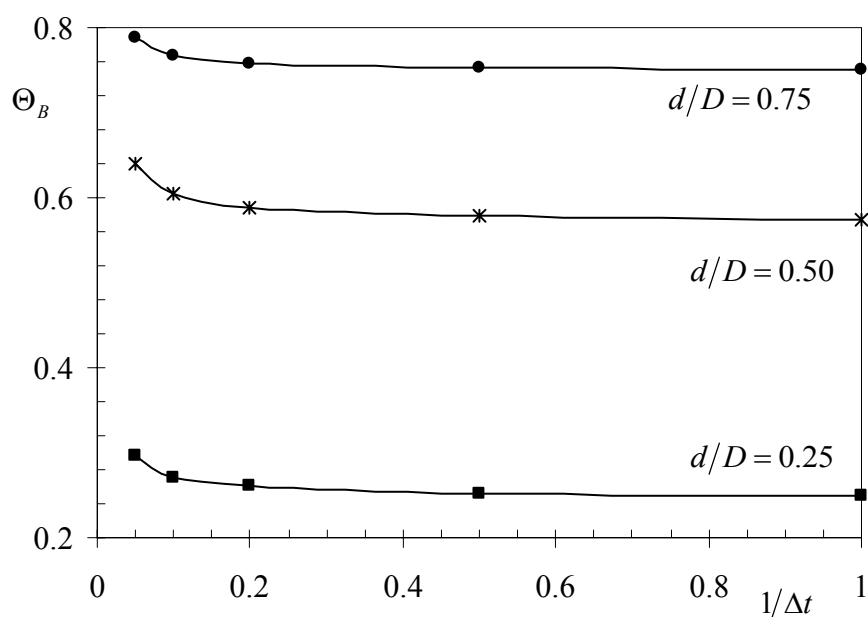


Figura 5.24 Valores de Θ_B em função de Δt para três valores de d/D em redes 20×30 com $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$.

A forma anterior de determinação de Δt é independente das características da perturbação. No entanto, quando as perturbações são espacialmente uniformes e são usadas as condições fronteira de fluxo constante, é possível determinar um critério baseado na verificação do balanço material global na rede (ver Secção 5.3.4). Na Figura 5.25 apresentam-se os erros de balanço material obtidos para as simulações apresentadas na Figura 5.24. Observa-se que todas as curvas possuem o mesmo comportamento qualitativo, de acordo com a conclusão anterior que d/D não é significativo.

Também foi analisada a influência do número de elementos da rede, em particular o número de câmaras. Verificou-se em todos os casos estudados que, desde que Δt seja menor ou igual a 2% do menor valor das distribuições dos tempos de passagem nas câmaras e nos canais o erro cometido ao resolver as equações de balanço material é menor que 0.1%, sendo este critério independente das características geométricas e de escoamento da rede.

Apesar das conclusões anteriores, em muitos casos, valores de Δt menores ou iguais a 5% poderão ser adequados, reduzindo assim o esforço necessário para descrever o transporte de massa na rede de elementos. O valor adequado de Δt deve ser determinado caso a caso, tomando em conta que o critério de $\Delta t \leq 2$ é válido quaisquer que sejam as condições de simulação. No entanto, como a determinação do valor adequado requer efectuar simulações para diferentes valores de Δt , usou-se sempre $\Delta t = 2$. Esta condição é válida mesmo quando

são consideradas as condições de saturação nos elementos da rede, a analisar na Secção 5.4.1.5. Caso seja usado outro Δt ou seja relevante para a análise de resultados, este facto é descrito explicitamente no texto.

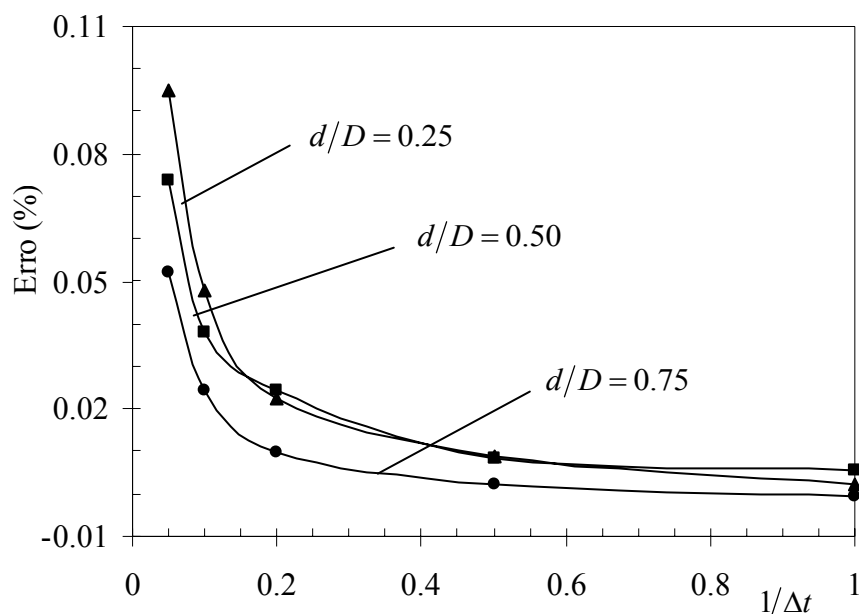


Figura 5.25 Erro observado no balanço material observado para perturbações em degrau uniforme para três valores de d/D em redes 20×30 com $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$.

5.4.1.5 Influência da aplicação das condições de saturação nos elementos da rede

Na Secção 5.3.5.2 mostrou-se que a análise do comportamento qualitativo das câmaras para alguns tipos de perturbações pode ser usada para reduzir o esforço necessário para resolver o sistema de equações de balanço. Entre estas encontram-se as perturbações em degrau espacialmente uniformes, usadas preferencialmente para caracterizar o transporte de massa na rede. Como em muitos casos a aplicação das condições de saturação reduz significativamente o esforço necessário para caracterizar o transporte de massa na rede de elementos, é importante caracterizar o seu impacto.

A aplicação dos critérios de saturação altera a resolução normal do sistema de equações diferenciais visto que quando estes são verificados numa câmara qualquer, a concentração de traçador no seu interior passa a ser fixada em vez de ser calculada resolvendo a equação de balanço material. Assim, os valores previstos pelo simulador de transporte de massa vão ser diferentes conforme os critérios de saturação são tomados em conta ou não. As diferenças dependem de $F_{\min}$ e das características geométricas e de escoamento na rede. São influenciados apenas os parâmetros dependentes da resposta da rede, em particular Pe , visto

que Θ_B , α ou γ dependem apenas das características geométricas e de escoamento nos elementos da rede.

Para esclarecer a influência destes critérios, foram comparados os resultados de simulações tomando em conta ou não a saturação dos elementos da rede com os valores previstos, tendo-se considerado diferentes valores de $F_{\min}$. Na Figura 5.26 é comparado o desvio percentual entre os erros observados no balanço material em função de $F_{\min}$ em relação ao caso em que não se usam critérios de saturação. Assim, a comparação é efectuada relativamente ao caso limite em que o erro apenas se deve ao valor de Δt seleccionado, permitindo ter uma ideia do erro adicional quando se tomam em conta as condições de saturação. Foram consideradas redes com 35×10 e $d/D = 0.5$, para diferentes valores de σ_D e σ_d . O mesmo comportamento qualitativo é observado em todas as curvas, observando-se que para valores de $F_{\min}$ inferiores a 10^{-8} o erro adicional é pouco significativo. Este valor pode ser considerado como sendo adequado em todos os casos estudados.

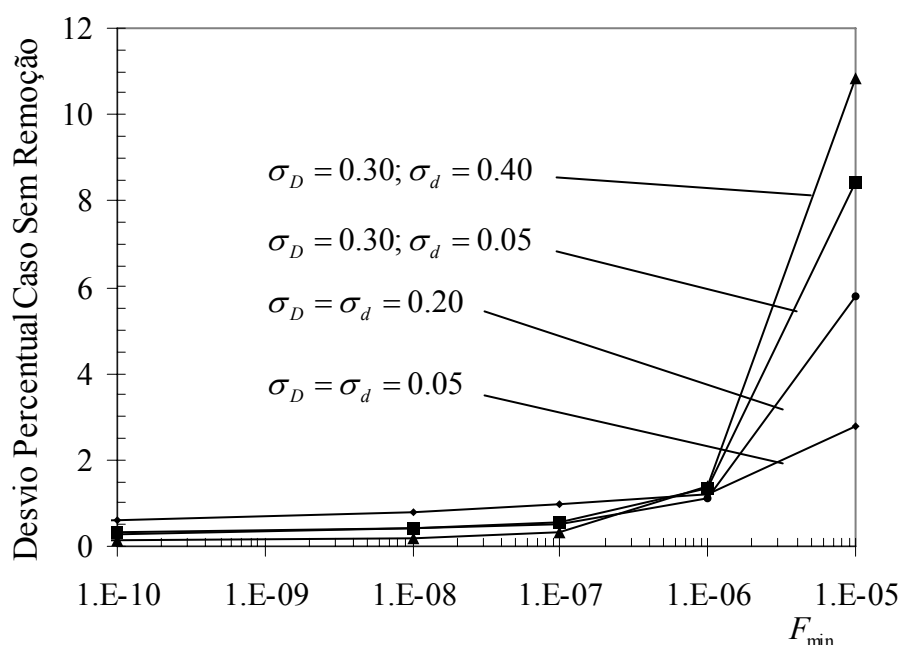


Figura 5.26 Desvio percentual do erro cometido no balanço material em relação ao caso em que não é considerada a saturação dos elementos da rede, para vários valores de $F_{\min}$ e de combinações de valores de σ_D e σ_d .

Para valores de $F_{\min}$ superiores a este valor limite, o erro aumenta significativamente, deixando os resultados obtidos de ser significativos. Ao contrário das conclusões da Secção 5.4.1.4, em que os erros mais elevados são observados para valores de desvio padrão baixos, agora observa-se que os erros mais elevados estão associados a valores elevados de σ_D e σ_d ,

em particular de σ_D . Como a aplicação dos critérios de saturação é efectuada nas câmaras e valores elevados de σ_D correspondem a uma distribuição muito larga de valores de τ_i , a verificação dos critérios de saturação resulta em maiores variações do campo de concentração nestas condições, aumentando o erro cometido.

Na Figura 5.27 são comparadas as curvas obtidas de $F(t)$ para redes com 35×10 , $d/D = 0.5$, $\sigma_D = 0.30$ e $\sigma_d = 0.40$, para condições em que não são usados critérios de saturação ou são usados com dois valores distintos de $F_{\min}$. Apenas para tempos superiores a τ_G é que se observam diferenças entre as diferentes curvas. Aumentando o tempo de simulação, as câmaras começam a saturar. Para valores mais elevados de $F_{\min}$ as câmaras saturam para valores de concentração mais baixos e mais distantes de C_p , e é de se esperar que o valor limite de concentração à saída da rede diminua, como se observa na Figura 5.27. Por outro lado, como as condições de saturação são alcançadas mais cedo, quanto maior for $F_{\min}$ menor é o tempo de simulação, situação também observada na Figura 5.27.

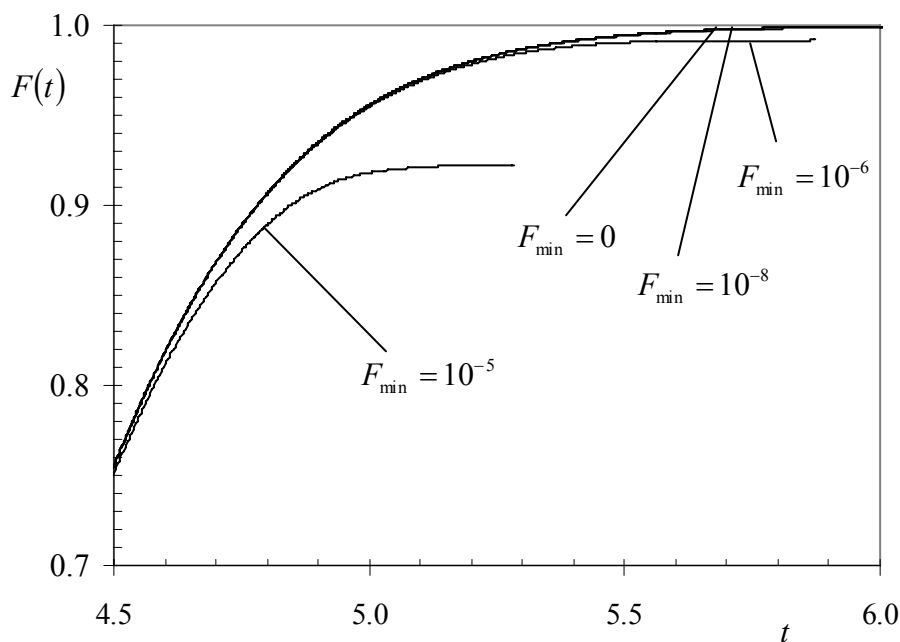


Figura 5.27 Comparação entre as curvas de $F(t)$ obtidas para diferentes valores de $F_{\min}$ nas condições das simulações apresentadas na Figura 5.26.

Os resultados apresentados na Figura 5.26 e na Figura 5.27 tomam em conta apenas a influência das características das distribuições das dimensões características dos elementos da rede. Na Secção 5.3.8.3 conclui-se que as características do transporte de massa dependiam também da relação entre os valores médios das dimensões características dos elementos da

rede. No algoritmo implementado a aplicação das condições de saturação é feita nos valores de concentração nas câmaras, pelo que pode ser possível que as suas características geométricas sejam significativas na selecção do valor adequado de $F_{\min}$.

De modo a esclarecer esta questão, foram efectuadas simulações para redes 35×10 , com $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$, variando-se d/D . Na Figura 5.28 são apresentadas as diferenças percentuais observadas no balanço material global em relação ao caso sem saturação para diferentes valores de $F_{\min}$. Em todos os casos, o comportamento qualitativo observado é similar, sendo mais elevado na gama de valores de $F_{\min}$ mais baixos e quanto maior for d/D . Para valores mais elevados deste parâmetro o transporte de massa na rede é controlado pela convecção e pelo comportamento dos canais. Como os critérios de saturação são verificados nas câmaras os resultados mostram que nestas condições o comportamento da rede é controlado pelo comportamento dos canais.

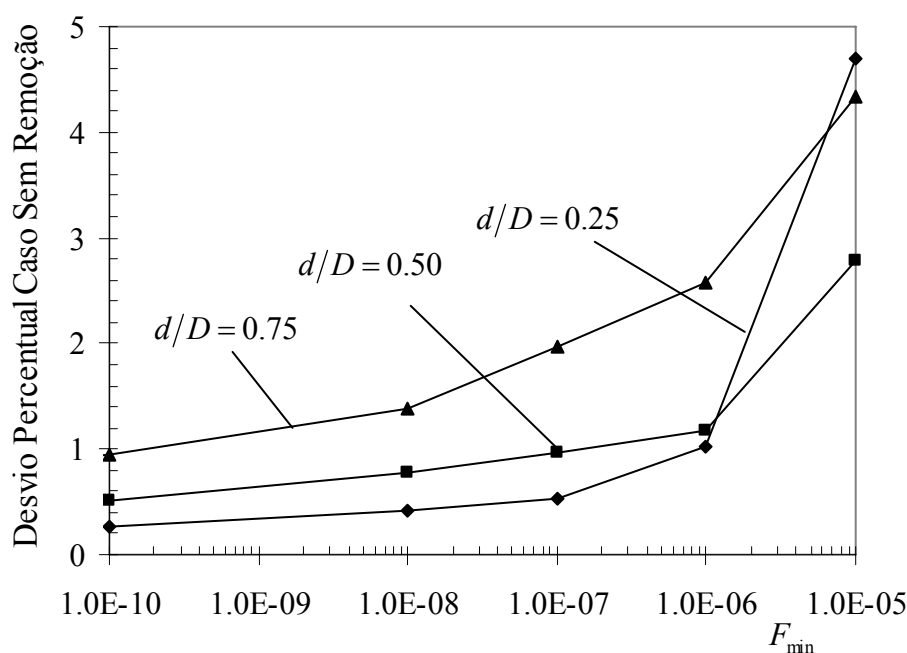


Figura 5.28 Desvio percentual do erro cometido no balanço material em relação ao caso em que não é considerada a possível saturação dos elementos da rede, para vários valores de d/D , usando $F_{\min} = 10^{-8}$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$.

Os resultados apresentados na Figura 5.26 e na Figura 5.27 permitem concluir que, desde que $F_{\min} \leq 10^{-10}$, a aplicação das condições de saturação tem uma influência desprezável nos valores previstos pelo simulador de transporte de massa. Esta condição é independente das características geométricas e do escoamento na rede. Com excepção de perturbações específicas em que não é possível tomar em conta a saturação dos elementos da rede (ver

Secção 5.3.5.2), usou-se nas secções seguintes $F_{\min} = 10^{-12}$, apenas se apresentando o valor usado quando este for diferente.

A redução do esforço necessário para resolver as equações de balanço material faz-se sentir de duas formas. A mais importante é a redução do número de equações a resolver em cada passo de integração. A segunda, menos significativa, diz respeito à paragem da simulação, permitindo muitas vezes reduzir os problemas de uma escolha inadequada de $t_{\max}$. Em ambos os casos, a redução, em relação ao caso em que não se toma em conta o comportamento limite dos elementos da rede, é tanto maior quando mais elevado for $F_{\min}$. Para o valor de $F_{\min}$ usado na maior parte das simulações observaram-se reduções do tempo de simulação da ordem dos 50%, sendo a diferença mais marcada para d/D elevados. Verificou-se também que a influência das condições de escoamento na rede é pouco significativa.

A aplicação das condições de saturação permite saber também em cada incremento de tempo qual é a zona em que ocorrem variações no perfil de concentração de traçador (activa). As características desta zona, em particular as suas dimensões e o modo como esta se desloca ao longo da rede, são função das características geométricas e de escoamento dos elementos da rede. A descrição da evolução da zona em que os elementos da rede estão activos é semelhante a seguir a onda de concentração ao longo da rede, em particular para perturbações espacialmente uniformes.

Na Figura 5.29 são comparadas as curvas do número de linhas activas normalizada por N_x para redes com $N_y = 10$, $d/D = 0.5$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$. Vários valores de N_x foram considerados para analisar a influência deste parâmetro. A normalização por N_x permite determinar a percentagem de linhas activas da rede em função do tempo e determinar quando é maior o número de equações de balanço material. Este valor é proporcional ao esforço necessário para resolver o sistema de equações diferenciais de balanço material, visto representar aproximadamente o número de equações que se integram em cada incremento temporal. Em todos os casos observa-se o mesmo comportamento qualitativo, podendo as curvas ser descritas usando duas rectas, uma para valores baixos e outra para elevados de Θ . Ambas as rectas possuem declives diferentes, maior na zona de valores baixos de Θ , significando que o comportamento observado nas duas zonas é diferente. Observa-se que o valor do declive das rectas nas mesmas zonas é pouco dependente de N_x , indicando que são as características geométricas da rede que controlam os mecanismos de transporte de massa

na rede. Todas as curvas possuem um máximo para $\Theta \approx 0.57$, independente de N_x . Este ponto corresponde também à intersecção entre as duas rectas e é aproximadamente igual a Θ_B . No início da simulação de transporte de massa, o número de linhas activas da rede é proporcional ao tempo adimensional de simulação, correspondendo à propagação da perturbação de traçador ao longo da rede. Assim, a percentagem de linhas activas na rede aumenta com o tempo de simulação, visto que os elementos próximos da entrada do fluido na rede ainda não alcançaram condições de saturação. Esta situação pode ser vista como a propagação da onda correspondente à influência da perturbação de traçador, variando linearmente o número de linhas activas.

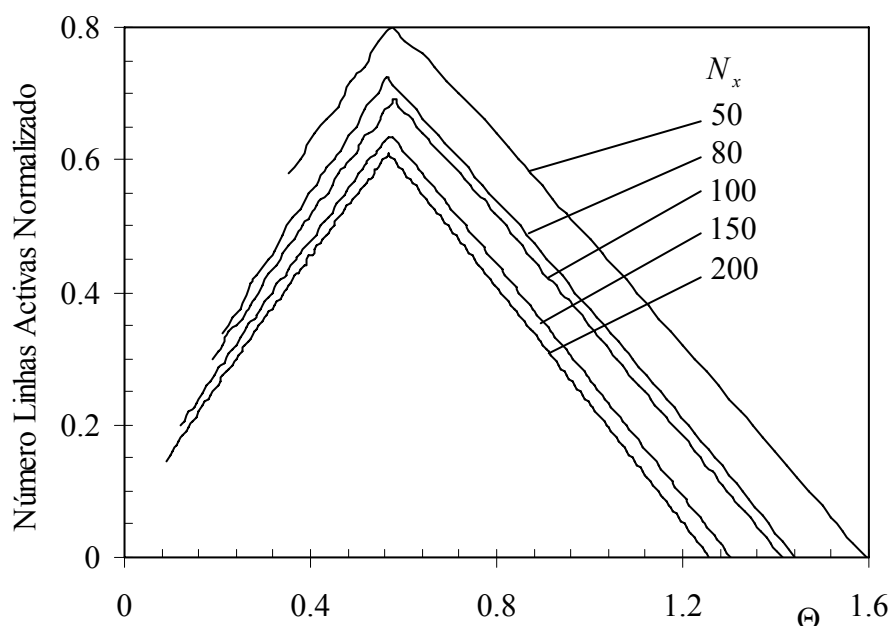


Figura 5.29 Número de linhas activas normalizado por N_x em função do tempo adimensional de simulação para diferentes valores de N_x , para redes com $N_y = 10$ e $\sigma_D = \sigma_D = 0.05$.

Quando o tempo de simulação é igual a Θ_B , a influência da perturbação alcança a saída de fluido na rede. Se $\Theta > \Theta_B$, as câmaras começam a saturar, da entrada para a saída, reduzindo o número de linhas activas. Quando alcançam um valor igual a zero, todos os elementos da rede atingiram as condições de saturação, deixando de ser necessário resolver as equações de balanço material dos elementos da rede. Esta possibilidade foi tomada em conta como um critério de paragem no algoritmo implementado (ver Secções 5.3.4 e 5.3.5.2).

O declive da zona linear para valores elevados de Θ é inferior ao da zona correspondente a valores baixos de Θ . Este facto permite concluir que a onda correspondente à influência da

perturbação se desloca mais depressa que a onda resultante da verificação das condições de saturação nos elementos da rede. A primeira onda desloca-se com uma velocidade proporcional à velocidade superficial do escoamento, pois está directamente relacionada com os tempos de chegada do traçador nas câmaras da rede, enquanto o deslocamento da segunda onda depende do comportamento transiente das câmaras e da saturação nestas.

Comparando as curvas apresentadas na Figura 5.29, observa-se que a percentagem de linhas activas diminui com o aumento de N_x . Este facto poderia levar a pensar erroneamente que para valores mais elevados de N_x as dimensões reais da zona em que a influência da perturbação se faz sentir diminuem. Esta conclusão é contrária ao comportamento observado experimentalmente em leitos de enchimento, observando-se em particular para perturbações em impulso, que quanto maior é o comprimento de um meio poroso no sentido de escoamento mais larga é a resposta e menor o seu valor máximo (Han *et al.*, 1985). Para confirmar se a descrição do transporte de massa através da rede de elementos verifica este aspecto, são apresentadas na Figura 5.30 as curvas do número de linhas activas não normalizado para os mesmos casos apresentados na Figura 5.29. Comparando as curvas apresentadas nas duas figuras, observa-se o mesmo comportamento qualitativo em função de Θ , em particular para a localização do máximo em todas as curvas.

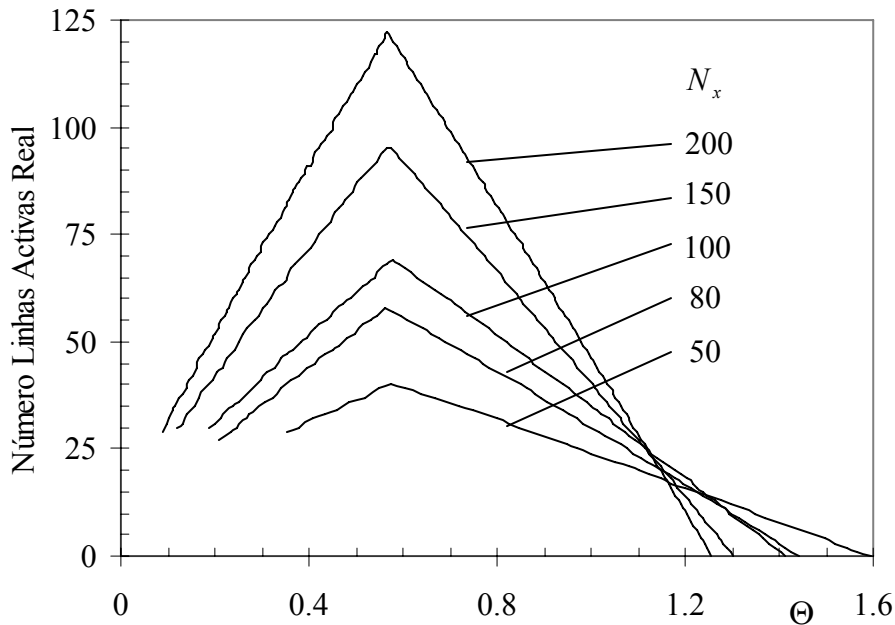


Figura 5.30 Número de linhas activas em função do tempo adimensional de simulação para diferentes valores de N_x , em redes com $N_y = 10$ e $\sigma_D = \sigma_D = 0.05$.

No entanto, observa-se que para $\Theta < 1$, o número de linhas activas não normalizado aumenta com N_x , tanto mais rápido quanto maior o número de linhas de câmaras da rede. Para $\Theta > 1$,

observa-se o comportamento contrário. No entanto, a dependência do número de linhas activas real em função de N_x varia de acordo com o comportamento observado experimentalmente.

Os valores dos declives das diferentes curvas apresentados na Figura 5.29 são independentes de N_x . Para determinar a influência das características geométricas da rede e dos seus elementos, foram efectuadas simulações usando redes 100×30 . Foram considerados dois valores de d/D : 0.50 e 0.75; e dois conjuntos de valores de σ_D e σ_d . Na Figura 5.31 é apresentado o número de linhas activas normalizado por N_x obtido em cada uma das simulações. Comparando com os resultados anteriores, observa-se que o valor máximo depende agora de σ_D , σ_d e d/D , em particular deste último. Quanto maiores forem σ_D e σ_d menor é o valor de Θ em que se observa o valor máximo. Valores mais elevados do desvio padrão correspondem a distribuições de velocidades nos canais mais largas, obtendo-se então valores mais baixos de Θ_B para igual d/D .

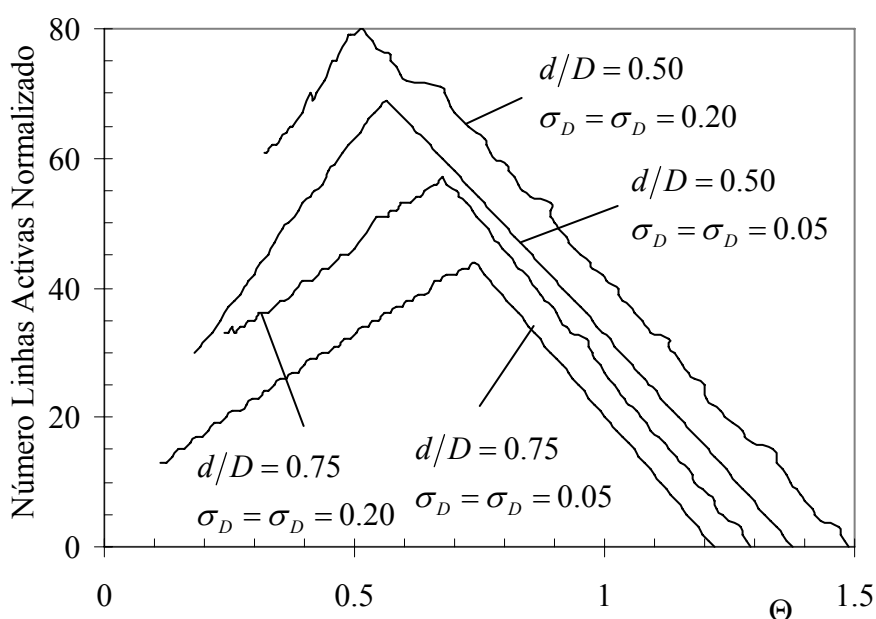


Figura 5.31 Número de linhas activas normalizada por N_x em função do tempo adimensional de simulação para redes 100×30 , para diferentes d/D , σ_D e σ_d .

Comparando as curvas obtidas para iguais valores de d/D , observa-se que os valores do declive não dependem significativamente dos valores de σ_D e σ_d . Para as curvas correspondentes a valores elevados de Θ é possível observar mais irregularidades para

$\sigma_D = \sigma_d = 0.20$, resultado da estrutura geométrica mais irregular nesse caso. Como a distribuição de tempos de residência nas câmaras nessa situação é mais larga, vai existir maior variabilidade no tempo necessário para as câmaras numa dada linha alcançarem as condições de saturação. Assim, o número de linhas activas reduz-se mais lentamente quanto maiores forem os valores de σ_D e σ_d .

O posicionamento diferente do valor máximo reflecte a influência de d/D no comportamento da rede. Aumentando o valor deste parâmetro a influência do comportamento das câmaras diminui, reduzindo assim a parte da rede em que se observam variações significativas na concentração de traçador. Nestas condições a mistura de traçador nas câmaras é menos significativa para o transporte de massa na rede, como se pode observar comparando as curvas obtidas para valores elevados de Θ , em que se observam menos irregularidades para $d/D = 0.75$.

5.4.2 Influência das características do escoamento

Os resultados das secções anteriores mostraram que as características geométricas da rede influenciam significativamente o transporte de massa através da rede. Além destes, no modelo desenvolvido têm também de ser tomadas em conta as características do escoamento. O comportamento dos elementos da rede é controlado pelos valores de τ_i e τ_j , que tomam em conta simultaneamente as características geométricas e de escoamento da rede, reflectindo-se esta influência nos valores de parâmetros como Pe e Θ_B .

Torna-se necessário então analisar o efeito dos parâmetros que influenciam o escoamento nos valores previstos pelo simulador de transporte de massa. Os mais significativos são a queda de pressão macroscópica imposta na rede, ΔP_T , analisada na Secção 5.4.2.1, e o somatório das constantes associadas às entradas e saídas de fluido das câmaras, $\sum K_j$, analisada na Secção 5.4.2.2. O estudo das características geométricas da rede e dos seus elementos, que também são factores fundamentais no comportamento previsto pelo modelo, é efectuada nas Secções 5.4.3 e 5.4.4.

5.4.2.1 Influência do regime de escoamento macroscópico na rede

O valor da queda de pressão macroscópica imposta na rede, ΔP_T , é o factor mais importante na determinação do regime de escoamento observado na rede ao nível macroscópico. Como o

caudal volumétrico é proporcional à queda de pressão, se as características geométricas da rede forem fixadas, este parâmetro vai influenciar Pe , e eventualmente Θ_B se as características locais do campo de escoamento também dependerem deste factor.

No Capítulo 4 concluiu-se que o modelo permite descrever correctamente o escoamento através de um meio poroso se a influência das expansões e contracções do escoamento originadas pelas ligações entre as câmaras e os canais for tomada em conta. Foi possível definir três regimes de escoamento. Para valores baixos de ΔP_T , correspondentes a valores baixos do número de Reynolds, o escoamento é laminar e o q_T é proporcional a ΔP_T . Nestas condições, a resistência ao escoamento das ligações entre as câmaras e os canais é desprezável. Aumentando ΔP_T , a velocidade do fluido nos canais aumenta e a influência das ligações entre as câmaras e os canais passa a ser significativa. Estes efeitos são significativos desde que $Re_j > 1$.

As condições de escoamento não modificam apreciavelmente o tempo e a memória necessárias para efectuar a simulação do transporte de massa através da rede. Variações nos valores de q_j vão influenciar os valores de τ_j e τ_i do mesmo modo. De acordo com a equação de balanço material global nas câmaras, o aumento dos caudais nos canais, diminuindo os valores de τ_j , resulta também no aumento dos caudais de entrada numa câmara qualquer da rede, aumentando consequentemente os valores de Q_i e diminuindo os valores de τ_i . A relação entre as distribuições de valores de τ_j e τ_i não depende apreciavelmente das condições de escoamento, resultando em discretizações espaciais nos canais similares. Estas conclusões são válidas desde que as características geométricas da rede e dos seus elementos sejam fixadas.

Na Figura 5.32 são comparadas as curvas $E(\Theta)$ previstas pelo simulador de transporte de massa para vários valores de ΔP_T . Os valores foram seleccionados de forma a ser possível comparar os resultados previstos para os regimes de escoamento. Foram consideradas redes com 20×20 , $d/D = 0.5$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$. Observa-se que as curvas da $E(\Theta)$ são pouco sensíveis a ΔP_T , indicando que as características do regime de escoamento são pouco significativas no transporte de massa através da rede. No entanto, comparando as curvas da $E(\Theta)$ é possível observar que a influência dos mecanismos convectivos de transporte de massa serão mais significativos quando o escoamento é não linear.

Para esclarecer quais são os efeitos reais das características do escoamento no comportamento da rede a melhor forma passa por representar os valores de Θ_B e Pe em função de Re^* , número de Reynolds modificado, de modo a incluir a influência da porosidade da rede. A definição deste número adimensional requer a definição de um diâmetro equivalente das partículas, D_p . De acordo com os modelos geométricos descritos na Secção 3.5, como primeira aproximação é possível usar $D_p = l_0$, permitindo a comparação directa entre os diferentes casos estudados.

A escolha do número de Peclet em vez do coeficiente de dispersão axial tem como objectivo simplificar a análise dos resultados. De acordo com as conclusões da Secção 5.3.8 e os resultados apresentados na Figura 5.32, Pe é uma função fraca das condições de escoamento. Com base na Equação 5.44, é possível concluir que D_L vai depender das condições de escoamento, em particular vai ser proporcional ao valor de ΔP_T imposto na rede, tornando a visualização da influência das características do escoamento difícil. Neste trabalho, sempre que N_x é mantido constante a análise dos resultados é efectuada usando sobretudo os valores previstos de Pe e Θ_B . Caso contrário, a análise baseia-se nos valores previstos de D_L .

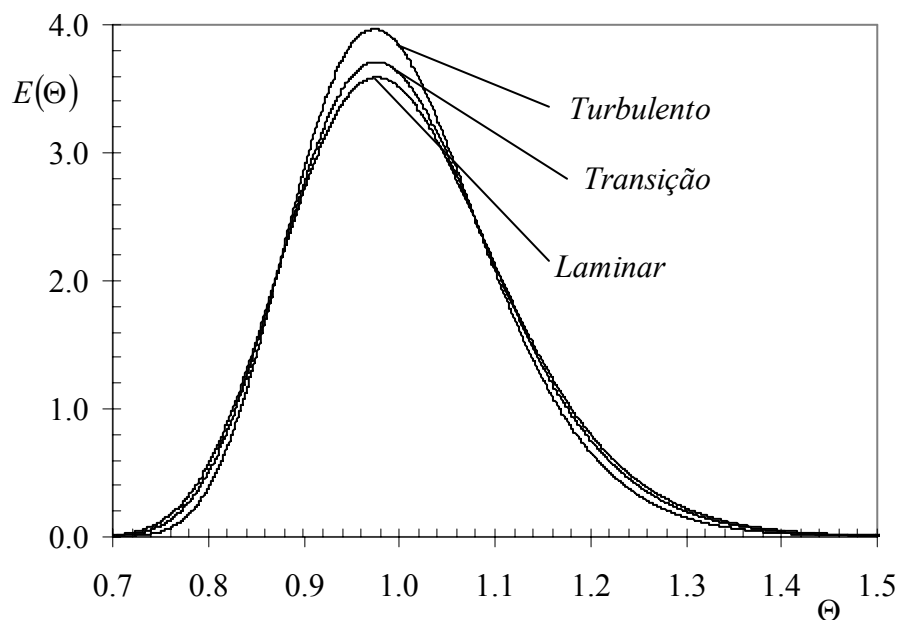


Figura 5.32 Distribuições de tempos de residência normalizadas para diferentes regimes de escoamento em redes 20×20 , $d/D = 0.5$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$.

Na Figura 5.33 são apresentadas os valores previstos de Pe^* e Θ_B^* em função de Re^* para redes com as mesmas condições das consideradas na Figura 5.32. Para determinar se as

variações dos valores se devem a alterações do campo de escoamento são apresentados também os valores de F_V em função de Re^* . Observa-se o mesmo comportamento em função de Re^* para os parâmetros Pe^* e Θ_B^* . Em particular, existem dois patamares, correspondentes às zonas limites de escoamento linear, em que os valores de Re^* são baixos, e não linear, em que Re^* toma valores elevados.

Os resultados apresentados na Figura 5.33 mostram que existem diferenças no comportamento hidrodinâmico da rede para os regimes de escoamento linear e não linear. Os maiores valores de Pe para condições de escoamento não linear mostram que os mecanismos convectivos de transporte de massa são mais significativos nessas condições.

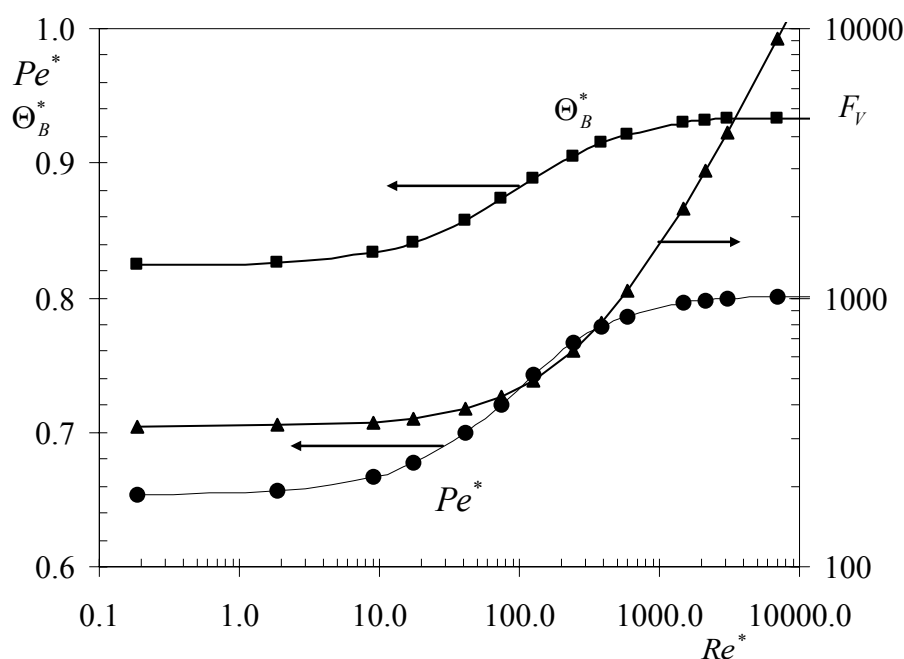


Figura 5.33 Comparação das curvas de F_V , Pe^* e Θ_B^* em função de Re^* .

Na Secção 4.5.3.2 foi analisada a influência do regime de escoamento nas distribuições de velocidades do fluido nos canais oblíquos. Os resultados mostram que a distribuição de valores de v_j para escoamento não linear é mais apertada quando comparada com a mesma distribuição obtida para escoamento em regime linear. Além destes aspectos, as distribuições são mais gaussianas para escoamento não linear, sendo os aspectos referidos tanto mais significativos quando mais elevado for d/D . Assim, a mistura do traçador derivada das irregularidades do campo de escoamento vai ser menos marcada para escoamento não linear

perfeitamente desenvolvido. A importância relativa da dispersão vai diminuir e, como o número de Peclet representa a razão entre a importância relativa do transporte de massa por convecção e por dispersão, Pe vai ser mais elevado para condições de escoamento não linear, de acordo com os resultados apresentados na Figura 5.33.

Os resultados obtidos permitem concluir que para uma rede não uniforme o regime de escoamento influencia o transporte de massa na rede. No entanto, esta deve ser analisada simultaneamente com as características geométricas da rede e dos seus elementos, em particular os valores de d/D , σ_D , σ_d , e N_x .

Na Figura 5.34 são comparadas as curvas de Pe e Θ_B em função de Re^* para diferentes valores de d/D , para redes com 20×20 e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$. Comparando as curvas obtidas conclui-se que d/D tem uma influência decisiva no comportamento da rede na gama completa de regimes de escoamento. Quanto maior for d/D mais acentuada é a influência observada das características do escoamento.

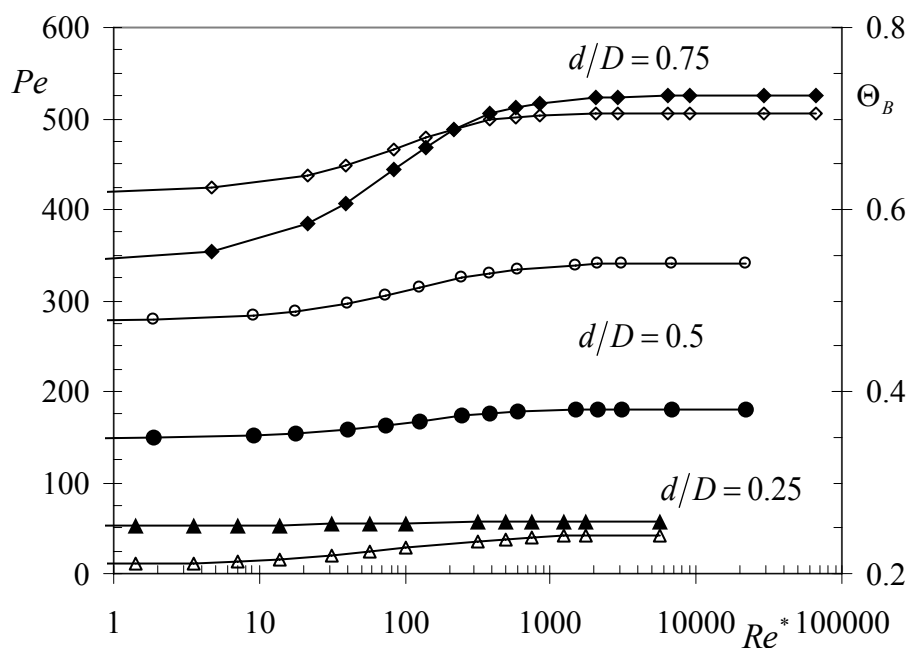


Figura 5.34 Comparação das curvas de Pe e Θ_B em função de Re^* para três valores de d/D . Símbolos a cheio representam valores de Pe e restantes símbolos representam valores de Θ_B

Este facto deve-se à maior importância da distribuição de velocidades nos canais quanto maior for a importância dos mecanismos de transporte de massa por convecção através da rede. Quaisquer alterações no campo de escoamento devido a mudanças no regime de

escoamento são mais sentidas nessas condições, visto que é a distribuição de velocidades nos canais o factor mais significativo na mistura de traçador na rede. Quando d/D é baixo, a mistura e o comportamento da rede são controlados pelas câmaras, sendo a distribuição de velocidades nos canais pouco significativa. Nestas condições, os valores de Pe e Θ_B são praticamente independentes das características do escoamento, como se pode observar na Figura 5.34.

Outro aspecto importante a tomar em consideração são os valores de σ_D e σ_d . Na Figura 5.35 são comparados os valores previstos de Pe e Θ_B em função de Re^* para dois conjuntos de valores de σ_D e σ_d . Foram consideradas redes 80×20 e $d/D = 0.5$. Observa-se que os valores de Pe e de Θ_B baixam com o aumento de σ_D e σ_d . Aumentar os valores destes parâmetros traduz-se em campos de escoamento mais irregulares (ver Secção 5.4.4.2), aumentando a dispersão de massa, resultando em valores de Pe e Θ_B mais baixos.

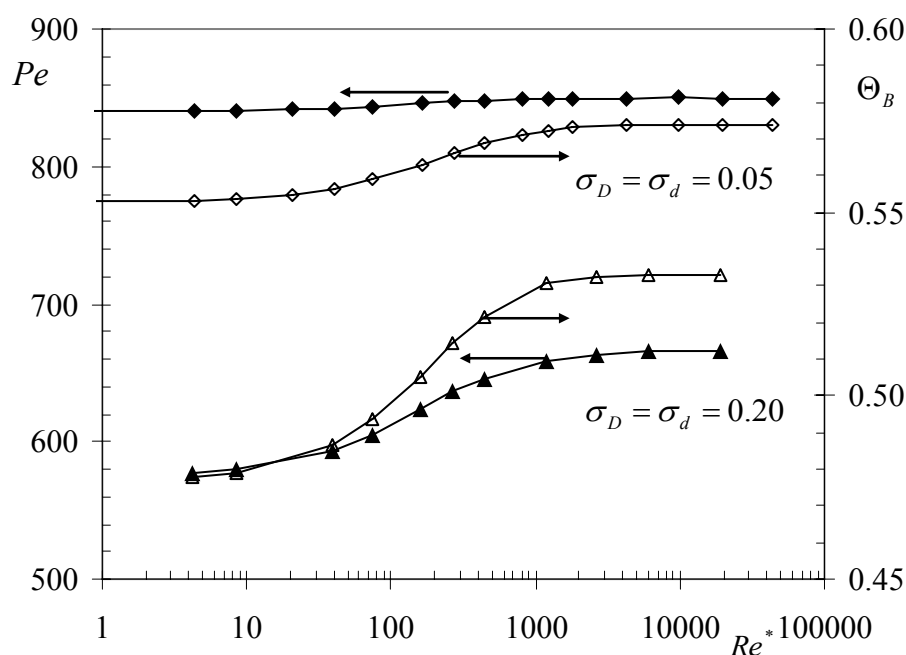


Figura 5.35 Comparação das curvas de Pe e Θ_B em função de Re^* para diferentes valores de σ_D e σ_d : a) Pe ; b) Θ_B .

Por outro lado, a gama de variação dos valores destes parâmetros diminui com a redução de σ_D e σ_d , indicando que o campo de escoamento é mais regular e que o comportamento da rede se está a aproximar do comportamento esperado para uma rede uniforme, em que Pe e Θ_B são independentes das condições de escoamento na rede (ver Secção 5.3.8). Estes aspectos são analisados mais de perto na Secção 5.4.3.3.

Os resultados obtidos mostram também que os valores de D_L previstos também deverão ser função das características do escoamento. Usando os valores de Pe é possível determinar o valor do coeficiente de dispersão longitudinal e analisar a influência do escoamento e das características geométricas da rede e dos seus elementos. Como na definição de Re^* , assume-se que $D_p \approx l_0$ no cálculo de D_L , assegurando que a análise se baseia na definição dos mesmos parâmetros.

Na literatura é comum representar D_L dividido pela difusividade molecular em função de Pe_M , número de Peclet molecular, em que D_L é substituído pela difusividade molecular, D_M , do traçador no fluido em repouso, ou seja

$$Pe_M = Pe \frac{D_L}{D_M} \quad (5.67)$$

Os efeitos do transporte de massa por difusão não foram tomados em conta no modelo desenvolvido neste trabalho. Como a modelização do escoamento assume que o fluido é incompressível, deverá ser usado um valor da difusividade molecular correspondente a líquidos, $D_M \approx 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$.

Na Figura 5.36 são comparadas as curvas da razão D_L/D_M em função de Pe_M usando coordenadas logarítmicas, para três valores de d/D em redes 20×20 e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$. Os resultados obtidos são descritos por três rectas, indicando que D_L/D_M em função de Pe_M pode ser descrito usando uma lei de potência, na forma $D_L/D_M = A_L Pe_M^n$. Em qualquer dos casos estudados não se observou qualquer mudança do comportamento qualitativo dos valores previstos de D_L/D_M em função de Pe_M^n para os diferentes regimes de escoamento.

Os valores das constantes obtidas para os três valores de d/D são apresentados na Tabela 5.2, observando-se que os valores de A_L e n diminuem com o aumento de d/D . As variações são no entanto pouco significativas. Em particular, $n \approx 1$ em todos os casos estudados, observando-se que A_L é função do valor de d/D . As maiores diferenças observam-se para $d/D = 0.75$, caso em que a convecção (e consequentemente os canais) é o mecanismo principal de transporte de massa na rede. Quando menor for d/D mais a rede se aproxima de

um modelo de tanques agitados em série, não se observando tanto os efeitos das velocidades do fluido nos canais.

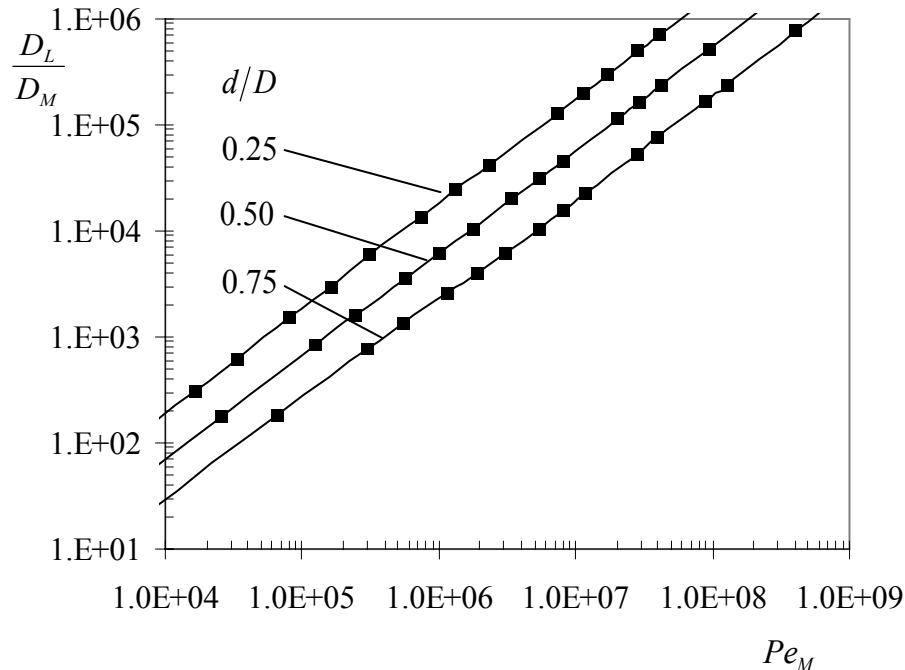


Figura 5.36 Curvas da razão entre o coeficiente de dispersão longitudinal e a difusividade molecular em função do número de Peclet molecular.

Tabela 5.2 Valores das constantes da relação $D_L/D_M = A_L Pe_M^n$ para os três valores de d/D considerados na Figura 5.36.

d/D	A_L	n
0.25	0.0203	0.9919
0.50	0.0084	0.9763
0.75	0.042	0.9568

Este comportamento é observado experimentalmente desde que $Pe_M > 300$ (Perkins, 1962; Bear, 1972; Sahimi, 1995; Yu *et al.*, 1999), condições em que o transporte de massa por convecção é dominante. Este aspecto é importante na comparação dos valores previstos pelo modelo com dados experimentais e correlações publicadas na literatura pois poderá limitar a gama de utilização do modelo. Por outro lado, os resultados obtidos justificam a utilização de valores elevados de ΔP_T nas simulações, de modo a assegurar que os mecanismos de transporte de massa por convecção são dominantes.

Na Secção 5.3.8 concluiu-se que uma rede uniforme é equivalente a um modelo de tanques em série com atrasos entre estes, desde que os tempos de passagem do modelo de tanques agitados tome em conta as características do escoamento. Os resultados obtidos permitem concluir também que modelos de tanques perfeitamente agitados em série são adequados quando a convecção é o mecanismo principal para o transporte de massa na rede, de acordo com o comportamento previsto pela Equação 5.66 (ver Secção 5.3.8.2). O modelo proposto pode ser visto então como um modelo desse tipo mas em que a irregularidade e a interconectividade de um meio poroso real são tomadas em conta explicitamente.

Os valores de σ_D e σ_d também deverão influenciar os valores das constantes A_L e n . Com base nos resultados apresentados na Figura 5.35, para $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$ obtém-se $A_L = 0.0012$ e $n = 0.9988$, e para $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$ obtém-se $A_L = 0.0022$ e $n = 0.9797$. De acordo com os resultados da Secção 5.3.8.2, é possível mostrar que para redes uniformes $n = 1$ e que $A_L = 1/[2N_x(1 + \gamma)^2]$ (ver Apêndice C.5). Para as características das redes consideradas na figura anterior, $A_L = 0.0012$. Os resultados mostram que a aproximação de rede uniforme é adequada mesmo quando as distribuições das dimensões características dos elementos da rede não são pontuais.

Ao aumentar os valores de σ_D e σ_d o campo de escoamento torna-se mais irregular, resultando em valores de n mais baixos e de A_L mais elevados. Os resultados mostram que as duas constantes podem ser usadas para caracterizar a influência no transporte de massa das características geométricas da rede e do escoamento no seu interior. Nas Secções 5.4.3.3 e 5.5.2 estes aspectos serão analisados mais em detalhe.

A forma de representação anterior tem como problema principal a dependência de A_L nas dimensões da rede, sendo apenas adequada para a comparação directa entre resultados quando a dimensão do meio poroso segundo a direcção principal do escoamento for constante. Na literatura é também usado um número de Peclet com o diâmetro equivalente das partículas do meio, na forma

$$Pe_p = \frac{v_T D_p}{D_M} = Pe \frac{D_L}{D_M} \frac{D_p}{L_X} \quad (5.68)$$

De acordo com a expressão anterior, a constante de proporcionalidade entre D_L/D_M e Pe_p , A_p , é definida pelas seguintes expressões (ver Apêndice C.5 para a dedução desta relação)

$$A_p = \frac{L_x}{2N_x(1+\gamma)^2 D_p} \approx \frac{N_x + 1}{N_x} \frac{(D + l_0 - 2h)\cos\theta}{2D_p(1+\gamma)^2} \quad (5.69)$$

em que se tomou em conta a forma de cálculo de L_x (ver Secção 3.4.6). Se N_x for elevado, A_p tende para um valor constante, função apenas das características do meio poroso.

De acordo com os resultados do modelo geométrico (ver Secção 3.5), $D_p \approx l_0$. No entanto, a interdependência dos valores médios de D , d e l_0 nos valores de D_G e ε do meio poroso, situação tomada em conta pelo modelo geométrico, não permite a representação dos resultados desta secção usando Pe_p .

5.4.2.2 Influência das constantes associadas a entradas e saídas de fluido nas câmaras

Em condições de escoamento não linear perfeitamente desenvolvido, $\sum K_j$ é o parâmetro que controla o escoamento. Nas Secções 4.6 e 4.7 mostrou-se que, através da comparação entre os valores previstos pelo simulador hidrodinâmico usado em conjunto com o modelo geométrico e dados experimentais $\sum K_j$ deverá encontrar-se entre 2.0 e 2.5.

Na Figura 5.37 são comparadas as curvas $E(\Theta)$ previstas pelo simulador de transporte de massa para escoamento não linear perfeitamente desenvolvido, para os seguintes valores de $\sum K_j$: 1, 2, 3 e 5. Foram consideradas redes 20×20 , $d/D = 0.5$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$. As curvas obtidas são praticamente idênticas, mostrando que a influência de $\sum K_j$ nos valores de Pe previstos pelo modelo é muito pouco significativa. De acordo com a definição do número de Peclet, como a velocidade do fluido é inversamente proporcional ao valor de $\sum K_j$ a mesma dependência vai ser observada para D_L , desde que as características da rede e dos seus elementos se mantenham.

Na Figura 5.37 mostra-se que quando os resultados do simulador de transporte de massa são expressos na forma de $E(\Theta)$ os parâmetros que controlam a resistência dos ramos da rede não são significativos. No entanto, como $\sum K_j$ influencia a resistência dos ramos da rede, deverá ser possível observar alterações nas respostas não normalizadas.

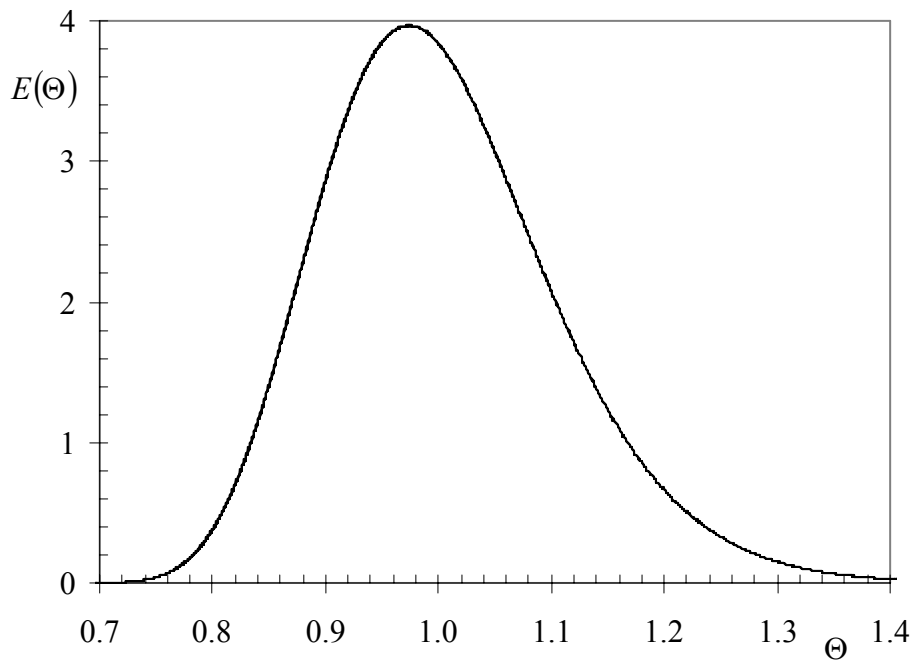


Figura 5.37 Comparação das curvas da $E(\Theta)$ previstas pelo simulador de transporte de massa para vários valores de $\sum K_j$, para redes 20×20 , $d/D = 0.5$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$.

Na Figura 5.38 estas são apresentadas e comparadas para os diferentes valores de $\sum K_j$ usados anteriormente. Observa-se que quanto maior for $\sum K_j$ maior é τ_G , de acordo com as conclusões anteriores de que o aumento de $\sum K_j$ aumenta a resistência dos ramos da rede e reduz o valor da velocidade superficial da rede, deslocando-se a resposta para tempos mais longos. Como as características geométricas da rede e dos elementos não variam, o tempo de passagem global do fluido na rede aumenta. Por outro lado, o comportamento qualitativo das diferentes curvas é similar, traduzindo-se em distribuições de tempos de residência praticamente iguais.

O mesmo comportamento é observado para regime de escoamento linear e transição, apesar de no primeiro a influência de $\sum K_j$ ser desprezável. Assim, não são apresentados resultados para estes regimes de escoamento.

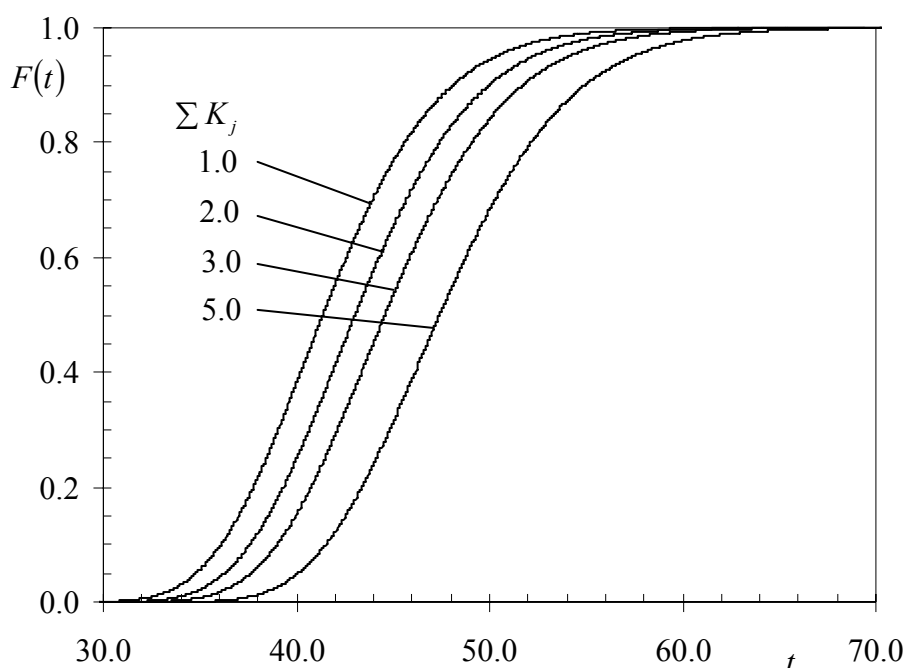


Figura 5.38 Comparação das curvas da $F(t)$ previstas pelo simulador de transporte de massa para vários valores de ΣK_j , para redes 20×20 , $(d/D) = 0.5$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$.

5.4.3 Influência das características da rede

Os resultados das secções anteriores permitem concluir que as características geométricas da rede e dos seus elementos são essenciais para caracterizar o transporte de massa através da rede de elementos. Tomando em conta os resultados do simulador hidrodinâmico, é possível definir quais serão as características geométricas da rede mais importantes para o comportamento da rede, sendo estas listadas de seguida.

- Influência das dimensões da rede (Secção 5.4.3.1). Este parâmetro é função do número de linhas e colunas de câmaras, N_x e N_y , respectivamente. De acordo com os resultados da Secção 5.3.8, a influência de N_x é mais marcada que a influência de N_y . Ao contrário do comportamento hidrodinâmico da rede, em que o valor de permeabilidade tende para um valor constante com o aumento de N_x , de acordo com as conclusões da Secção 5.3.8, os valores de Pe e Θ_B vão depender do comprimento da rede segundo o sentido principal de escoamento. O valor de N_y vai influenciar a mistura lateral de fluido e a forma como o perfil de concentrações é uniformizado. A influência deste parâmetro deverá ser mais

marcada para parâmetros dependentes das características geométricas da rede, como por exemplo D_L .

- Influência do tipo de fronteiras da rede (Secção 5.4.3.2). Ao contrário da modelização de escoamento, as diferentes distribuições dos números de coordenação da rede associadas aos lados da rede vão provocar alterações na forma como se efectua a mistura lateral de traçador na rede, reflectindo-se na resposta à saída da rede.
- Rede uniforme versus rede não uniforme (Secção 5.4.3.3). As características de escoamento numa rede uniforme permitem simplificar a análise e a obtenção de expressões dos parâmetros que descrevem o transporte de massa através da rede. No entanto, quando as distribuições das dimensões características dos elementos da rede não são pontuais e/ou as fronteiras não são periódicas, o campo de escoamento é não regular, o que se vai reflectir também na evolução do campo de concentrações na rede.
- Influência da distribuição dos números de coordenação das câmaras, C_i (ver Secção 5.4.3.4). Nesta secção vai ser analisada em particular a influência da presença de canais horizontais nos valores previstos pelo modelo e no esforço necessário para resolver o sistema de equações de balanço material.

Além dos parâmetros listados existem ainda outros que influenciam as características geométricas da rede mas que se verificou que a sua influência no transporte de massa é pouco significativa. Estes são estudados na Secção 5.4.1.5, em particular θ e ε .

5.4.3.1 Influência das dimensões da rede

Os dois parâmetros que determinam as dimensões da rede são o número de linhas e colunas de câmaras da rede, N_x e N_y , respectivamente. Apesar da analogia entre a rede de elementos e o modelo de reactores perfeitamente agitados com atrasos associados ser rigorosamente válida apenas para redes uniformes (ver Secção 5.3.8), esta pode ser invocada para concluir que o factor mais importante é N_x , devendo N_y influenciar a mistura lateral de traçador e a uniformização do campo de concentração.

Para o algoritmo implementado, a influência de N_x e N_y está directamente relacionada com o número total de elementos da rede, em particular o número de câmaras. O seu aumento traduz-se em sistemas de equações diferenciais a resolver maiores, aumentando o tempo de

simulação e a memória necessária para a simulação. A aplicação das condições de saturação permite reduzir apreciavelmente o tempo de simulação necessário, em particular quando o d/D é elevado. Por outro lado, de acordo com as conclusões da Secção 5.3.8, aumentar N_x resulta no aumento de importância dos mecanismos convectivos de transporte de massa. Assim, a resposta vai ser tanto mais apertada quando maior N_x , obrigando ao uso de valores mais baixos de t_{max} . A selecção do valor de t_{max} deve portanto tomar em conta as dimensões da rede, além das dimensões características dos elementos da rede (ver Secção 5.4.4.1).

Na prática, observou-se que a partir de um dado valor, dependente também dos valores de d/D , σ_D e σ_d , não é possível simular o transporte de massa na rede com os recursos computacionais disponíveis. No entanto, neste trabalho preferiu-se usar redes de pequenas dimensões, em particular N_x , visto permitirem visualizar e analisar a influência dos diferentes parâmetros da rede e do escoamento nos valores previstos pelo simulador de transporte de massa. As características geométricas dos elementos da rede também influenciam o desempenho e as necessidades do algoritmo implementado, sendo estes aspectos analisados na Secção 5.4.4.

Para o comportamento previsto pelo modelo, de acordo com a Equação 5.64 o valor do número de Peclet vai ser proporcional a N_x . Assim, é esperado que as curvas $E(\Theta)$ se tornem cada vez mais simétricas em torno de $\Theta = 1$ com o aumento de N_x , reduzindo-se do mesmo modo a dispersão associada a estas. A forma como as curvas tendem para um comportamento Gaussiano depende das características geométricas e das dimensões características dos elementos da rede, como se concluiu na Secção 5.3.8.3.

Na Figura 5.39 são comparadas as curvas $E(\Theta)$ previstas pelo simulador de transporte de massa para diferentes valores de N_x . Foram usadas redes com $N_y = 30$, $d/D = 0.5$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$. Observa-se que as curvas tendem para um comportamento Gaussiano, no sentido em que as curvas se tornam cada vez mais simétricas em torno do valor máximo. Por outro lado, o valor de Θ em que a curva $E(\Theta)$ tem o valor máximo tende para 1. Os desvios observados para valores baixos de N_x são devidos ao desenvolvimento do campo de escoamento e à mistura do traçador lateral. Nestas condições a influência da dispersão de massa, é mais significativa, resultando no desvio das curvas de $E(\Theta)$ do comportamento Gaussiano limite.

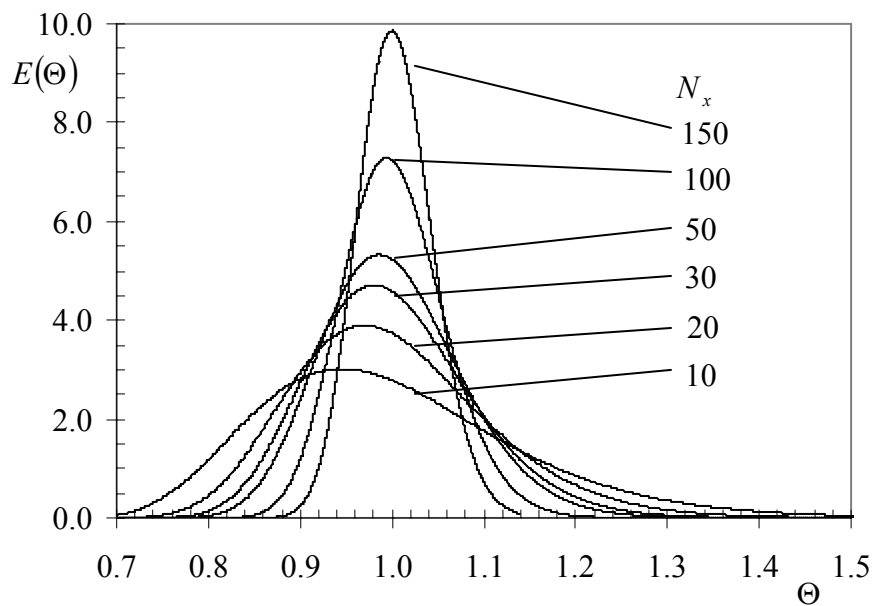


Figura 5.39 Comparação das curvas de $E(\Theta)$ em função de N_x para redes com $N_y = 30$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$.

A comparação directa das curvas $E(\Theta)$ efectuada na Figura 5.39 não permite tirar conclusões sobre a dependência de parâmetros como Pe . Na Figura 5.40 são comparados os valores do número de Peclet previstos assumindo que a rede é uniforme e os obtidos com base nos resultados apresentados na Figura 5.39. Também são incluídos na figura os valores previstos nas mesmas condições mas com $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$. Observa-se que para valores baixos do desvio padrão das distribuições das dimensões características dos elementos da rede, a utilização de uma rede uniforme é adequada.

A análise da Figura 5.39 pode também levar a concluir que, como a influência da dispersão de massa diminui com o aumento de N_x , a banda de traçador é cada vez menor, correspondendo a respostas mais apertadas. No entanto, esta conclusão contradiz o comportamento observado experimentalmente (Han *et al.*, 1985, Drazen *et al.*, 1999), em que se observa que a zona “activa” da rede, no sentido em que nesta se observam as variações de concentração de traçador, é tanto mais larga quanto maiores as dimensões do meio poroso, obtendo-se respostas mais largas.

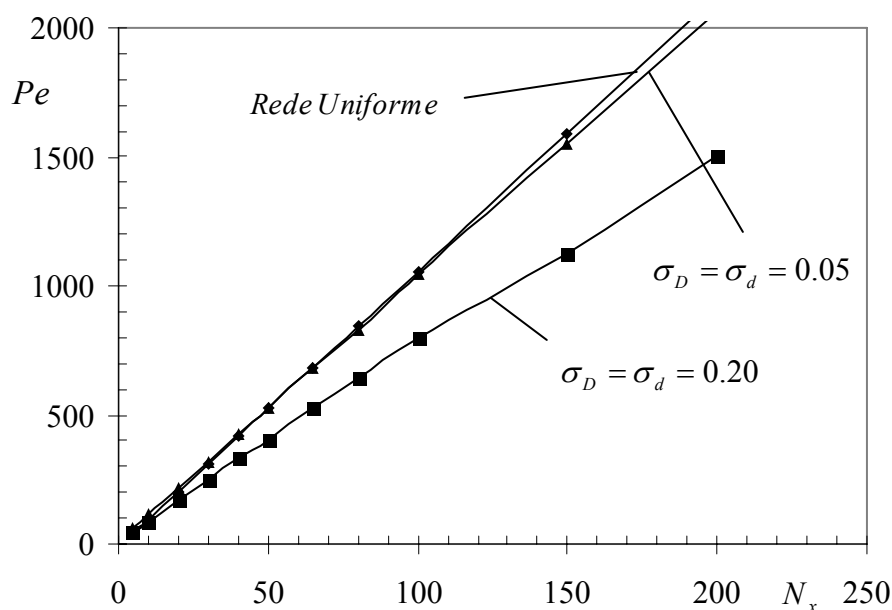


Figura 5.40 Comparação dos valores previstos de Pe em função de N_x para redes uniformes e não uniformes com diferentes valores de desvio padrão das distribuições das dimensões características dos elementos da rede.

Para confirmar se o modelo proposto prevê o comportamento qualitativo observado experimentalmente, são comparadas na Figura 5.41 as respostas não normalizadas em função de N_x para as mesmas condições usadas nas curvas $E(\Theta)$ apresentadas na Figura 5.39.

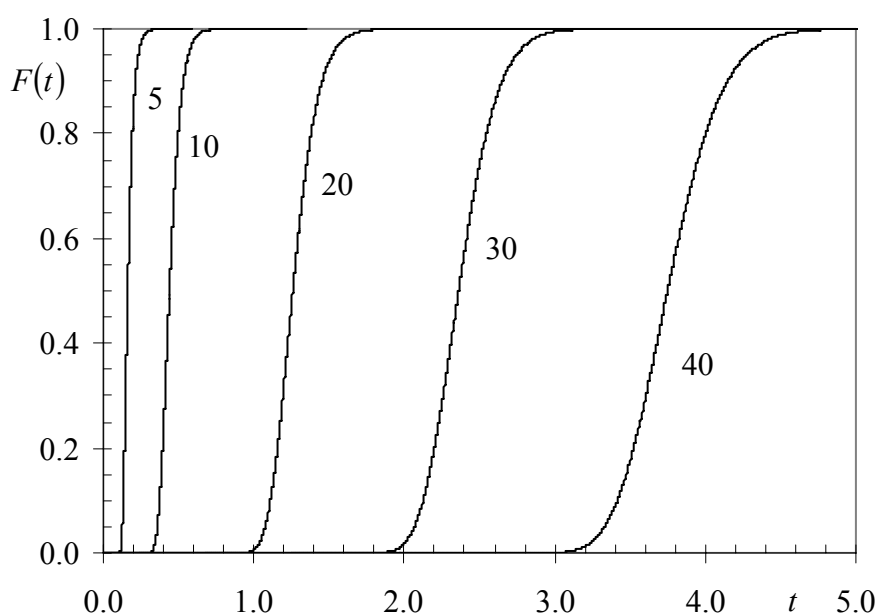


Figura 5.41 Comparação das respostas não normalizadas da rede em função do tempo para redes com $N_y = 30$ para vários valores de N_x .

Comparando as diferentes curvas, observa-se de facto que a resposta da rede alarga-se, reflexo do aumento das dimensões da zona em que se faz sentir a influência da perturbação de traçador na rede com o aumento de N_x .

Na Figura 5.42 são apresentados os valores de Θ_B^* e Pe^* (ver Secção 5.3.8.3 para a sua definição) previstos pelo simulador de transporte em função de N_x para diferentes valores constantes de N_y . Como estes dependem apenas das características geométricas dos elementos da rede, se os seus valores tenderem para valores constantes para um dado par de valores de N_x e N_y é possível concluir que os efeitos das dimensões da rede são desprezáveis. A normalização dos valores obtidos permite também comparar directamente os resultados obtidos para redes com dimensões diferentes segundo o sentido de escoamento principal na rede. De acordo com os resultados obtidos e as conclusões da Secção 5.3.8, os parâmetros da rede dependem de N_x (em particular Pe varia de forma aproximadamente linear), inviabilizando a comparação directa dos resultados. Foram consideradas redes tipo 10, $d/D = 0.5$, $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$, tendo-se incluído também os resultados apresentados nas figuras anteriores desta secção. Observa-se em todos os casos que o comportamento limite é alcançado quando $N_x \geq 100$, sendo este valor independente de N_y .

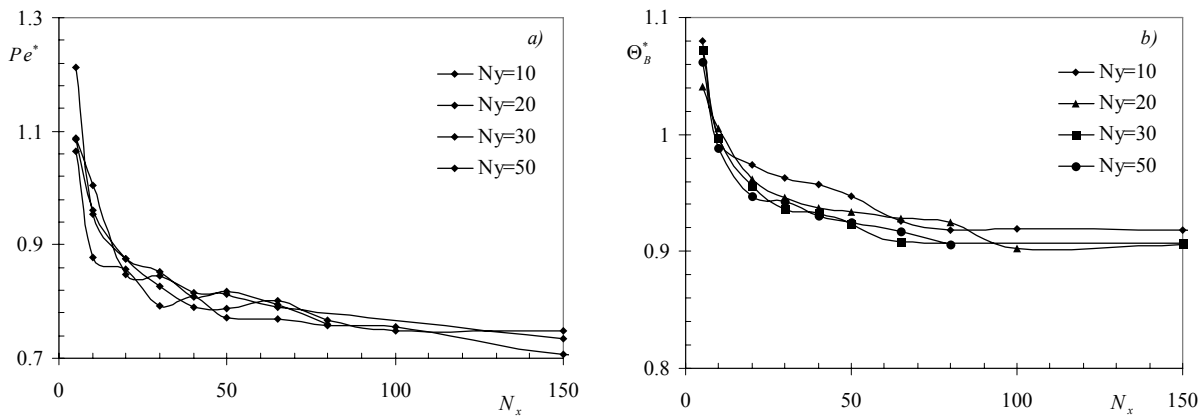


Figura 5.42 Comparação dos valores de Pe^* e Θ_B^* previstos em função de N_x para N_y constante: a) Pe ; b) Θ_B .

A influência de N_y é significativa apenas para redes pequenas. Este comportamento deve-se aos efeitos da mistura lateral de traçador, que diminui de importância com o aumento das dimensões da rede segundo o sentido de escoamento do fluido. Para redes com valores baixos de N_x e N_y obtém-se Θ_B^* e Pe^* superiores a 1, indicando que o perfil de concentração ainda

é dependente da mistura lateral de traçador. De acordo com os resultados da Secção 5.4.2.1, a irregularidade da estrutura geométrica da rede vai resultar em maior dispersão de massa, reduzindo Pe e consequentemente Pe^* . As variações observadas para Θ_B^* em função de N_x devem-se ao estabelecimento e uniformização do campo de escoamento e à redução da importância da entrada do fluido na rede. O comportamento observado para os dois parâmetros é qualitativamente similar ao observado nos valores de permeabilidade em função de N_x (ver Secção 4.5.3), mostrando que os factores que os influenciam são essencialmente os mesmos. Comparando os resultados previstos para diferentes N_y observa-se essencialmente o mesmo comportamento, concluindo-se assim que o factor mais importante é a dimensão da rede segundo o sentido principal de escoamento.

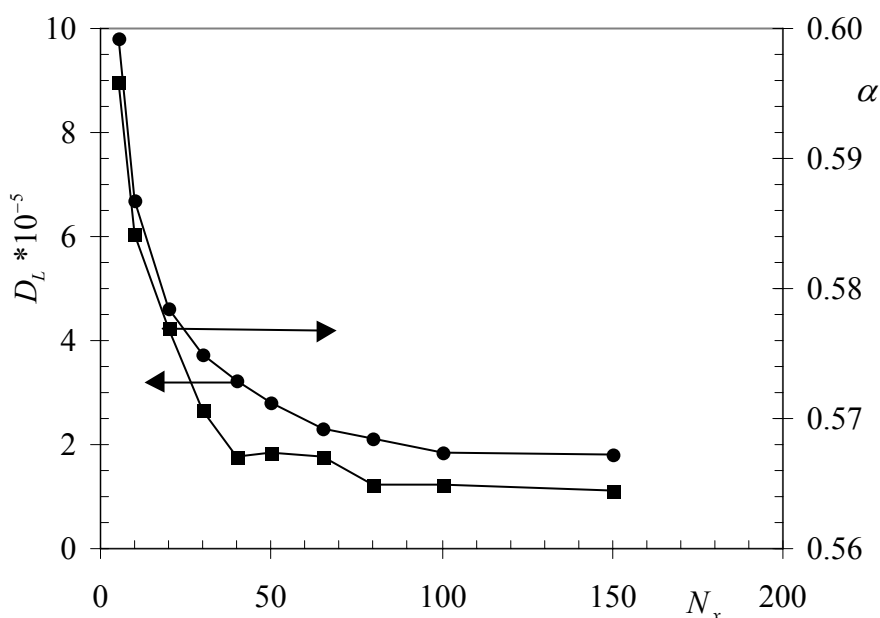


Figura 5.43 Valores de D_L e α em função de N_x para N_y constante.

Comportamento similar foi observado experimentalmente por Han *et al.* (1985) para D_L em função da distância percorrida pelo fluido segundo o sentido principal de escoamento. Para confirmar se o modelo prevê o mesmo comportamento são apresentados na Figura 5.43 os valores de D_L em função de N_x para os resultados apresentados na Figura 5.39. Também é representado α , razão entre o volume de câmaras e o volume total de vazios da rede, em função de N_x . Este parâmetro permite tomar em conta a influência da estrutura geométrica da rede nos resultados obtidos. Observa-se que D_L e α alcançam os seus valores limite sensivelmente para os mesmos valores de N_x . O comportamento na zona de valores baixos de

N_x deve-se ao reduzido número de elementos das redes nessas condições, sendo o comportamento da rede dependente das suas dimensões. Os resultados apresentados também permitem concluir que as variações observadas no comportamento da rede devem-se mais a variações na estrutura geométrica da rede, que se reflectem no escoamento e no transporte de massa.

5.4.3.2 *Influência do tipo de fronteiras da rede*

A natureza das fronteiras da rede influencia a distribuição dos números de coordenação da rede, C_i , através de alterações no número de canais associados às câmaras que se encontram nos lados da rede. Os resultados das Secções 3.7.1.2 e 4.5.4.2 mostram que, em relação aos parâmetros geométricos e de escoamento da rede, este aspecto é significativo apenas para redes com um número reduzido de elementos, em que a diferença do volume de vazios entre redes com e sem fronteiras é significativa.

A mistura de traçador vai também ser influenciada pelas características locais da estrutura da rede na vizinhança das fronteiras da rede. Para esclarecer a natureza e a importância destes efeitos, foram efectuadas simulações em que foram comparados os resultados com e sem fronteiras periódicas.

Na Figura 5.44 são comparadas as respostas normalizadas da rede a perturbações em pulso espacialmente uniformes com $C_p = 1$ e uma duração igual a $0.4\tau_G$. Foram consideradas redes 40×20 , para três valores de d/D , com $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$. Não foram consideradas as condições de saturação nos elementos da rede. Comparando as curvas obtidas para os diferentes casos observa-se que a influência das características da rede é pouco significativa. Este facto deve-se à mistura lateral do traçador na rede, que reduz a influência das irregularidades do campo de escoamento no perfil de concentrações no interior da rede. Além deste facto, a forma como a concentração de saída é determinada (ver Secção 5.3.7) também amortece possíveis diferenças locais do campo de concentrações de traçador. Comparando os resultados obtidos para os diferentes valores de d/D , observa-se o mesmo comportamento, mostrando que o valor deste parâmetro não é significativo.

Observa-se no entanto nos resultados apresentados na Figura 5.44 que a resposta obtida para redes sem fronteiras periódicas (tipo 00) é mais abrupta, no sentido em que varia mais rapidamente para tempos baixos e elevados. Estes resultados mostram que as diferenças entre

as características locais da estrutura da rede influenciam o transporte de massa e a resposta da rede a uma perturbação de traçador imposta na entrada da rede.

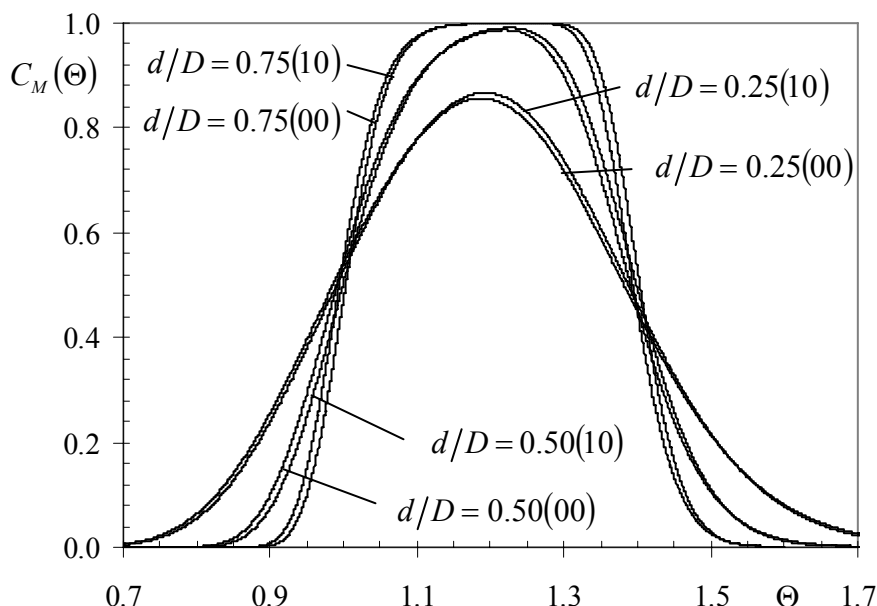
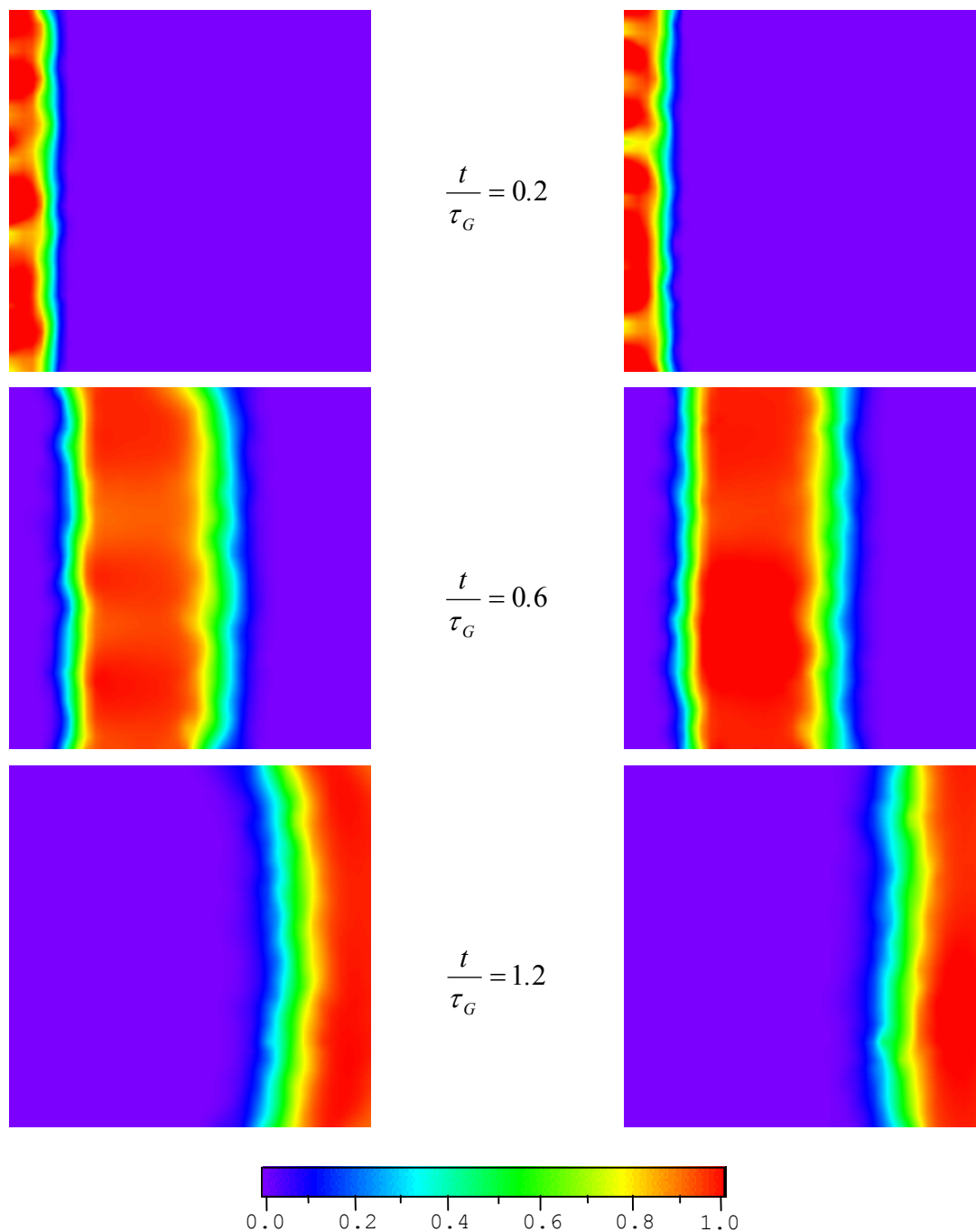


Figura 5.44 Comparação das respostas normalizadas para uma perturbação em degrau em função de Θ para os dois tipos de fronteiras.

Para esclarecer as diferenças entre as respostas de redes com e sem fronteiras periódicas, na Figura 5.45 são comparadas a evolução espacial e temporal do campo de concentração para os mesmos tempos adimensionais de simulação. Foram usados os resultados apresentados na Figura 5.44 para $d/D = 0.5$. A influência da natureza das fronteiras pode ser observada nos lados da rede. Para redes com fronteiras periódicas a onda de concentração é uniforme, variando apenas devido às irregularidades locais do campo de escoamento. A possibilidade do fluido passar de um lado da rede para o outro resulta numa mistura lateral de traçador independente da posição das câmaras na rede.

Por outro lado, o número de canais associado às câmaras na situação em que as fronteiras são não periódicas é menor, resultando em menor quantidade de traçador que alcança estas câmaras. Assim, a variação da concentração de traçador nestas câmaras é mais lenta no tempo, resultando num pulso com uma curvatura no sentido normal ao do escoamento do fluido. Estes efeitos são mais pronunciados quando os mecanismos de transporte de massa por dispersão são mais significativos, o que ocorre quando N_x (de acordo com os resultados da Secção 5.3.8) e/ou d/D são baixos. Este comportamento encontra-se de acordo com os resultados apresentados na Figura 5.44, em que as diferenças mais marcadas foram observadas para o valor mais baixo de d/D . Quando as fronteiras são periódicas este

comportamento não se observa, visto que a massa de traçador que alcança cada uma das câmaras da rede depende apenas do campo de escoamento e não da estrutura da rede.



a)

b)

Figura 5.45 Comparação da evolução do perfil de concentrações em redes com e sem fronteiras periódicas, para a mesma perturbação considerada na Figura 5.44: a) sem fronteiras periódicas; b) com fronteiras periódicas.

Como as diferenças entre os resultados previstos e os tempos de simulação necessários para descrever o transporte de massa em redes com e sem fronteiras periódicas são pouco

significativas ao nível macroscópico, neste trabalho foram efectuadas simulações normalmente com fronteiras periódicas.

Na Figura 5.46 é apresentada a diferença percentual entre os valores de Pe previstos para os dois tipos de fronteira para três valores de d/D em função de N_x . Foram consideradas redes com $N_y = 30$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$. Observa-se em qualquer dos casos que a diferença percentual entre os valores de Pe aumenta com o aumento de N_x , não sendo possível observar diferenças apreciáveis entre os diferentes valores de d/D .

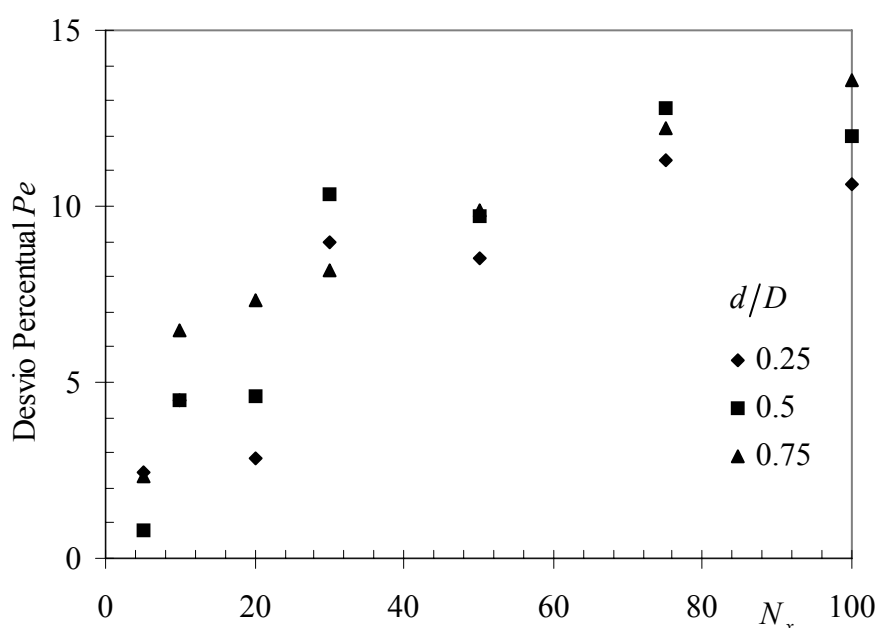


Figura 5.46 Diferença percentual entre os números de Peclet previstos para os dois tipos de fronteiras da rede, em função de N_x para 3 valores de d/D e redes com $N_y = 30$, para $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$.

Como se pode observar na Figura 5.45, as diferenças no perfil de concentrações, em particular na zona junto às fronteiras da rede, aumenta com a distância percorrida pelo fluido segundo o sentido principal de escoamento.

Por outro lado, os valores de Pe são sempre menores para o caso em que a fronteira da rede é não periódica. Nestas condições, o traçador vai permanecer mais tempo na zona junto à fronteira lateral da rede, misturando-se com fluido proveniente do centro da rede. Assim os efeitos da mistura lateral são mais marcados quando as fronteiras são não periódicas, obtendo-se valores de Pe mais baixos. Nenhuma influência significativa foi observada para os valores previstos de Θ_B . Este parâmetro é função apenas das características do escoamento através da

rede. Na Secção 4.5.4.2 mostrou-se que em redes com dimensões estatisticamente significativas a influência das características da fronteira da rede era pouco significativa.

Os resultados apresentados mostram que a influência das fronteiras é marcada apenas ao nível local e poderá não ser tomada em conta com um erros. Os resultados obtidos experimentalmente mostram que as fronteiras de um meio poroso, em particular de leitos de enchimento, não têm uma influência muito significativa no seu comportamento (Oliveros e Smith, 1982). A razão dos desvios observados deve-se à diferente estrutura geométrica e comportamento hidrodinâmico da rede na vizinhança da fronteira da rede.

5.4.3.3 Rede uniforme versus rede não uniforme

Nas Secções 4.4.3 e 5.3.8 mostrou-se que o comportamento hidrodinâmico e de transporte de massa da rede pode ser previsto analiticamente para uma rede uniforme. No entanto, uma rede real vai possuir uma distribuição não pontual das dimensões características dos elementos da rede, devendo ser estudado até que ponto as expressões obtidas podem ser usadas.

Os resultados das secções anteriores, em particular da Secção 5.4.2.1, mostram que a aproximação de rede uniforme é válida para valores baixos do desvio padrão das distribuições de valores de D e d . Quanto mais irregular é o campo de escoamento na rede, correspondente à situação em que os valores de σ_D e σ_d são elevados, maior é a mistura lateral de traçador e menores são os valores de Pe e Θ_B . Assim, em relação a uma rede uniforme, além dos efeitos de mistura do fluido nas câmaras, vai também existir o efeito da mistura de fluido derivado do campo de escoamento ser irregular. A importância relativa deste mecanismo de mistura pode ser determinada comparando os valores previstos pelo simulador de transporte de massa com as previsões obtidas para a rede uniforme com os mesmos valores médios das dimensões características dos elementos da rede.

Nesta secção foram considerados os resultados das simulações consideradas na Secção 5.4.2.1. Na Figura 5.47 são comparados os valores de Pe^* e Θ_B^* em função de Re^* , para diferentes valores de d/D . Foram usados os resultados apresentados na Figura 5.34. Observa-se que para condições de escoamento não linear perfeitamente desenvolvido os valores de Pe^* previstos para cada um dos valores de d/D são similares. Apenas para escoamento linear e na zona de transição se observam diferenças significativas para os valores de Pe^* , indicação de que os mecanismos de mistura para velocidades baixas de fluido dependem das

características do escoamento. Como se conclui na Secção 5.4.2.1, estes efeitos são mais claros quanto mais baixo for d/D , situação em que a influência da distribuição de velocidades nos canais é menor e o comportamento transiente das câmaras é mais significativo. Como Pe^* é uma medida dos efeitos das irregularidades do campo de escoamento no transporte de massa na rede, o aumento Pe^* com o aumento de Re^* indica que os efeitos do campo de escoamento diminuem ao passar de escoamento linear para não linear. Este facto deve-se à distribuição mais apertada das velocidades do fluido nos canais da rede para escoamento não linear, resultando em menor mistura do traçador e valores previstos mais elevados de Pe (ver Secção 5.4.2.1).

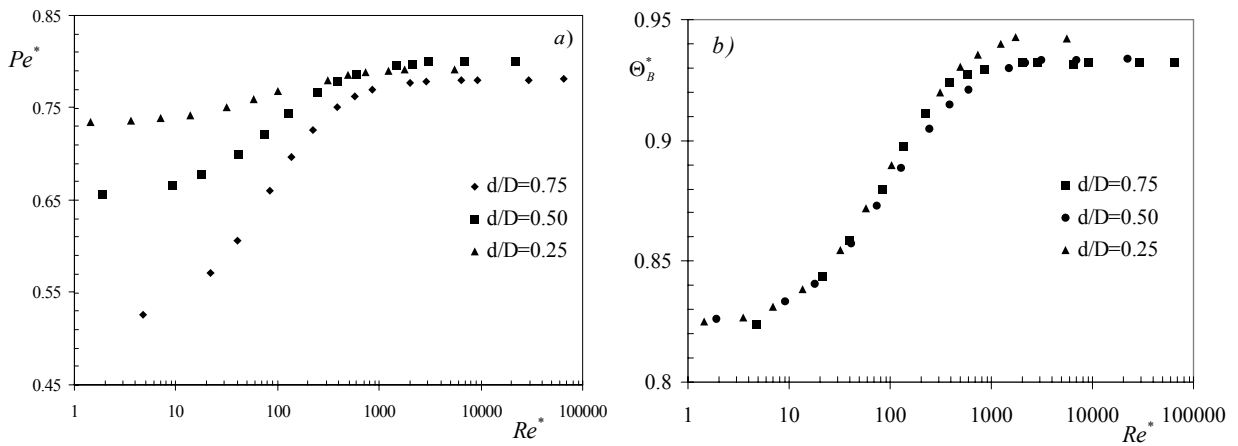


Figura 5.47 Comparação das curvas de Peclet e do tempo de breakthrough adimensional normalizados em função do número de Re^* para vários valores de d/D : a) Pe vs. Re^* ; b) Θ_B^* vs. Re^* .

Em relação aos valores de Θ_B^* previstos pelo modelo observa-se que os valores previstos são independentes de d/D , podendo ser representados por uma única curva. Este parâmetro é reflexo apenas das características geométricas e de escoamento através da rede, não tomando em conta o diferente comportamento das câmaras e dos canais assumido no modelo proposto para o transporte de massa. Deste modo, é possível concluir que, qualitativamente, as irregularidades do campo de escoamento, traduzidas pelos valores de Θ_B^* , dependem essencialmente dos valores de σ_D e σ_d .

Torna-se importante determinar qual é a influência de σ_D e σ_d . Na Figura 5.48 são comparados Pe^* e Θ_B^* em função de Re^* , para dois conjuntos de valores de σ_D e σ_d . Foram consideradas redes com o mesmo conjunto de parâmetros usado na Figura 5.35. Observa-se o mesmo comportamento qualitativo de Pe^* e Θ_B^* em função de Re^* já

observado na Figura 5.47, mas menos marcado para os valores mais baixos de σ_D e σ_d considerados. Os valores de Pe^* e Θ_B^* aumentam com a redução dos valores dos desvios padrão, indicando que os efeitos de mistura devido à não uniformidade do campo de escoamento diminuem de importância. Nos dois casos estudados, os valores normalizados para $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$ são muito próximos, permitindo concluir que nessas condições os valores previstos assumindo que a rede é uniforme são adequados e que o erro cometido é inferior a 5%.

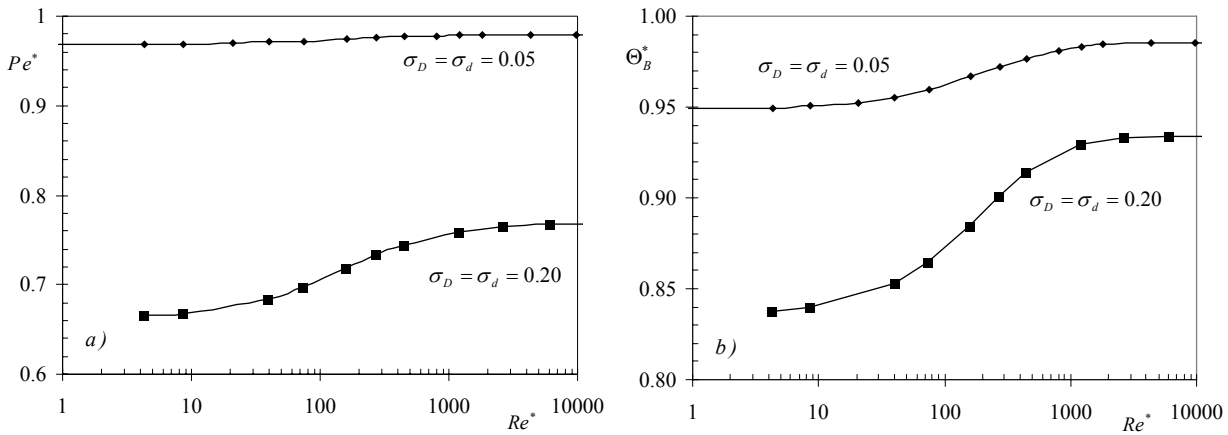


Figura 5.48 Comparação das curvas de Peclet e do tempo de breakthrough adimensional normalizados em função do número de Re^* para dois conjuntos de valores de desvio padrão: a) Pe vs. Re^* ; b) Θ_B^* vs. Re^* .

Os resultados obtidos mostram que para redes com distribuições das dimensões características dos elementos da rede apertadas, os valores previstos assumindo uma rede uniforme são adequados. Este aspecto vai ser tomado em conta na Secção 5.5 na comparação entre dados experimentais e correlações publicadas na literatura com os valores previstos pelo modelo.

5.4.3.4 Influência da distribuição de números de coordenação na rede

A análise da influência da distribuição dos valores de C_i está directamente relacionada com a influência que este tem sobre o campo de escoamento na rede. Nas secções anteriores foram sempre consideradas redes sem canais horizontais e com fronteiras periódicas. As conclusões da Secção 5.4.3.2 mostram que a influência da natureza das fronteiras da rede é pouco significativa. Por outro lado, no Capítulo 4 conclui-se da análise do comportamento de uma rede uniforme e a inclusão de canais horizontais que são os canais oblíquos que controlam o comportamento da rede. Os resultados da comparação entre as distribuições das velocidades do fluido nos canais apresentada na Secção 4.5.4.3 mostram também que mesmo para redes uniformes a presença ou não de canais horizontais não influencia significativamente as

características do escoamento nos elementos da rede. Apenas nos valores dos coeficientes macroscópicos que caracterizam o comportamento hidrodinâmico da rede, como por exemplo a permeabilidade, é que se observa a influência da presença ou não de canais horizontais (ver Secção 4.5.4.3).

As características das distribuições de velocidades, em particular as associadas aos canais horizontais, vão-se reflectir na descrição do comportamento do transporte de massa. Apesar das curvas se sobrepossem numa zona estreita de valores de velocidade, na grande maioria dos canais horizontais os valores de v_j são claramente inferiores aos observados nos canais oblíquos. No entanto, as distribuições das velocidades nos canais não tomam em conta a influência das características geométricas da rede e dos seus elementos. De acordo com o modelo proposto, os parâmetros mais adequados para prever o comportamento da rede são os valores dos tempos de passagem: τ_j e τ_i ; e ainda de α_j^E e α_j^O . Estes parâmetros são usados directamente nas equações de balanço material escritas para os elementos da rede e influenciam o seu comportamento.

Em relação aos parâmetros α_j^E e α_j^O , referiu-se anteriormente que as suas distribuições deverão ser praticamente idênticas. A Figura 5.49 mostra as distribuições dos valores de α_j^E e α_j^O em redes 100×100 do tipo 10, $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$ e $d/D = 0.5$. A representação das distribuições é feita na forma de um histograma usando 20 classes. Observa-se que as duas distribuições são praticamente idênticas, mostrando que ambas são adequadas para caracterizar o comportamento da rede. De acordo com os resultados apresentados na figura anterior, nesta e nas secções seguintes vai ser considerada apenas a distribuição de valores de α_j^E .

Na Figura 5.50 são comparadas as distribuições dos valores de α_j^E para as distribuições de velocidades apresentadas na Secção 4.5.3.2) em que se investigou qual era a influência da inclusão ou não de canais horizontais na rede. São consideradas separadamente as distribuições de valores com e sem canais horizontais, com o objectivo de se diferenciar qual é o efeito da inclusão ou não dos canais horizontais. Comparando as distribuições de valores de α_j^E para os canais oblíquos, Figura 5.50b, observa-se que as duas são similares tanto para o caso com ou sem canais horizontais.

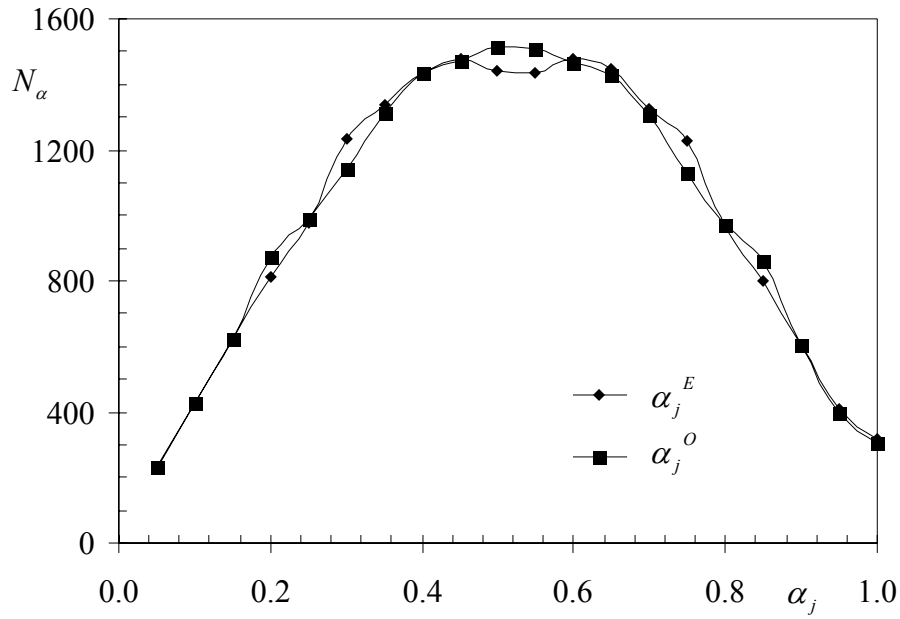


Figura 5.49 Comparação das distribuições de valores α_j^E e α_j^O para redes 100×100 , $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$ e $d/D = 0.5$.

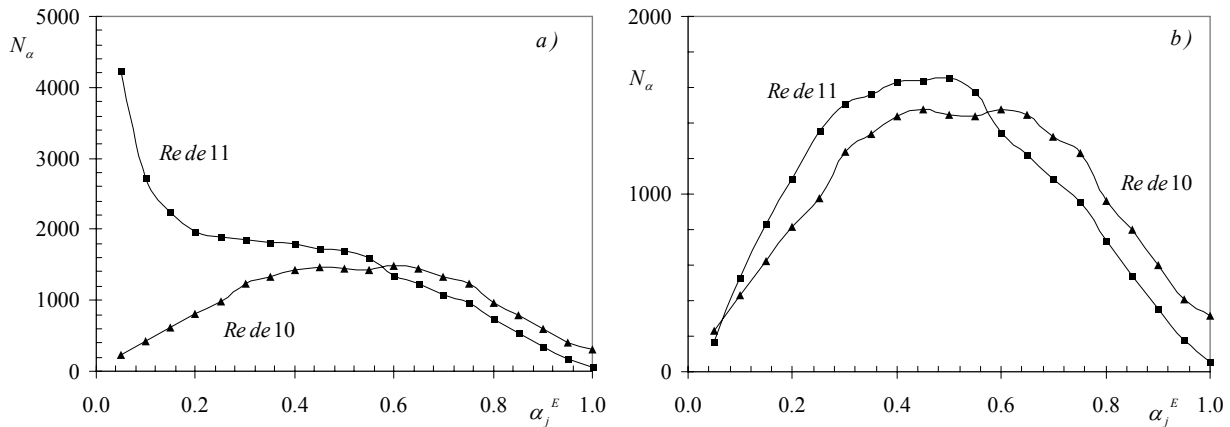


Figura 5.50 Distribuições de valores de α_j^E para redes tipo 11 (com canais horizontais) e tipo 10 (sem canais horizontais): a) completa; b) sem os valores associados aos canais horizontais.

A inclusão de canais horizontais na rede faz deslocar a curva para valores mais baixos de α_j^E . De acordo com a definição de α_j^E , quando existem canais horizontais na rede o caudal através dos canais oblíquos diminui, pelo que o comportamento observado era esperado. Por outro lado, de acordo com a distribuição das velocidades nos canais apresentada na Secção 4.5.4.3, os valores de v_j correspondentes aos canais horizontais são mais baixos, resultando em valores de q_j e α_j^E mais baixos, como é possível concluir também da Figura 5.50a. A análise efectuada no Apêndice C.9 mostra que nestas condições o comportamento dos canais

com valores baixos de α_j^E é significativo apenas para valores elevados do tempo de simulação.

As diferenças observadas para a distribuição de valores de α_j^E são ainda mais marcadas comparando as distribuições dos tempos de passagem nas câmaras e nos canais da rede. Para confirmar as conclusões anteriores, é necessário analisar as distribuições dos tempos de passagem na rede, o que levanta alguns problemas.

Tomando em conta as distribuições das velocidades nos canais apresentadas na Secção 4.5.4.3, alguns canais da rede, em particular os canais horizontais, vão possuir τ_j muito elevados. Estes correspondem aos canais em que a velocidade do fluido é próxima de zero, visto que o volume dos canais não varia muito entre canais horizontais e oblíquos. Deste modo, não é conveniente a representação directa das distribuições dos valores de τ_i e τ_j , em particular a correspondente ao segundo parâmetro.

Assim, a determinação do número de elementos em classe da distribuição dos tempos de passagem considera duas fases. Na primeira, todos os valores são considerados. De seguida, caso mais de 50% dos elementos da amostra se encontrem na primeira classe, os valores das classes são recalculados com base na primeira e segunda classes e o número de elementos em cada uma delas é recalculado. Este procedimento é repetido até que menos de 50% dos elementos da amostra se encontrem na primeira classe. Os elementos com um tempo de passagem excessivo encontram-se na última classe da distribuição, sendo a importância relativa destes uma medida da irregularidade da distribuição de velocidades nos canais na rede. Por outro lado, como valores elevados de τ_j correspondem a valores elevados dos incrementos espaciais nos canais, este é um dos factores principais no esforço necessário para simular o transporte de massa na rede.

Na Figura 5.51 são comparadas as distribuições dos valores de τ_i e de τ_j para as mesmas condições consideradas na Figura 4.28. Os resultados são normalizados pelo maior valor do tempo de passagem considerado nas classes do histograma. Como na figura anterior para as distribuições de valores de α_j^E , observa-se um comportamento distinto entre os dois tipos de redes. Em particular, observa-se que o número de câmaras e canais com um valor elevado do tempo de passagem é pequeno, em particular para redes com canais horizontais em que se observa um número significativo de elementos com valores elevados do tempo de passagem,

correspondente à última classe do histograma. Estes elementos são os que definem o número de incrementos espaciais nos canais e Δt . No entanto, de acordo com as conclusões do Apêndice C.9, o comportamento dinâmico destes elementos é pouco significativo e pode ser desprezado numa primeira aproximação. Comparando as curvas para valores baixos do tempo de passagem observa-se que estas são similares, mostrando que o comportamento previsto pelo modelo para redes sem e com canais horizontais é similar para tempos da ordem de grandeza de τ_G .

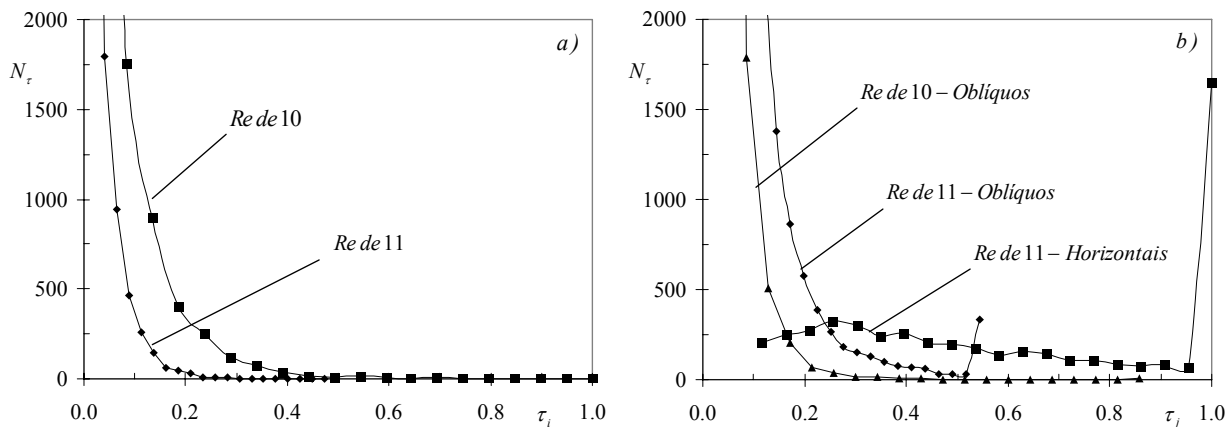


Figura 5.51 Distribuições dos tempos de passagem para redes tipo 11 (com canais horizontais) e tipo 10 (sem canais horizontais): a) τ_i ; b) τ_j .

Comparando as distribuições de valores de α_j^E (ver Figura 5.49) com as distribuições de valores de τ_i e de τ_j apresentadas observa-se a ocorrência de um máximo num extremo das curvas. Apesar de ser em lados diferentes, estes estão relacionados. De acordo com a sua definição, valores baixos de α_j^E correspondem a valores baixos do caudal volumétrico e consequentemente da velocidade nos canais. Nestas condições, o valor do tempo de passagem corresponde a valores elevados de τ_j . É possível concluir então que a ocorrência dos extremos nas duas curvas se devem ao mesmo comportamento, sendo adequado usar qualquer uma das duas na caracterização do comportamento. Por serem de construção e análise mais fácil, nas secções seguintes foram sempre usadas as distribuições dos valores de α_j^E .

Até este momento apenas foram consideradas redes com uma estrutura regular, no sentido em que o número de coordenação das câmaras é independente da posição destas na rede, salvo nos lados da rede em que depende do tipo de fronteiras imposto. Os resultados da Secção 4.5.4.1 mostram no entanto que a estrutura da rede tem uma influência decisiva no comportamento hidrodinâmico da rede.

Para confirmar que estes efeitos são também observados na descrição do transporte de massa através da rede de elementos, são apresentadas na Figura 5.52 as distribuições de valores de α_j^E para $C = 4$, sem (rede tipo 10) e com remoção de canais, em que o processo de remoção baseou-se a partir de uma rede tipo 11. Como em figuras anteriores, foram representadas separadamente as distribuições de valores com e sem canais horizontais. Foram usadas redes com 100×100 , $\sigma_D = \sigma_d = 0.40$ e $d/D = 0.5$. Comparando as duas distribuições, observam-se diferenças significativas. Para valores de $\alpha_j^E \approx 1$ é possível observar um pico no caso com remoção de canais. A sua ocorrência deve-se ao procedimento de remoção dos canais da rede, que origina a existência de canais com apenas um canal de entrada de fluido. Situação análoga ocorre também na distribuição de valores de α_j^O . A existência de um extremo para valores baixos de α_j^E mostra que existem canais com valores elevados do tempo de passagem.

Por outro lado, a distribuição de valores de α_j^E com remoção de canais assemelha-se mais à observada para redes com canais horizontais, como se pode observar na Figura 5.50. Como o procedimento de remoção parte de uma rede tipo 11 que possui canais horizontais, estes vão existir sempre na rede, influenciando o seu comportamento.

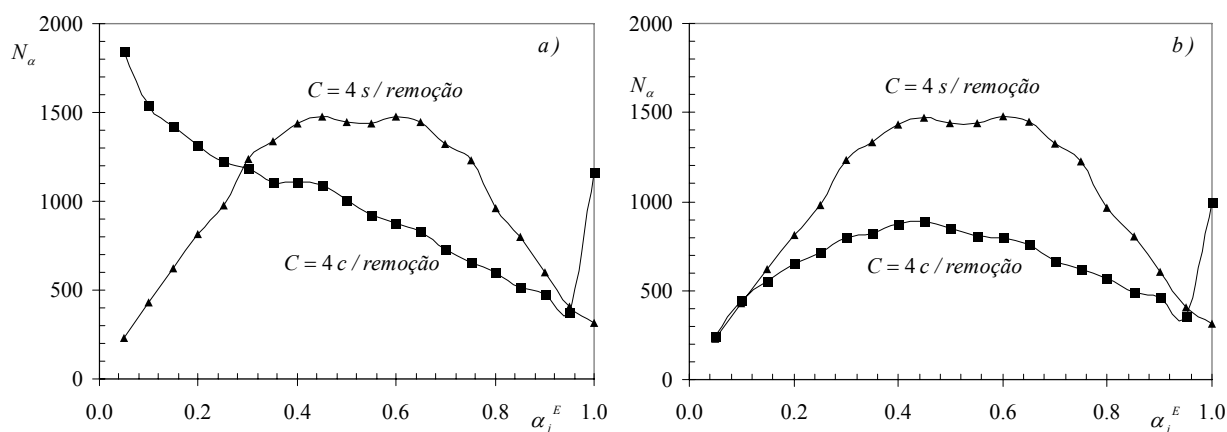


Figura 5.52 Distribuições de valores de α_j^E para redes tipo 11 (com canais horizontais) e tipo 10 (sem canais horizontais): a) completa; b) sem os valores associados aos canais horizontais.

Os resultados mostram que a previsão do comportamento da rede poderá ser feito analisando qualquer das distribuições consideradas: v_j , α_j ou dos tempos de passagem nos elementos da

rede. As duas últimas são mais adequadas pois incluem os efeitos da geometria e do escoamento na rede, permitindo tirar conclusões mais detalhadas do comportamento da rede.

No Apêndice C.9 foi efectuada a análise do comportamento transiente de uma câmara com canais horizontais associados, em que existem diferenças significativas nos valores de α_j^E e τ_j . Os resultados permitem concluir que o comportamento das câmaras, e consequentemente da rede, poderá ser obtido com um pequeno erro tomando em conta apenas as câmaras e os canais oblíquos.

5.4.3.5 Outros parâmetros

Referiu-se na introdução da Secção 5.4.3 que existem outros parâmetros que influenciam a estrutura da rede, mas que não são significativos na caracterização do transporte de massa na rede. Entre estes encontram-se o ângulo que os canais oblíquos fazem com o sentido principal de escoamento, θ , e a porosidade da rede, ε .

De acordo com os modelos propostos para determinar a resistência dos canais da rede ao escoamento, θ influencia apenas os valores de E_R . Em relação ao gerador da rede, apenas quando é tomada em conta a restrição de não intersecção dos canais à entrada da rede é que este parâmetro é significativo. No entanto, os valores previstos pelos modelos geométricos para os valores médios dos parâmetros geométricos (ver Secção 3.6) permitem concluir que na geração da rede a restrição $d_j < D_i$ é suficiente para prever o escoamento em meios porosos reais, em particular leitos de enchimento. Assim, as características locais do escoamento são independentes de θ , motivo pelo qual este parâmetro não é significativo na caracterização do transporte de massa na rede de elementos.

Situação idêntica ocorre com a influência da porosidade, ε , cujo valor é tomado em conta apenas na determinação das características geométricas macroscópicas da rede. Assim, apenas o valor de parâmetros como D_L é influenciado. A análise do comportamento da rede baseia-se sobretudo em grupos adimensionais independentes de θ e ε , como por exemplo Pe e Θ_B , tornando o estudo da influência destes parâmetros irrelevante.

No entanto, o gerador da rede requer a definição de um valor para θ e ε . De acordo com as características geométricas da rede e do modelo geométrico desenvolvido no capítulo 3, $\theta = \pi/4$ é um valor adequado. Para a porosidade, como o modelo geométrico é adequado na

descrição do comportamento de leitos de enchimento formados por esferas com uma distribuição apertada de diâmetros, é válido assumir $\varepsilon = 0.4$. Estes valores foram usados na obtenção de todos os resultados apresentados na Secção 5.4. Na análise do comportamento previsto usando os modelos geométricos e comparação com dados experimentais, os valores dos dois parâmetros são interdependentes, devendo então ser tomados em conta explicitamente.

5.4.4 Influência dos parâmetros das distribuições das dimensões características dos elementos da rede

Nesta secção é analisada a influência dos parâmetros das distribuições das dimensões características dos elementos da rede no comportamento previsto pelo simulador de transporte de massa. De acordo com os resultados obtidos para o simulador hidrodinâmico (ver Capítulo 4) e com as conclusões da análise do comportamento de uma rede uniforme (ver Secção 5.3.8), foram considerados os parâmetros seguintes.

- A razão entre os diâmetros médios dos canais e das câmaras, d/D , está relacionada com a importância relativa entre o transporte de massa por dispersão, associado às câmaras, e por convecção, associado aos canais (Secção 5.4.4.1). Por outro lado, a variação de d em particular influencia as características do escoamento, devendo esta ser considerada na análise dos resultados obtidos.
- Os valores dos desvios padrão das distribuições de D_i e d_j . Os valores destes parâmetros encontram-se directamente relacionados com as características do campo de escoamento, e consequentemente com o transporte de massa na rede (Secção 5.4.4.2).
- Valor de l , o comprimento médio dos canais oblíquos. Este parâmetro está relacionado com o transporte de massa por mecanismos convectivos, de acordo com a definição do parâmetro γ , Equação 5.59. Apesar de pouco significativo na descrição do escoamento, como o tempo de passagem nos canais é proporcional ao seu valor, é necessário investigar a sua influência no transporte de massa (Secção 5.4.4.3).

Nas secções anteriores a influência de alguns dos parâmetros listados já foi estudada em contextos particulares. Nesta secção pretende-se obter conclusões mais específicas sobre a influência dos parâmetros associados às distribuições das dimensões características dos elementos da rede.

5.4.4.1 Influência dos valores médios das distribuições das dimensões características dos elementos da rede

Na análise do escoamento concluiu-se que são as dimensões relativas dos elementos da rede os factores mais importantes no seu comportamento. Como o modelo de transporte de massa se baseia no modelo de escoamento, espera-se um comportamento idêntico. Os resultados obtidos nas secções anteriores mostraram que o comportamento qualitativo da rede pode ser determinado a partir de d/D . O modelo proposto neste trabalho para a descrição do comportamento hidrodinâmico assume comportamentos distintos para os dois tipos de elementos da rede, permitindo atribuir a diferentes elementos da rede os mecanismos convectivos (canais) e de dispersão (câmaras) de transporte de massa, o que se observa na prática.

Tomando em conta os resultados apresentados nas secções anteriores, em que em muitos casos foram efectuadas simulações para três valores típicos de d/D , duas situações limites podem ser definidas. Quando d/D é baixo, o volume das câmaras é muito superior ao dos canais, sendo o comportamento macroscópico da rede controlado pelas câmaras da rede. Situação contrária ocorre para valores baixos de d/D , em que o comportamento dos canais é o factor dominante no comportamento macroscópico da rede. Conclusões idênticas foram obtidas na Secção 5.3.8.3 na análise do comportamento de uma rede uniforme. Como os valores de d/D e γ são proporcionais entre si, as mesmas conclusões qualitativas são aplicáveis ao caso em que a rede é não uniforme.

Em relação ao algoritmo implementado para a resolução do sistema de equações de balanço material nos elementos da rede, o tempo de simulação e a memória requerida para as simulações é proporcional a d/D . Ao aumentar d , mantendo-se D constante, Δt vai deixar de ser determinado a partir da distribuição de valores de τ_j para passar a ser determinado pela distribuição de valores de τ_i . Deste modo, para valores elevados de d/D , aumentar o valor deste parâmetro implica aumentar o número de incrementos espaciais nos canais, aumentando o tempo e a memória necessários para a simulação do transporte de massa. Situação análoga ocorre quando se varia D , mantendo-se d constante. Nestas condições, em especial quando d/D é próximo de 1, os critérios de saturação permitem reduzir apreciavelmente o tempo de simulação, sem aumentar o erro de balanço material.

Na Figura 5.53 são apresentadas as curvas $E(\Theta)$ para diferentes valores da razão d/D , mantendo-se constante o valor $d = 0.002$. Foram consideradas redes 100×30 com $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$. De modo a assegurar que em todas as simulações as condições de estado estacionário fossem alcançadas (neste caso a concentração de saída da rede tende para um valor constante igual a C_p), os valores de t_{max} foram variados de acordo com as características qualitativas esperadas para a resposta da rede. Em particular, t_{max} deve ser tanto maior quanto menor for d/D . A mesma situação ocorre quando D é fixado, variando d .

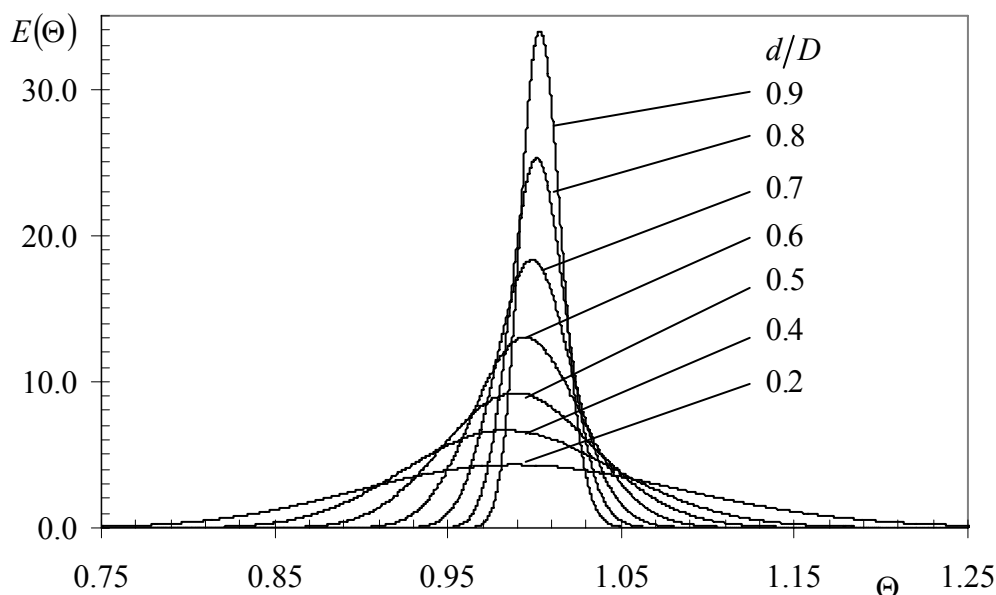


Figura 5.53 Influência de d/D nas distribuições de tempo de residência do traçador na rede após a aplicação de uma perturbação em degrau.

Observa-se que quanto maior é d/D mais as curvas tendem a tornar-se mais simétricas e em relação ao valor máximo, tendendo este também para $\Theta = 1$. Por outro lado, a dispersão das curvas em torno do máximo diminui, implicando valores de Pe mais elevados. Em conjunto com as conclusões das secções anteriores, em particular da Secção 5.3.8.3, os resultados apresentados mostram que o comportamento previsto para a rede é determinado em grande medida pelas características geométricas da rede e dos seus elementos, em que d/D é dos parâmetros mais significativos.

Para valores elevados de d/D , a influência das câmaras é pouco significativa, sendo o comportamento previsto para a rede determinado pelos canais. Nestas condições, a influência das características do escoamento deverá ser mais marcada. Para valores baixos de d/D

ocorre a situação inversa, sendo o comportamento da rede determinado pelas câmaras. Assim, a influência das condições de escoamento será menor nesta situação. As conclusões apresentadas são suportadas pelos resultados da Secção 5.4.2.1.

Notar que, de acordo com as restrições entre os valores de d_j e D_i impostas no gerador da rede, d/D não pode ser superior a 1. O caso limite em que $d/D = 1$ corresponde à situação em que não é possível diferenciar as câmaras dos canais. Ao contrário da maior parte dos modelos de redes propostos na literatura para descrever o transporte de massa num meio poroso (DeArcangelis et al., 1986; Sahimi et al., 1986a; Alvarado et al., 1997), no modelo proposto neste trabalho os nós de mistura possuem um volume não nulo, sendo necessário tomar em conta a sua influência na caracterização do transporte de massa através dos elementos da rede. A hipótese de $D = 0$ é incorrecta pois o volume da intersecção dos canais nos nós da rede é não nulo, sendo possível definir no caso o diâmetro equivalente da câmara correspondente à intersecção entre estes. Por outro lado, os resultados do modelo hidrodinâmico mostram que a inclusão das câmaras é essencial para caracterizar o escoamento na rede. Assim, os efeitos da dispersão nunca serão nulos, podendo ser no entanto pouco significativos.

A forma de representação usada na Figura 5.53 apenas permite tirar conclusões qualitativas sobre o comportamento da rede e quais são os mecanismos principais de transporte de massa em função de d/D . Uma forma mais adequada é analisar a variação de Θ_B e Pe em função de d/D , apresentando-se na Figura 5.54 os valores previstos a partir dos resultados apresentados na Figura 5.53. Devido às diferentes gamas de variação dos parâmetros, os valores de Pe foram representados usando coordenadas logarítmicas e Θ_B em coordenadas lineares. Como N_x é constante, os valores obtidos podem ser comparados directamente, ao contrário da Secção 5.4.3.1, em que a comparação de resultados obtidos para diferentes valores de N_x requer a utilização de parâmetros normalizados.

Ambos os parâmetros aumentam com o aumento de d/D , sendo possível observar diferenças no comportamento entre os valores previstos para valores baixos e elevados de d/D . Em Θ_B , quando d/D é baixo, observa-se um comportamento aproximadamente linear. Para valores elevados de d/D , Θ_B tende para um patamar, correspondente à zona em que o comportamento das câmaras não é significativo para caracterizar o comportamento da rede. O valor limite previsto quando $d/D \rightarrow 1$ é inferior a 1 devido às restrições impostas entre os

diâmetros das câmaras e dos canais associados entre si, que asseguram que existe sempre uma parte do volume de vazios da rede associada às câmaras. Em relação aos valores previstos de Pe , observa-se um comportamento aproximadamente linear quando os dados são representados em escala logarítmica, revelando que o número de Peclet depende exponencialmente de d/D . Como no parâmetro Θ_B , apesar deste comportamento não ser tão visível como no caso de Θ_B , quando $d/D \rightarrow 1$, Pe vai também tender para um valor finito, devido à existência de um volume não nulo de mistura derivado da intersecção dos canais nos nós da rede.

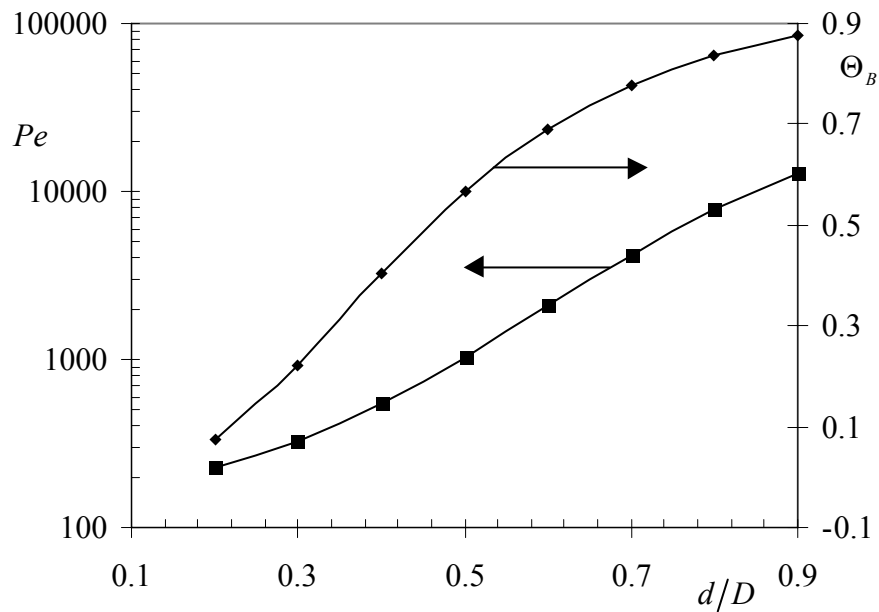


Figura 5.54 Comparação dos valores de Pe e Θ_B em função de d/D para os resultados apresentados na Figura 5.53.

Na Figura 5.55 são comparadas as curvas de Pe e Θ_B em função de d/D para dois conjuntos de valores de σ_D e σ_d , com o objectivo de analisar a influência das dimensões características dos elementos da rede. Foram consideradas redes 100×30 , tendo-se variado D mantendo-se constante $d = 0.002$. Comparando as curvas para valores de desvio padrão diferentes observa-se que tanto para Pe como Θ_B os valores previstos para $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$ são inferiores aos obtidos para $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$.

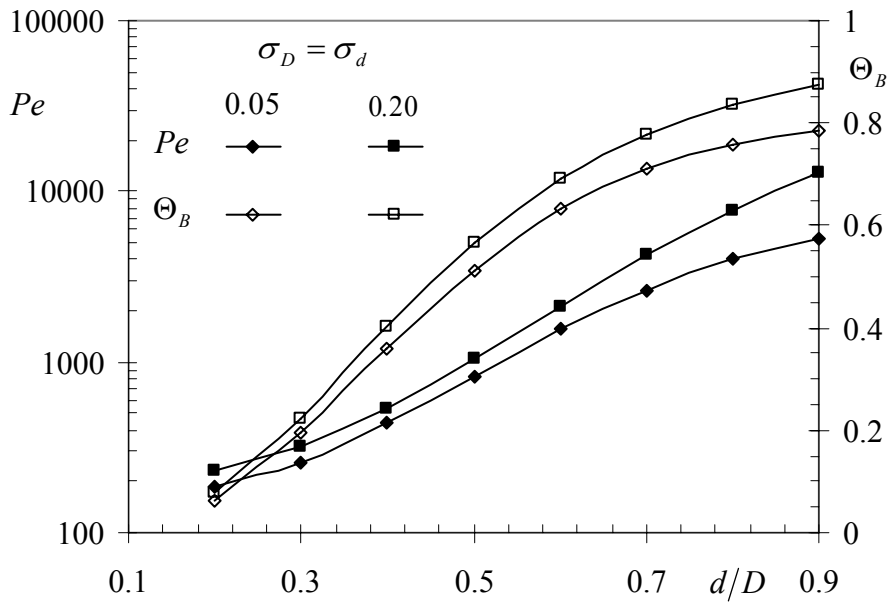


Figura 5.55 Comparação dos valores de Pe e Θ_B ; em função de d/D para dois conjuntos de valores de σ_D e σ_d .

Este comportamento mostra a influência das irregularidades da estrutura da rede ao nível das dimensões características dos seus elementos (a estrutura geométrica é regular) no transporte de massa na rede, concluindo-se que quanto maior é esta irregularidade maior é a dispersão de massa.

Os resultados apresentados nas figuras anteriores foram obtidos com d fixado. No entanto, de acordo com as hipóteses consideradas no desenvolvimento do modelo hidrodinâmico, é de se esperar que a influência de d , mantendo D constante seja mais marcada que a situação contrária.

Na Figura 5.56 são comparados os valores de Pe e Θ_B em função de α para diferentes valores de d/D , para as duas situações possíveis: d constante variando D ou D constante variando d . Foi usado o parâmetro α na representação dos resultados, por ser um parâmetro de aplicação mais geral que γ pois permite tomar em conta a influência das características das distribuições das dimensões características dos elementos da rede e as restrições entre os valores de D_i e d_j ao nível local. Por outro lado, de acordo com a definição de α , Equação 5.45, o seu valor é proporcional aos valores de γ e d/D , sendo adequado usar qualquer um destes parâmetros na representação dos resultados. As simulações foram efectuadas usando redes com $N_x = 40$, $N_y = 30$ e $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$.

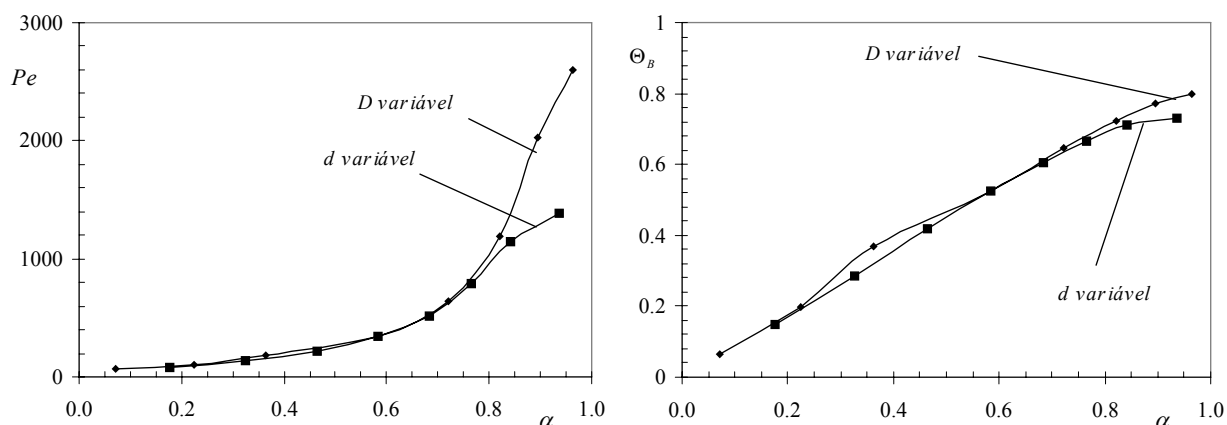


Figura 5.56 Valores de Pe em função de α variando d/D para os dois casos possíveis.

Para valores baixos de α observa-se que os valores previstos de Pe e Θ_B são similares. De acordo com a definição de α , Equação 5.45, o volume dos canais é muito inferior ao volume das câmaras nesta situação, sendo a resposta da rede controlada pelo comportamento das câmaras. Nestas condições, a forma de variação de d/D não é significativa, pois em qualquer dos casos o aumento de α resulta sempre na redução da importância do comportamento da rede.

Para valores de α elevados os resultados mostram uma influência mais marcada deste parâmetro, em particular, quando é d que varia. Ao contrário da situação em que D varia, a influência no comportamento hidrodinâmico da rede deve ser tomada em conta. De acordo com as hipóteses consideradas no modelo hidrodinâmico (ver Capítulo 4), o escoamento na rede é controlado pela distribuição dos diâmetros dos canais, sendo a distribuição dos diâmetros das câmaras significativa apenas na determinação dos parâmetros geométricos da rede ao nível macroscópico. Quando α é elevado o comportamento dos canais é controlado pelos canais, sendo então mais claras as mudanças nos valores de D ou d , como se observa na Figura 5.56.

A influência da forma como d/D é variado deverá ser mais marcada nos valores previstos de D_L . De acordo com a Equação 5.44, o valor do coeficiente de dispersão longitudinal vai depender simultaneamente das características geométricas e de escoamento na rede, ambos dependentes de d/D . Ao contrário de Pe e Θ_B , que dependem apenas das características geométricas e de escoamento locais, este parâmetro permite analisar a influência de d/D ao nível global da rede.

Na Figura 5.57, são apresentados os valores previstos de D_L para os resultados apresentados na Figura 5.55, sendo possível observar diferenças significativas entre estas. Como esperado, as duas curvas possuem um ponto comum, correspondente a $d/D = 0.5$. Comparando as curvas obtidas é possível observar diferenças significativas no seu comportamento.

Observa-se que quando D é variável e d é mantido constante, D_L varia de uma forma mais acentuada. Nestas condições, apenas as condições geométricas da rede mudam, em particular o volume de vazios da rede, resultado do facto de no modelo hidrodinâmico se atribuir toda a resistência ao escoamento aos canais. Deste modo, as condições de escoamento vão ser iguais para toda a gama de valores de d/D . Aumentar D leva a que, de acordo com as Equações 5.45 e 5.59, α e γ baixem, indicando a variação deste último parâmetro que a importância relativa da convecção diminui com o consequente aumento de D_L , o que se observa na Figura 5.57.

Este efeito é mais marcado para valores mais elevados de α , em que pequenas alterações de D resultam em variações significativas de α . Quando $D \gg d$, correspondendo a α baixos, as variações são menos significativas, tendendo D_L para um valor praticamente constante. Nestas condições, variar D não altera apreciavelmente γ ou α , razão pelo que D_L permanece praticamente constante. Por outro lado, nestas condições a mistura do fluido é praticamente completa e variações em D não a modificam apreciavelmente.

Quando d é variável também se deve tomar em conta as alterações no campo de escoamento. Por outro lado, de acordo com a Equação 5.45, a forma como α varia com d depende dos valores relativos de d e D . Para valores elevados de α (próximos de 1), aumentar d leva a uma diminuição de α mas a um aumento de γ . Por outro lado, aumentar d , ao contrário do caso anterior, vai resultar numa menor resistência ao escoamento, com o consequente aumento da velocidade do fluido e importância relativa da convecção. Assim, nestas condições vão existir dois efeitos contrários, razão pela qual as variações são menos significativas para este caso. Quando α é próximo da unidade, as variações devido à modificação das características de mistura são mais marcadas que as alterações do campo de escoamento.

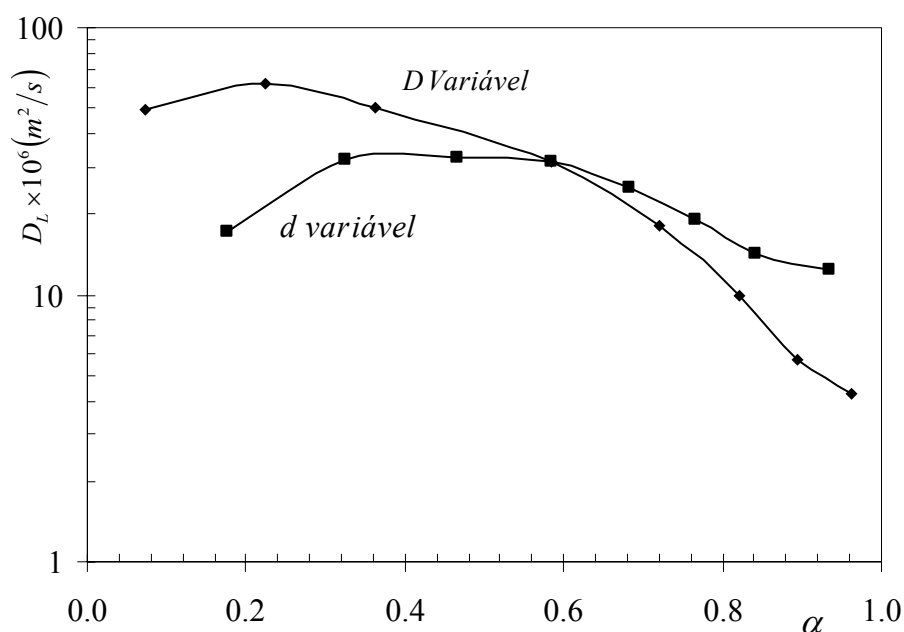


Figura 5.57 Valores de D_L em função de α variando d/D para D variável mantendo d constante, e d variável mantendo D constante. Para valores intermédios de α , D_L apresenta um patamar diminuindo quando α é baixo. Quando $d \approx D$, α varia pouco com d , sentindo-se qualquer alteração em d de uma forma mais marcada nas condições de escoamento. Deste modo, vai ser observado um aumento da importância relativa da convecção, com o abaixamento de D_L para α baixos, como se observa na Figura 5.57. Este comportamento é contrário ao esperado de acordo com a definição do parâmetro α , em que uma redução do valor deste parâmetro deveria levar a uma redução da importância relativa da convecção, o que não se observa na Figura 5.57. No entanto, está de acordo com a definição de γ , que aumenta quando d aumenta, de acordo com o comportamento observado na Figura 5.57.

As figuras anteriores mostram que os parâmetros permitem caracterizar qualitativamente as características do transporte de massa através de uma rede de elementos, quando são usados os grupos adimensionais Pe e Θ_B . No entanto, de acordo com a definição de γ , Equação 5.59, é possível mostrar que mesmo quando o d/D é constante γ pode variar, resultado da relação não linear existente entre os dois factores. Além disso, os resultados da Figura 5.57 mostram que γ deverá ser um parâmetro mais adequado para caracterizar a importância relativa da convecção e da dispersão do que α . Para esclarecer se as conclusões anteriores são válidas, simulações foram efectuadas em redes 80×20 e usando $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$. Os valores de D e d foram variados mas apenas três valores de d/D foram considerados: 0.25

para valores baixos de γ , 0.5 para valores intermédios de γ e 0.75 para valores elevados de γ . A gama de valores de γ considerada abrange as situações possíveis de convecção ou dispersão dominantes, ou situações intermédias em que os dois mecanismos devem ser considerados simultaneamente. Os valores previstos de Pe e Θ_B em função de γ são apresentados na Figura 5.58, sendo os mesmos comparados com os valores previstos pelo modelo para redes uniformes para iguais valores de γ . Diferentes comportamentos podem ser observados para os dois parâmetros. Para Θ_B observa-se que o seu comportamento qualitativo é similar ao comportamento qualitativo previsto para uma rede uniforme e em acordo com a Equação 5.60. Os resultados mostram que mesmo para valores elevados de γ , Θ_B tende para um valor constante mas inferior a 1, uma consequência directa da existência de uma distribuição de valores de v_j mesmo quando $d \ll D$. Este resultado está de acordo com as conclusões de Russel e Levan (1997) que mostraram que numa rede de elementos com uma distribuição de velocidades vai existir sempre dispersão por mais importante que seja a influência da convecção de massa.

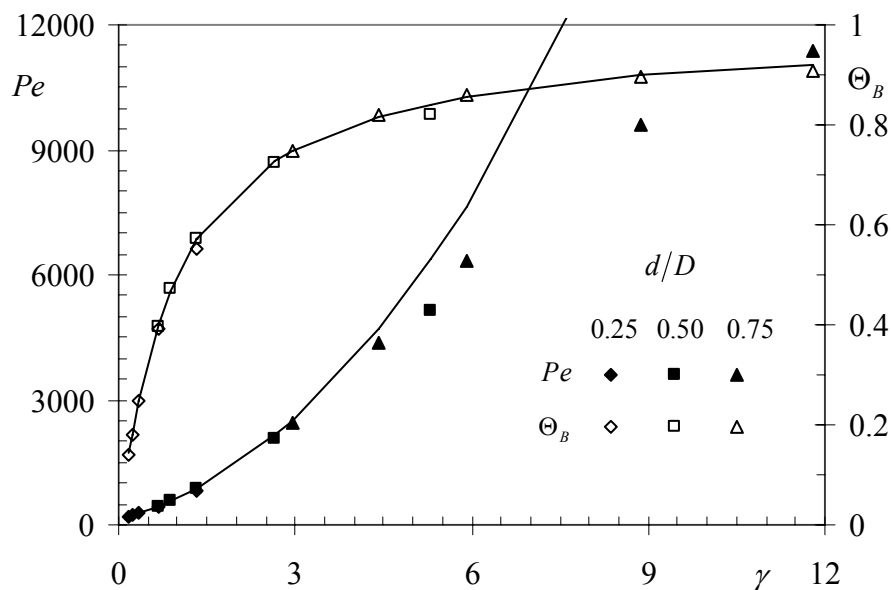


Figura 5.58 Valores de Pe e θ_B em função de γ . Curvas a cheio representam as previsões do modelo para redes uniformes. Em relação a Pe , para valores baixos de γ

observa-se uma dependência quadrática entre os dois parâmetros, de acordo com a Equação 5.64. Aumentando γ observa-se uma mudança de comportamento, passando-se de uma dependência quadrática para uma relação linear entre Pe e γ . As diferenças entre os valores previstos aumentam também com γ , como se pode observar na Figura 5.58. Incrementar γ significa aumentar a importância relativa da convecção. Assim, os resultados apresentados na

Figura 5.58 mostram que para alcançar condições em que o comportamento assintótico da rede e nas quais o modelo de dispersão é válido requer redes maiores quanto maior for γ . Este resultado está de acordo com as conclusões obtidas por Han *et al.* (1985) com base em dados experimentais de transporte de massa em leitos de enchimento.

Simulações foram efectuadas também para outros valores de σ_d e σ_D , assim como de N_x . Os resultados para Θ_B mostram que o mesmo comportamento qualitativo é observado independentemente dos valores σ_D e σ_d , e de N_x . Em relação a Pe , observa-se que os desvios, em relação ao comportamento qualitativo previsto para uma rede uniforme, se tornam significativos para valores cada vez mais baixos de γ quanto mais elevados forem os valores σ_D e σ_d , e mais baixos os valores de N_x . Este resultado está de acordo com a conclusão de que o campo de concentrações ainda não alcançou as características limites, sendo o comportamento observado derivado da maior irregularidade do campo de escoamento.

Mesmo tomando em conta as questões anteriores, os resultados mostram que a caracterização qualitativa do transporte de massa em meios porosos pode ser efectuada usando γ como parâmetro qualitativo. O cálculo de γ pode ser efectuado usando o modelo geométrico, descrito na Secção 3.5, assumindo que este é adequado igualmente para o modelo de transporte de massa (ver Secção 4.7). Essas questões vão ser analisadas mais de perto na Secção 5.6.

5.4.4.2 Influência dos valores do desvio padrão das distribuições das dimensões características dos elementos da rede

Nas secções anteriores analisou-se a influência dos valores de σ_D e σ_d do ponto de vista qualitativo, sendo possível retirar algumas conclusões a partir dos resultados apresentados.

- Em relação ao comportamento do algoritmo implementado para resolver o sistema de equações de balanço material, o aumento dos valores de σ_D e σ_d traduz-se em tempos de simulação e necessidades de memória mais elevados. A distribuição de valores de α_j^E , τ_j e τ_i alarga com o aumento dos valores do desvio padrão. Assim, τ^{min} vai baixar, aumentando o número de incrementos espaciais nos canais da rede. Por outro lado, o

aumento dos valores do desvio padrão reduz o erro cometido no balanço material global (ver Secção 5.4.1.4).

- O aumento σ_D e σ_d resulta também no aumento da dispersão de massa, como se pode observar na Figura 5.44. O alargamento da distribuição de valores de τ_j e τ_i que se observa nestas condições, derivada da distribuição mais larga das velocidades do fluido nos canais, é a razão principal deste comportamento.

As alterações observadas no comportamento da rede devem-se à influência dos valores de σ_D e σ_d nas características do campo de escoamento na rede. Na Figura 5.59 são comparados os histogramas das velocidades nos canais oblíquos para dois conjuntos de valores de σ_D e σ_d , para redes 40×20 com $d/D = 0.5$. Foram comparados os casos de escoamento linear e não linear para permitir determinar se o regime de escoamento tem de ser tomado também em conta. Como as redes possuem as mesmas dimensões e valores médios das dimensões características dos elementos da rede, a comparação dos valores de v_j pode ser feita usando os valores reais. Como nas secções anteriores, foram consideradas vinte classes na representação. Notar que a forma de representação apresentada pretende apenas comparar os valores reais de velocidade, não sendo a distribuição real de valores. Em qualquer das situações observa-se que o aumento do valor do desvio padrão influencia decisivamente os valores de v_j nos canais oblíquos.

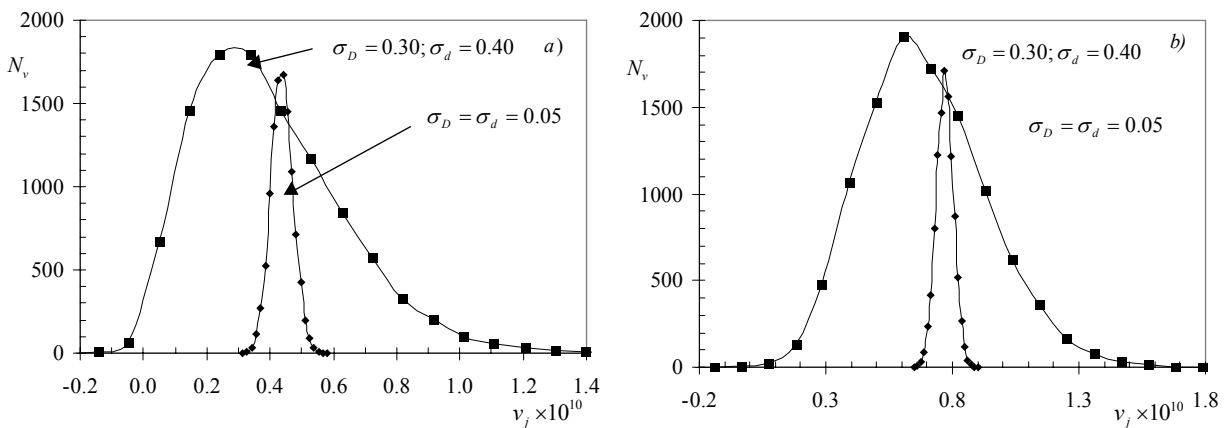


Figura 5.59 Comparação das distribuições das velocidades nos canais oblíquos para dois conjuntos de valores dos desvios padrão das distribuições das dimensões características dos elementos da rede: a) escoamento linear; b) escoamento não linear.

Em particular, a distribuição dos valores de velocidade alarga-se, existindo, para valores elevados de σ_D e σ_d , canais em que v_j é negativo. Distribuições largas dos valores de v_j resultam em distribuições igualmente largas dos valores de α_j^E , τ_i e τ_j , aumentando o número de incrementos nos canais e naturalmente o tempo de simulação e as necessidades de memória para caracterizar o transporte de massa na rede.

Os resultados apresentados na figura anterior mostram que uma das razões do aumento da dispersão para valores elevados de σ_D e σ_d é a distribuição larga de velocidades nos canais, em particular nos canais oblíquos que controlam o escoamento através da rede. No entanto, este efeito deve ser tomado em conta com a estrutura geométrica da rede ao nível local. Na Figura 5.60 é comparada a evolução espacial e temporal da resposta de duas redes a uma perturbação em pulso com uma duração igual a $0.3\tau_G$ para dois conjuntos de valores de σ_D e σ_d . Foram consideradas redes com 40×20 com $d/D = 0.5$. Na Figura 5.60a apresentam-se os resultados para $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$ e na Figura 5.60b os resultados para $\sigma_D = 0.30$ e $\sigma_d = 0.40$. Observa-se para valores mais elevados do desvio padrão um perfil de concentrações irregular, em que a mistura lateral de traçador é mais significativa.

Para o caso em que os valores de desvio padrão são baixos, a dispersão lateral de traçador é pouco significativa, tendo-se observado um ligeiro alargamento do pulso. Outro aspecto também visível é a influência das condições fronteira usadas. Como se usaram as condições de fluxo uniforme na entrada da rede, para o caso $\sigma_D = 0.30$ e $\sigma_d = 0.40$ observam-se irregularidades mais marcadas na concentração de traçador na rede. A distribuição de velocidades mais larga na entrada da rede neste caso requer que, para verificar a condição de fluxo uniforme à entrada da rede, os valores de concentração associados a cada um dos canais de entrada variem de um modo acentuado. Para o caso $\sigma_D = \sigma_d = 0.05$, a distribuição mais apertada de velocidades (ver Figura 5.59) resulta em valores de concentração de traçador nos canais de entrada de fluido mais uniforme, resultando num perfil de concentrações de traçador mais regular. Jones e Smith (2005) observaram perfis de concentração irregulares em leitos de enchimento por areias de quartzo (meio heterogéneo e com uma estrutura muito irregular) sendo a evolução dos perfis qualitativamente similar à prevista pelo simulador de transporte de massa.

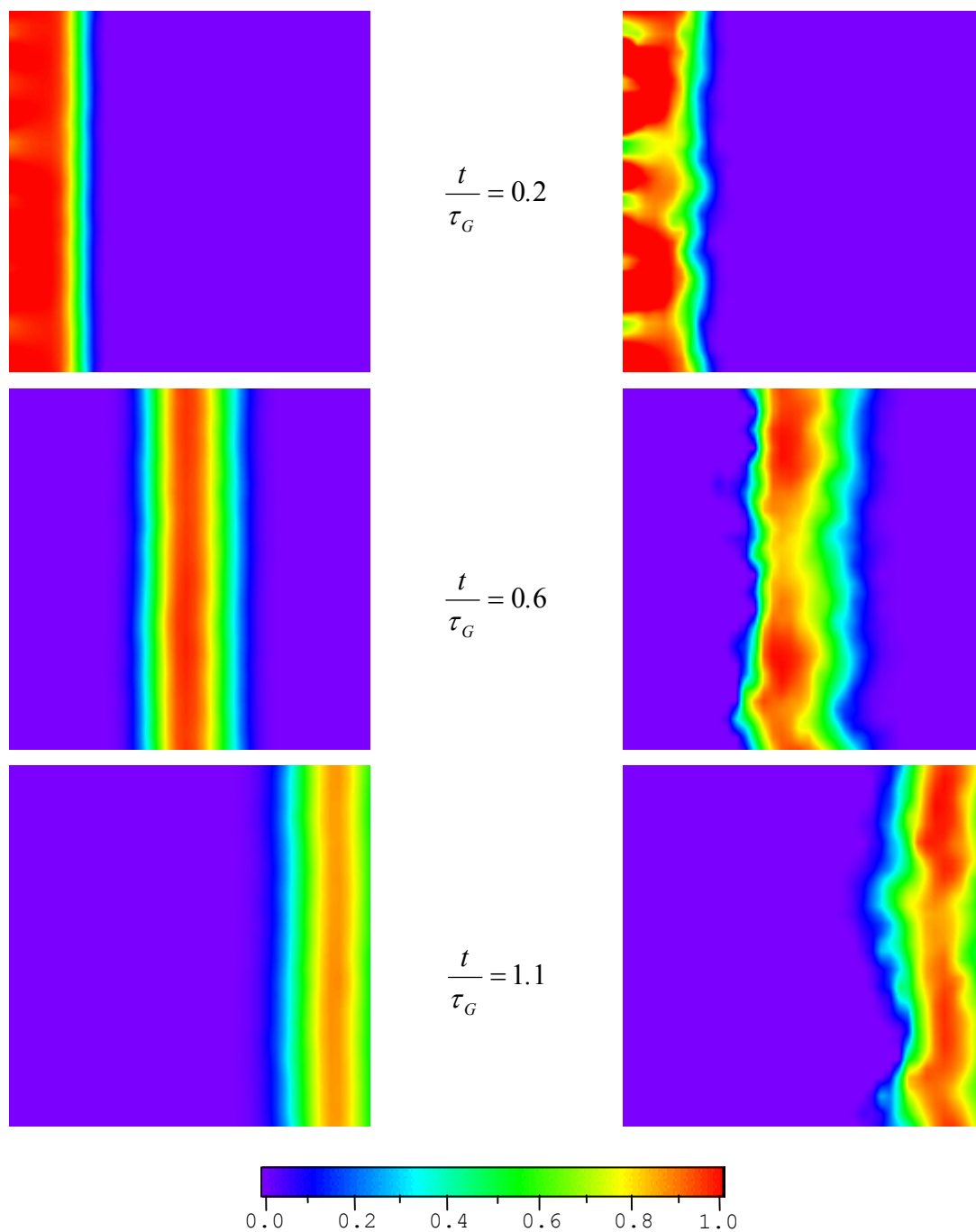


Figura 5.60 Comparação da evolução do perfil de concentrações em redes com diferentes valores de desvio padrão: a) valores baixos; b) valores elevados.

Para confirmar as conclusões anteriores, são apresentadas na Figura 5.61 as distribuições dos valores de α_j^E para diferentes conjuntos de valores de σ_D e σ_d . Foram consideradas redes 100×100 tipo 10 com $d/D = 0.5$. Do ponto de vista geral, é possível observar que o aumento do valor do desvio padrão alarga a distribuição de valores de α_j^E , resultado de uma distribuição mais larga dos valores de velocidade nos canais da rede. No entanto, comparando

valores com igual valor de desvio padrão, observa-se uma influência mais marcada de σ_d . Este comportamento deve-se à maior influência do diâmetro dos canais no escoamento, traduzindo-se numa distribuição de velocidades nos canais mais larga e consequentemente na distribuição de valores de α_j^E .

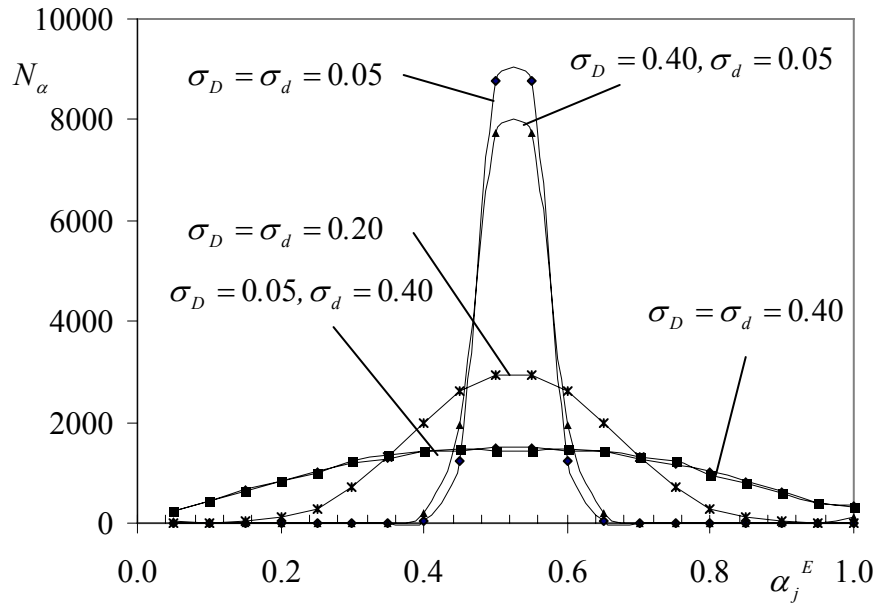


Figura 5.61 Comparação das distribuições de valores de α_j^E para diferentes valores de σ_D e σ_d , para redes 100×100 tipo 10 com $d/D = 0.5$.

A distribuições largas dos valores de α_j^E correspondem também distribuições largas dos valores dos tempos de passagem na rede, resultando em valores de Δt e tempos de simulação mais baixos. Este comportamento foi observado na prática, limitando em alguns casos as dimensões da rede que é possível usar nas simulações do transporte de massa.

5.4.4.3 Influência do comprimento médio dos canais oblíquos

A influência do comprimento médio dos canais oblíquos, l , no transporte de massa na rede resulta da combinação de dois efeitos. Um dos efeitos resulta do aumento da resistência ao escoamento nos ramos da rede, reduzindo a velocidade superficial equivalente do fluido, v_T , aumentando o τ_G e Θ_B . No entanto, na Secção 4.5.4.4 concluiu-se que a influência deste parâmetro é pouco significativa quando comparada com o efeito de variações no diâmetro dos canais. Para regime de escoamento perfeitamente desenvolvido este efeito não é significativo,

pois o termo de resistência associado às ligações entre as câmaras e os canais, R_j^{ET} , é independente de l .

Além do efeito no escoamento, variações em l alteram a razão entre os volumes de vazios na rede. De acordo com a definição de γ , Equação 5.59, e tomando a relação de proporcionalidade existente com o parâmetro α , aumentar l_0 aumenta também γ . Assim, Pe e Θ_B também aumentam, indicando que a importância da convecção é proporcional ao valor de l_0 . Comportamento idêntico deverá ser verificado para redes não uniformes.

Na Figura 5.62 são comparadas as distribuições de tempos de residência obtidas em redes 20×30 , com $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$ e $d/D = 0.5$. Foram considerados seis valores de l : 0.002, 0.004, 0.008, 0.012, 0.015 e 0.020, de acordo com a hipótese (confirmada no Capítulo 3) que os valores de l_0 num meio poroso real são da mesma ordem de grandeza dos valores de d e D . Observa-se que quanto maior é l_0 maior é o máximo das curvas $E(\Theta)$ e menor é o valor do desvio padrão, confirmando as conclusões anteriores que Pe aumenta com l .

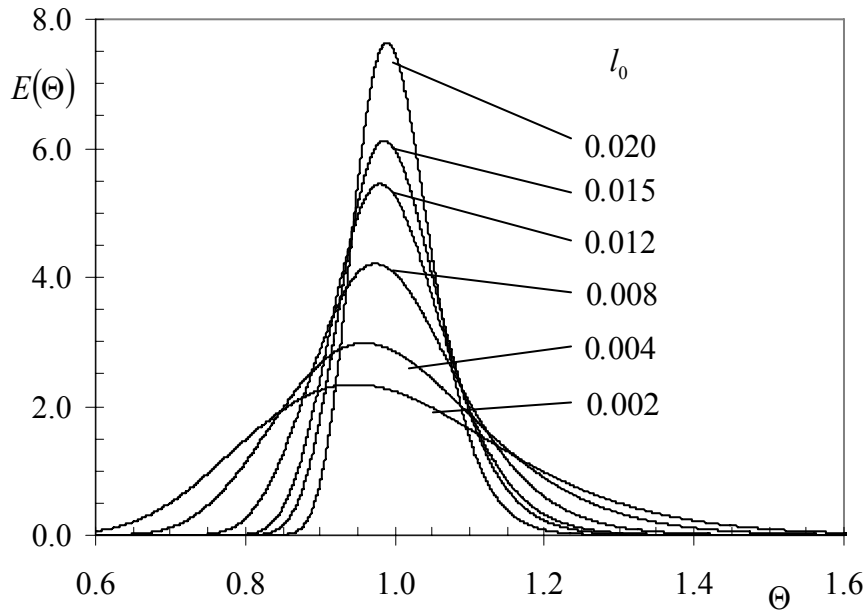


Figura 5.62 Distribuições de tempos de residência normalizadas para redes 20×30 , com $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$, para vários valores de l .

As conclusões anteriores levariam a pensar que a resposta da rede (usando valores de concentração de traçador e de tempo não normalizados é influenciada por l . Na Figura 5.63 são comparadas as curvas $F(t)$ correspondentes às curvas da $E(\Theta)$ para l : 0.004, 0.008 e 0.015, valores representativos dos diferentes tipos de comportamento observado na Figura

5.62. Observa-se que as curvas são qualitativamente idênticas, alterando apenas a gama de valores em que o traçador sai da rede. Este facto deve-se ao aumento do tempo de passagem global da rede, τ_G , devido principalmente ao aumento da resistência total da rede ao escoamento e consequente redução da velocidade superficial equivalente do fluido através da rede.

Os resultados mostram que o alargamento da zona em que se faz sentir a influência da perturbação do traçador depende essencialmente de N_x (ver Figura 5.41), desde que as características geométricas e dos elementos estejam fixadas.

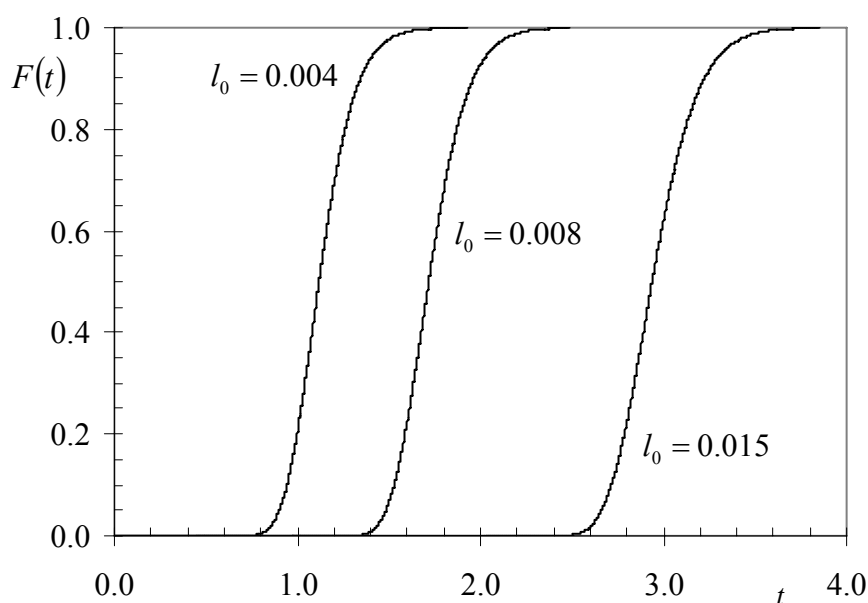


Figura 5.63 Curvas $F(t)$ correspondentes às distribuições de tempos de residência apresentadas na Figura 5.62.

O comportamento revela que os factores mais importantes na previsão do comportamento da rede são as dimensões da rede segundo o sentido de escoamento e d/D , directamente relacionado com a razão entre os volumes de vazios na rede.

Os resultados apresentados nas duas figuras anteriores foram obtidos para redes com um valor baixo de N_x . Como a importância da convecção aumenta com o aumento de N_x , interessa saber como é que variam os valores dos parâmetros que caracterizam o comportamento da rede em função de l_0 para diferentes valores de N_x . Na Figura 5.64 são comparados os valores previstos de Pe^* e Θ_B^* em função de N_x , para três valores de l : 0.004, 0.008 e 0.015. Foram consideradas redes com $N_y = 30$, $\sigma_D = \sigma_d = 0.20$ e $d/D = 0.5$. O valor de N_y

usado assegura que a influência das paredes da rede é desprezável no comportamento da rede. Qualquer das curvas apresentadas de Pe^* em função de N_x possui o mesmo comportamento qualitativo, mostrando que a influência de l é similar. Observa-se no entanto que os valores previstos de Pe^* diminuem com o aumento de l .

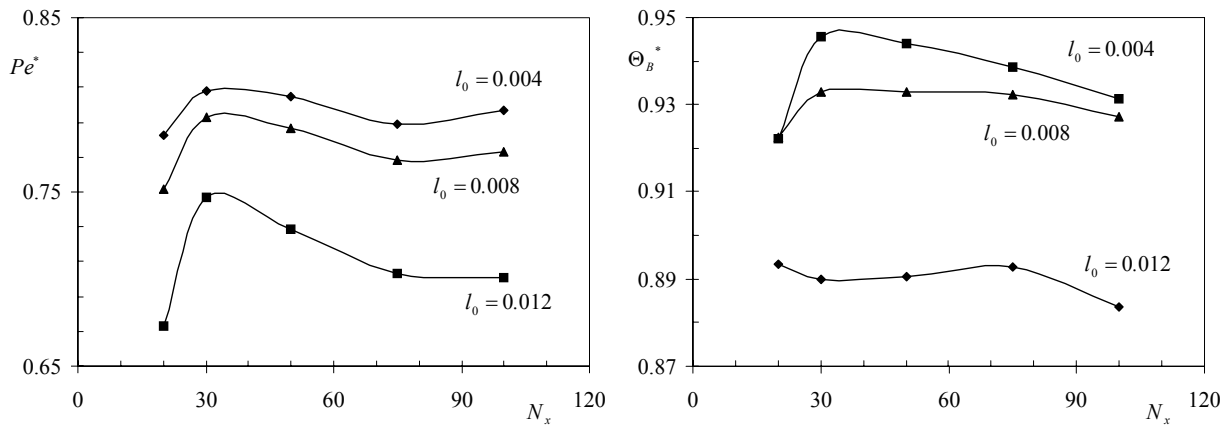


Figura 5.64 Valores de: a) o número de Peclet normalizado; b) tempo de breakthrough adimensional normalizado; em função de N_x para três valores de l_0 .

O comportamento observado deve-se ao aumento da importância do comportamento dos canais, resultando em desvios mais pronunciados entre os valores previstos de Pe e Pe^* . Como a importância da mistura nas câmaras diminui com o aumento de l_0 , os efeitos da distribuição de velocidades nos canais da rede aumentam com o aumento do valor do comprimento médio dos canais.

Este comportamento é observado também nos valores previstos de Pe^* em função de N_x , em que se observa uma diminuição do valor deste parâmetro com o aumento de l , resultado da maior importância da distribuição de velocidades nos canais nestas condições.

Na Figura 5.65 são apresentados e comparados os valores previstos de Pe e Θ_B em função de N_x para os mesmos resultados apresentados na figura anterior. Observa-se que o aumento de l aumenta a importância da convecção no transporte de massa através da rede, de acordo com as conclusões anteriores. No entanto, esta forma de representação dos resultados não permite tirar conclusões sobre a importância relativa da distribuição de valores de v_j .

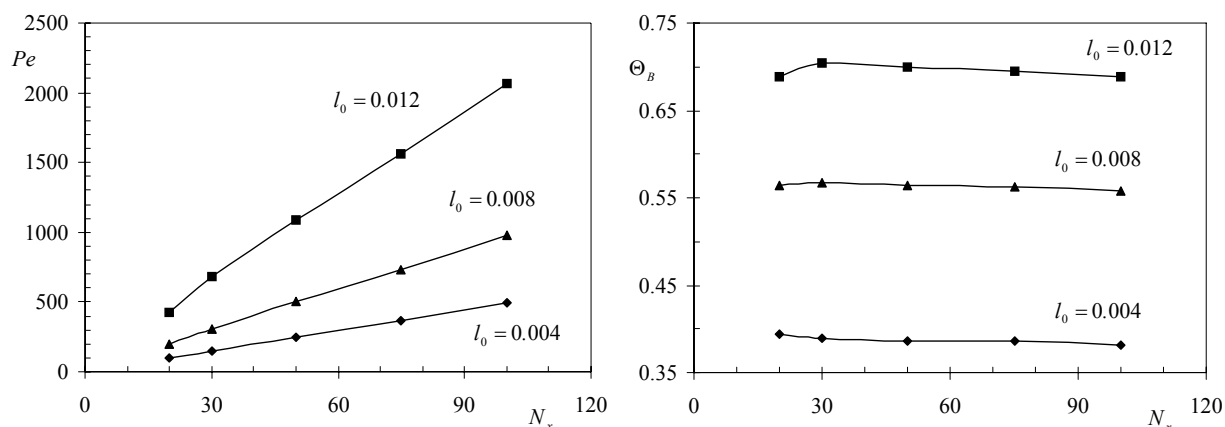


Figura 5.65 Valores de: a) o número de Peclet; b) tempo de breakthrough normalizado; em função de N_x para três valores de l_0 .

5.5 Comportamento previsto usando os modelos geométricos

Na Secção 4.7 mostrou-se que o simulador hidrodinâmico quando usado em conjunto com o modelo geométrico é capaz de prever o comportamento hidrodinâmico de um meio poroso real, em particular leitos de enchimento formados por partículas de forma aproximadamente esférica com uma distribuição apertada dos diâmetros equivalentes. Nesta secção é analisada a possibilidade de estender a utilização do modelo geométrico e de escoamento na previsão das características do transporte de massa através de um rede de câmaras e canais.

De acordo com as conclusões das Secções 4.6 e 4.7, apenas vão ser usados os modelos simplificados T1S e T2S, em que θ é previsto em função de ε usando a analogia entre a tortuosidade e a estrutura da rede. Ambas as equações que permitem determinar θ em função de ε vão ser consideradas. Deste modo, ao contrário das hipóteses consideradas nas Secções 5.4.1, 5.4.3 e 5.4.4, agora é possível obter conclusões em relação à influência de θ e ε no transporte de massa na rede.

Como no Capítulo 4, coloca-se a questão de saber quais as características da rede que deverão ser usadas na análise do comportamento previsto quando é usado o modelo geométrico em conjunto com o simulador hidrodinâmico.

- O aspecto mais importante é a estrutura da rede. De acordo com as hipóteses do modelo geométrico, a rede deverá ser uniforme. De acordo com os resultados da Secção 5.4.3.3, os valores previstos por uma rede uniforme são adequados desde que os valores de σ_D e

σ_d sejam baixos, independentemente de d/D . Assim, a utilização de redes uniformes é adequada.

- Outro aspecto diz respeito às dimensões da rede, em particular segundo o sentido principal de escoamento na rede. Os resultados da Secção 5.4.3.1 mostram que desde que $N_x > 100$, D_L tende para um valor constante, indicativo de que o comportamento assintótico foi alcançado. Como se pretende que o modelo permita prever o valor do coeficiente de dispersão longitudinal, foram consideradas preferencialmente redes com valores elevados de N_x . Na Secção 5.4.3.1 verificou-se também que a influência de N_y é pouco significativa, sendo irrelevante quando uma rede uniforme é considerada.
- As condições de escoamento também devem ser tomadas em conta. Os resultados da Secção 5.4.3.1 e a comparação qualitativa com os dados experimentais publicados (Perkins, 1963; Dullien, 1992; Sahimi, 1995) mostram que o modelo proposto é válido para valores de Pe elevados, pelo menos $Pe_M > 300$. Estas condições correspondem normalmente a escoamento em regime não linear. Nesta secção são usadas apenas redes uniformes, pelo que a influência das condições de escoamento vai-se sentir apenas nos valores previstos de D_L .

5.5.1 Parâmetros adimensionais em função da porosidade

Na Secção 5.3.8 mostrou-se que os valores de Pe e Θ_B para uma rede uniforme são função apenas de N_x e γ , de acordo com as Equações 5.63 e 5.64. O parâmetro γ pode ser expresso em função da razão entre os tempos de passagem nos canais e nas câmaras da rede equivalente, τ_j/τ_i^* , que por sua vez pode ser expresso em função dos valores das dimensões dos elementos da rede: D , d e l . De acordo com o modelo geométrico, estes podem ser expressos em função de ε e D_p , diâmetro médio das partículas que constituem o leito de enchimento. Assim, é possível exprimir γ , e consequentemente Pe e Θ_B , como funções apenas da porosidade. Substituindo as relações de proporcionalidade entre os valores médios das dimensões características dos elementos da rede (ver Secção 3.5) é possível obter expressões analíticas para γ e Θ_B . Quando o volume das calotes não é tomado em conta, as seguintes expressões são obtidas

$$\gamma = \frac{N_x + 1}{N_x} \frac{3K_d^2 K_l}{K_D^3} \quad (5.70)$$

$$\Theta_B = 1 - \frac{1}{1 + \frac{N_x + 1}{N_x} \frac{3K_d^2 K_l}{K_D^3}}, \quad (5.71)$$

$$Pe = 2N_x \left(1 + \frac{N_x + 1}{N_x} \frac{3K_d^2 K_l}{K_D^3} \right)^2 \quad (5.72)$$

Quando o volume das calotes é tomado em conta, as expressões devem ser escritas na forma

$$\gamma = \frac{N_x + 1}{N_x} \left\{ \frac{3K_d^2 K_l}{K_D^3} - K_{N_x} \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{K_d}{K_D} \right)^2} \right]^2 \left[1 + 0.5 \sqrt{1 - \left(\frac{K_d}{K_D} \right)^2} \right] \right\} \quad (5.73)$$

$$\Theta_B = 1 - \frac{1}{1 + \frac{N_x + 1}{N_x} \left\{ \frac{3d^2 l}{D^3} - K_{N_x} \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{K_d}{K_D} \right)^2} \right]^2 \left[1 + 0.5 \sqrt{1 - \left(\frac{K_d}{K_D} \right)^2} \right] \right\}} \quad (5.74)$$

$$Pe = 2N_x \left[1 + \frac{N_x + 1}{N_x} \left\{ \frac{3K_d^2 K_l}{K_D^3} - K_{N_x} \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{K_d}{K_D} \right)^2} \right]^2 \left[1 + 0.5 \sqrt{1 - \left(\frac{K_d}{K_D} \right)^2} \right] \right\} \right]^2 \quad (5.75)$$

Notar que as expressões apresentadas de Pe são válidas para valores elevados de N_x , condições em que os valores de D_L previstos pelo modelo alcançaram os seus valores limite.

Na Figura 5.66 são apresentados os valores de Pe em função de ε para os modelos T1S e T2S, sendo comparadas as duas equações de $T(\varepsilon)$ consideradas neste trabalho. Os valores previstos de Pe foram divididos por N_x para permitir que as conclusões obtidas sejam independentes das dimensões da rede. Na secção seguinte este procedimento será justificado convenientemente. Nestas condições as variações do número de Peclet devem-se apenas à variação dos valores de d , D e l em função de ε . Observa-se em todos os casos o mesmo comportamento qualitativo. A dependência de Pe/N_x em função de ε observada é similar à observada para d/D em função de ε , de acordo com a relação de proporcionalidade entre os

dois parâmetros observada nas secções anteriores (ver Secção 5.4.4.1). As diferenças mais significativas ocorrem para valores de $\varepsilon \approx 0.4$, correspondente à gama de valores de porosidade em que o $d/D \approx 1$. As maiores diferenças nessa gama de valores de porosidade observam-se para o modelo T2S. De acordo com os resultados apresentados na Secção 3.5.5, a variação do valor de l_0 é distinta para as duas equações usadas de $T(\varepsilon)$, resultando em diferenças apreciáveis quando $d/D \approx 1$, de acordo com os resultados apresentados nas Figuras 3.56 a 3.59 (notar que, de acordo com o modelo geométrico, $d/D = K_d/K_D$).

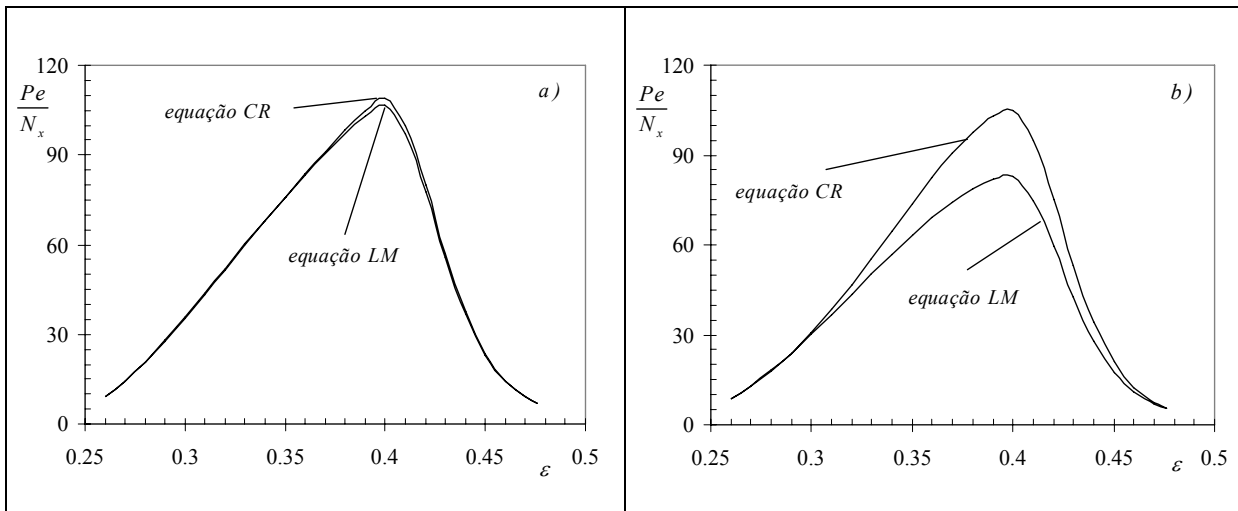


Figura 5.66 Número de Peclet dividido pelo número de linhas de câmaras da rede em função da porosidade para: a) modelo T1S; b) modelo T2S; para as duas equações de $T(\varepsilon)$ consideradas neste trabalho.

Os valores previstos de Pe em função de ε pelos dois modelos para a mesma expressão de $T(\varepsilon)$ são comparados na Figura 5.67. Verifica-se que os valores previstos pelas duas equações são similares, observando-se novamente as maiores diferenças para $\varepsilon \approx 0.4$.

Os resultados são qualitativamente similares aos apresentados na Figura 5.66, sendo novamente explicadas as diferenças observadas pelas diferenças nos valores de l previstos pelos diferentes modelos, que compensam a influência da inclusão ou não das calotes nos valores estimados de γ . Observa-se que as diferenças entre os valores previstos pelo modelo são superiores quando a equação LM é usada, em particular para valores de porosidade na vizinhança de 0.4, em que o valor da razão $d/D \approx 1$ e a influência das calotes é mais significativa.

As maiores diferenças entre os valores previstos pelas diferentes variantes do modelo geométrico observam-se para gamas de valores de ε em que o controle dos mecanismos de transporte de massa convectivos são mais marcados. Nessas condições e em particular para

valores elevados de N_x , apesar das diferenças entre os valores de Pe poderem ser significativas, como correspondem a curvas $E(\Theta)$ com uma dispersão muito baixa, estas serão difíceis de diferenciar, em particular experimentalmente.

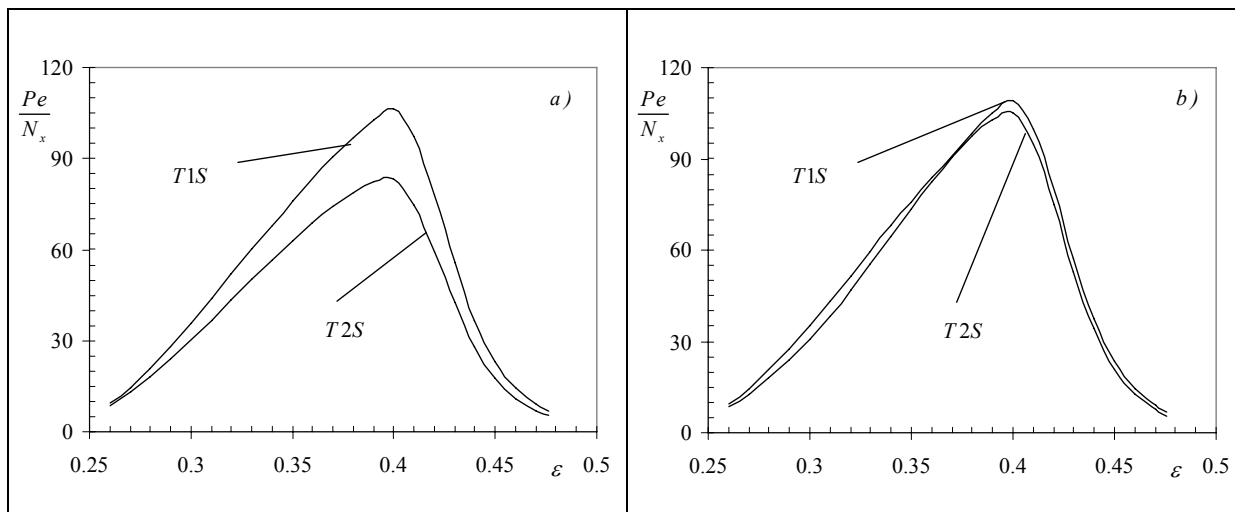


Figura 5.67 Comparação dos valores previstos do número de Peclet dividido pelo número de linhas de câmaras da rede em função da porosidade pelos modelos T1S e T2S para: a) equação LM; b) equação CR.

Por outro lado, as previsões do modelo geométrico permitem concluir que para leitos de enchimento com uma distribuição apertada dos diâmetros equivalentes das partículas é possível assumir que o escoamento é pistão a partir de um dado valor de N_x . Este valor vai depender das características do meio poroso, sendo possível usar o modelo geométrico para determinar este valor limite em função de ε .

Na Figura 5.68 são comparados os valores de Θ_B em função de ε previstos usando os modelos T1S e T2S para as duas expressões de $T(\varepsilon)$ consideradas neste trabalho. Observa-se o mesmo comportamento qualitativo já observado anteriormente para os valores previstos de Pe/N_x . Assim, não foram comparados graficamente os valores de Θ_B previstos por modelos diferentes para a mesma expressão de $T(\varepsilon)$. As diferenças mais significativas observam-se nos valores previstos pelo modelo T2S, em que o volume das calotes devido às ligações entre as câmaras e os canais são tomadas em conta. Este volume é mais significativo na gama de valores de porosidade em torno a 0.4, correspondente a valores de $(d/D) \approx 1$. No entanto, as diferenças entre os valores previstos pelos diferentes modelos não são significativas na gama de valores de porosidade em que os modelos geométricos estão definidos.

Os resultados anteriores mostram que a influência da inclusão ou não do volume das calotes não é significativa na caracterização das características do transporte de massa com base nos

modelos geométricos. No entanto, conclui-se nas secções anteriores que a inclusão do volume das calotes é essencial para determinar os valores correctos do volume de vazios da rede e de τ_G . Esta restrição restringe a aplicabilidade do modelo T1S, em que o volume das calotes não é tomado em conta. Tomando em conta os aspectos referidos, nas secções seguintes será considerado preferencialmente o modelo T2S com as duas variantes da expressão $T(\varepsilon)$ usadas neste trabalho.

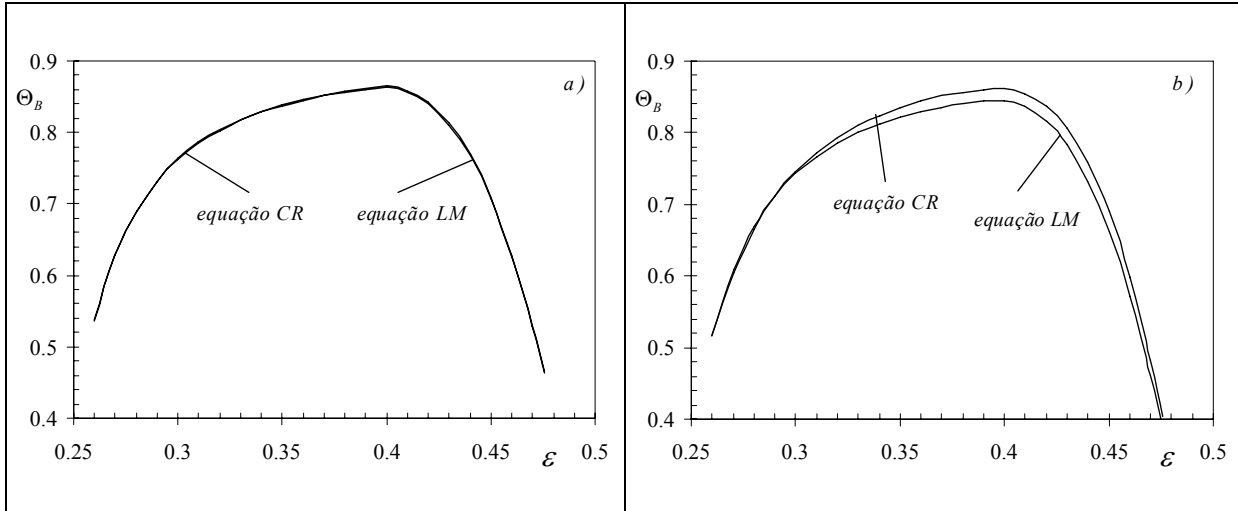


Figura 5.68 Valores do tempos adimensional de Breakthrough em função da porosidade para: a) modelo T1S; b) modelo T2S; para as duas equações de $T(\varepsilon)$ consideradas neste trabalho.

5.5.2 Comportamento previsto para o coeficiente de dispersão longitudinal

Como na secção anterior foram usadas redes uniformes, os valores de Pe e Θ_B não dependem das características do escoamento (ver Secção 5.3.8.2), mas de acordo com a Equação 5.44, devem depender das condições de escoamento e das dimensões da rede. Para este último aspecto observou-se em particular na Secção 5.4.3.1 que D_L tende para um valor constante com o aumento do comprimento da rede, desde que as condições de escoamento se mantenham constantes.

Para verificar se o mesmo comportamento é observado quando o modelo geométrico é usado, na Figura 5.69 são comparados os valores previstos de D_L em função de N_x usando o modelo T2S com a equação LM. Foram consideradas redes uniformes com $N_y = 100$, vários valores de ε dentro da gama de validade do modelo geométrico, $D_p = 0.005$, e as mesmas condições de escoamento em todas as simulações. De modo a simplificar a comparação entre os diferentes casos estudados, nas figuras representou-se a razão D_L/D_L^{Max} , sendo D_L^{Max} o

maior valor de D_L obtido, correspondente em todos os casos ao valor previsto para o maior valor de N_x considerado. O mesmo comportamento qualitativo é observado para todos os valores de ε considerados. Para valores elevados de N_x , D_L/D_L^{Max} tende para 1 em todos os casos. Desde que $N_x \geq 50$, é possível assumir com um erro igual ou inferior a 1%, que as condições limite foram alcançadas. Como o comportamento qualitativo e quantitativo previsto para os diferentes modelos geométricos é similar, as conclusões obtidas para o modelo T2S/LM são válidas para os outros modelos.

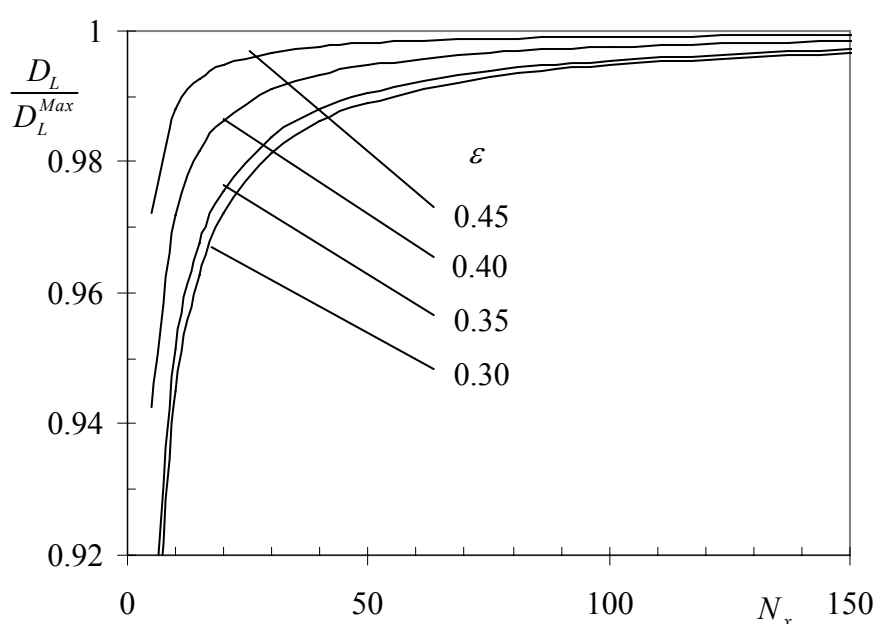


Figura 5.69 Valores de coeficiente de dispersão longitudinal em função da dimensão segundo o sentido principal do escoamento para o modelo T2S usando a equação LM.

No entanto, observam-se diferenças entre os valores previstos para diferentes valores de ε . Em particular, para valores de ε entre 0.35 e 0.4, o valor limite de N_x é mais elevado. Nesta gama de valores de porosidade, os valores de γ previstos pelo modelo geométrico são mais elevados, traduzindo uma maior influência da convecção no comportamento da rede. Nestas condições, D_L depende em maior medida do perfil do escoamento na rede, não sendo tão marcado o efeito do comportamento das câmaras da rede. Este efeito é mais marcado nos limites da gama de valores de porosidade, em que valores de d/D mais baixos resultam em valores de γ também mais baixos, resultando numa maior influência das câmaras no comportamento previsto para a rede.

Os resultados apresentados na Figura 5.69 foram obtidos mantendo-se constante o caudal volumétrico total de fluido, q_T , através da rede, variando N_x . Nestas condições, apesar do aumento da resistência da rede, v_T tende para um valor constante pois este parâmetro depende apenas de E_R , parâmetro que tende para uma constante para valores elevados de N_x (ver resultados da Secção 3.7). Por outro lado, L_x aumenta linearmente com o aumento de N_x . De acordo com a Equação 5.64, Pe também varia linearmente com o valor de N_x para redes uniformes, pelo que, de acordo com a Equação 5.44, os dois efeitos se actuam em sentidos contrários, resultando então em valores previstos praticamente constantes para D_L .

Este comportamento deve-se à forma do número de Peclet considerada neste trabalho usando a igualdade entre os segundos momentos estatísticos das respostas obtidas pelo simulador e a expressão analítica do modelo de dispersão axial. Na literatura, os dados experimentais são representados na forma D_L/D_M em função de Pe_p (definido pela Equação 5.68), observando-se nessa situação uma relação de proporcionalidade entre os dois parâmetros (Dullien, 1992; Sahimi, 1995), em que se observa um aumento de D_L com o aumento Pe . No entanto, na maior parte dos estudos Pe é definido com base na difusividade molecular, pelo que uma comparação directa não pode ser efectuada neste trabalho.

A opção de manter N_x constante, mantendo assim Pe constante para uma rede uniforme, foi parcialmente analisada nas Secções 5.4.2.1 e 5.4.3.3, tendo-se concluído que o parâmetro D_L/D_M é proporcional a Pe_M^n . Para redes uniformes obtém-se $n=1$, situação correspondente ao comportamento observado num meio poroso quando o transporte de massa por convecção é dominante (Bear, 1972). No entanto, mostrou-se que a constante de proporcionalidade A_L era função das dimensões da rede (ver Secção 5.4.2.1), sendo uma opção mais correcta representar os resultados previstos em função de Pe_p^n . O valor de n mantém-se mas o valor da constante de proporcionalidade A_p depende apenas das características geométricas da rede e dos seus elementos, de acordo com a Equação 5.69.

Usando as relações de proporcionalidade entre os valores médios das dimensões características dos elementos da rede e da porosidade e do diâmetro médio equivalente das partículas que formam o meio poroso, a seguinte expressão para A_p é obtida

$$A_p \approx \frac{N_x + 1}{N_x} \left[\frac{K_D + K_l - 2K_h}{2(1 + \gamma)^2} \right] \cos \theta \quad (5.76)$$

em que se realçou a influência da porosidade nas relações de proporcionalidade entre os valores de D , l_0 e h , e D_p . A expressão anterior é válida também para o modelo T1S, bastando fazer $K_h = 0$. Nos modelos simplificados θ e γ podem ser expressos em função de ε , usando a analogia entre a tortuosidade e a estrutura da rede para o primeiro parâmetro, e as Equações 5.73 e 5.70 para γ conforme se toma ou não em conta a influência das calotes respectivamente.

Na Figura 5.70 são apresentados e comparados os valores previstos de A_p em função de ε para os modelos T1S e T2S usando as duas equações de $T(\varepsilon)$ consideradas neste trabalho. Foram consideradas redes com $N_x = 1000$, valor que assegura que a influência das dimensões da rede segundo o sentido principal de escoamento não é significativa. Observa-se que os valores previstos pelas duas equações de $T(\varepsilon)$ são similares nos dois modelos, assim como os valores previstos por modelos diferentes, justificando assim a não comparação dos valores previstos pelos modelos T1S e T2S para a mesma equação de $T(\varepsilon)$. As diferenças são sempre inferiores a 5% (mais elevados para o modelo T2S), permitindo concluir que qualquer dos modelos geométricos é adequado para descrever o comportamento da rede. Como é no modelo T2S que o volume correcto dos vazios da rede é considerado, este deverá ser o preferido.

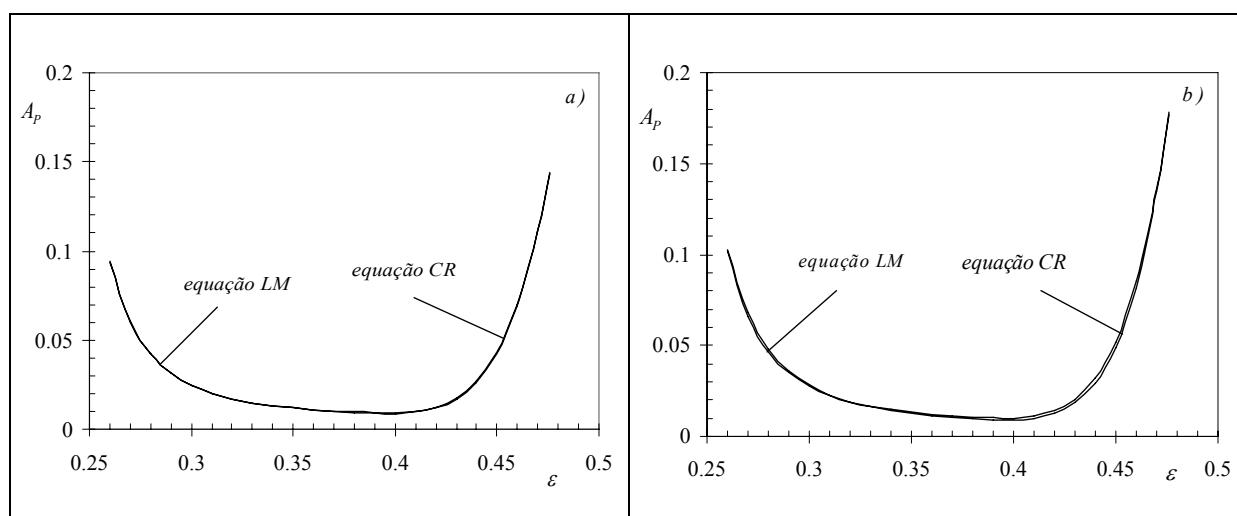


Figura 5.70 Valores de A_p em função da porosidade para: a) modelo T1S; b) modelo T2S; usando as duas equações de $T(\varepsilon)$ consideradas neste trabalho.

Os valores previstos da constante A_p são aproximadamente constantes numa gama larga de valores de porosidade, em que se incluem os valores de ε normalmente encontrados na prática. Este comportamento permite explicar o facto de os dados experimentais representados na forma D_L/D_M em função de Pe_p serem bem representados por uma relação linear quando os efeitos da convecção são dominantes no transporte de massa através de um meio poroso.

5.6 Comparação com dados experimentais

O modelo para o transporte de massa na rede de elementos desenvolvido neste trabalho baseia-se na determinação prévia do campo de escoamento, em particular a distribuição das velocidades do fluido nos canais. É natural então assumir que as condições impostas na comparação entre valores previstos e experimentais dos parâmetros que caracterizam o comportamento hidrodinâmico de um meio poroso sejam também aplicáveis aqui, em particular a utilização de redes uniformes. Deste modo, devem ser usados preferencialmente conjuntos de dados experimentais ou correlações obtidas em leitos de enchimentos formados por partículas com uma distribuição apertada de diâmetros e nos quais os efeitos de parede e de entrada do fluido sejam desprezáveis.

As conclusões das Secções 5.3.8.3 e 5.4.2.1 mostram também que devem ser usados conjuntos ou dados experimentais em que o transporte de massa é dominado pela convecção, situação em que D_L é proporcional a v_T e que se verifica desde que $Pe_p > 300$. Usando a Equação 5.66 e assumindo que a rede é suficientemente grande na direcção principal do escoamento ($N_x > 100$), a relação entre D_L e v_T pode ser escrita para o caso geral em que as calotes são tomadas em conta na forma

$$D_L = \frac{(l + D - 2h)\cos\theta}{2(1 + \gamma)^2} v_T = \alpha_L v_T \quad (5.77)$$

em que α_L é a dispersividade do meio poroso (Xu e Eckstein, 1997), cujas unidades são o metro (m). Tomando em conta a definição de γ , Equação 5.59, e as relações entre os valores médios das dimensões características dos elementos da rede obtidas no modelo geométrico, α_L para o modelo T1S é definido pela expressão

$$\alpha_L = \frac{(K_l + K_D)D_p \cos \theta}{2 \left(1 + \frac{3K_l K_d^2}{K_D^3} \right)^2} \quad (5.78)$$

e para o modelo T2S pela expressão

$$\alpha_L = \frac{(K_l + K_D - 2K_h)D_p \cos \theta}{2 \left\{ 1 + \frac{3K_l K_d^2}{K_D^3} - \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{K_d}{K_D} \right)^2} \right]^2 \left[1 + 0.5 \sqrt{1 - \left(\frac{K_d}{K_D} \right)^2} \right] \right\}} \quad (5.79)$$

As expressões anteriores mostram que para uma rede uniforme e usando o modelo geométrico, α_L é função de D_p e ε . Quando o valor da razão d/D não é muito próximo de 1 as duas expressões prevêm essencialmente os mesmos valores de dispersividade, sendo possível usar quase sempre a Equação 5.78 com um erro desprezável. Para redes não uniformes as relações são uma aproximação da realidade, tanto pior quando maior for o valor do desvio padrão (dispersão) das distribuições dos valores de D e d .

Coloca-se agora a questão de se saber qual é o modelo que deve ser usado na comparação com dados experimentais. Tomando em conta os resultados apresentados na Secção 5.5, as previsões dos diferentes modelos são muito similares. Mesmo para a comparação das duas Equações de $T(\varepsilon)$ para o modelo T2S, em que se observam algumas diferenças para valores de porosidade em torno de 0.4, estas ocorrem quando os valores de Peclet são elevados, pelo que não são significativas em relação à resposta da rede. Assim, como os resultados serão essencialmente os mesmos para os diversos modelos geométricos, apenas será considerado o modelo T2S com a Equação CM para o resto desta secção.

Os resultados experimentais de Montillet *et al.* (1993) têm um comportamento qualitativo concordante com as previsões da Equação 5.77. Estes autores estudaram o transporte de massa em leitos de enchimento formados por partículas de diferentes geometrias e distribuições das dimensões características, em que se incluem partículas esféricas com uma distribuição apertada de diâmetros. Na Tabela 5.3 são listados os diâmetros médios das partículas e porosidades dos leitos de enchimento com partículas esféricas, e os valores experimentais de dispersividade. Os resultados experimentais mostram que α_L varia linearmente com D_p , de acordo com as previsões das Equações 5.78 e 5.79.

Na Tabela 5.3 são também apresentados os valores previstos de α_L usando redes uniformes e o modelo geométrico para prever os valores médios das dimensões características da rede equivalente. Apesar dos resultados mostrarem que existe uma boa concordância qualitativa entre o comportamento previsto pelo modelo de redes e o observado experimentalmente, quando se efectua a comparação quantitativa observa-se que os valores previstos são sempre inferiores aos experimentais.

Por exemplo, para $D_p = 0.002m$ o valor experimental é $\alpha_L = 0.0076m$ e o valor previsto é $\alpha_L = 0.000018m$, correspondendo a uma razão entre os dois valores aproximadamente igual a 423.7. A razão entre valores experimental e teórico da dispersividade, χ , foi determinada, sendo estes valores apresentados na Tabela 5.3. Os resultados permitem concluir que o valor deste parâmetro é independente do valor de D_p . Esta conclusão é válida pelo menos para leitos de enchimento formados por partículas esféricas com uma distribuição apertada de diâmetros, que são os meios porosos para os quais o modelo geométrico é mais adequado, de acordo com as conclusões dos Capítulos 2 e 3.

Tabela 5.3 Condições e resultados experimentais de Montillet et al. (1993), e valores previstos de α_L .

D_p (m)	ε	α_L^{Exp} (m)	α_L (m)	χ
0.002	0.36	0.0076	0.000018	423.7
0.003	0.36	0.0114	0.000027	423.7
0.004	0.36	0.0152	0.000036	423.7
0.005	0.36	0.0190	0.000045	423.7

O facto de χ ser constante significa que as características qualitativas do escoamento ao nível local são idênticas no modelo de redes e experimentalmente, mesmo variando D_p . Os resultados anteriores mostram que a utilização conjunta dos modelos de escoamento e geométrico é adequada para descrever o transporte de massa através da rede de elementos, pelo menos qualitativamente. Apesar dos valores de D_p poderem ser diferentes entre os diferentes leitos de enchimento, do mesmo modo que se conclui no Capítulo 4 para os parâmetros A e B , χ é independente do valor de D_p se o modelo de redes for válido. Como

para meios porosos reais os dados experimentais apresentados por Ergun (1952) e MacDonald *et al.* (1979) mostram que, apesar das variações dos valores de A e B , um valor médio adequado pode ser encontrado para cada um deles, suportando a ideia de que χ é independente das características do meio poroso, pelo menos o seu valor médio.

Apesar do sucesso na descrição do comportamento da rede em condições em que a convecção é dominante, o modelo de redes prevê valores muito baixos quando comparados com os dados experimentais. Usando os dados de Xu e Eckstein (1997) ou Sahimi (1995) a mesma situação verifica-se. Diferentes razões podem ser apontadas para justificar as diferenças observadas.

Em primeiro lugar, como D_L é uma medida quantitativa da importância relativa da dispersão de massa, um valor mais baixo significa que o modelo de redes prevê menos mistura do fluido que a observada experimentalmente. Uma das razões poderá ser a utilização de redes uniformes, que representam um caso limite em que a dispersão de massa é mínima, fruto das características particulares do campo de escoamento. No entanto, os resultados das Secções 5.4.2.1 e 5.4.4.2 mostram que, apesar dos valores de Pe baixarem quando as distribuições dos valores de D e d não são uniformes e mais realista, correspondendo a valores mais elevados de D_L , não permite justificar as diferenças observadas. Por outro lado, a utilização do modelo geométrico está restringida a distribuições pontuais ou com dispersão de valores baixa.

As hipóteses impostas para a estrutura da rede podem ser outra razão para as diferenças observadas. Em particular, quando comparadas as estruturas locais de um meio poroso real e de um modelo de redes são normalmente muito diferentes. O modelo geométrico foi desenvolvido assumindo que cada linha de câmaras é equivalente a uma linha de câmaras da rede (ver Secção 3.5.4). Esta hipótese não toma em conta a possibilidade de existência de caminhos preferenciais na rede, situação que reduz a mistura de fluido e aumenta a importância relativa da convecção. Estas conclusões contradizem as conclusões anteriores, que mostram que o modelo de redes subavalia a dispersão num meio poroso real.

Outra possibilidade está associada à remoção de câmaras e/ou canais. Este procedimento dá origem a redes com uma estrutura irregular e que deverão ser mais representativas da estrutura irregular da estrutura de um meio poroso real. Os resultados da Secção 4.5.4.3 mostram que a remoção de câmaras e canais oblíquos tem um impacto significativo no comportamento da rede. A remoção de canais horizontais tem um impacto reduzido no campo de escoamento, pelo que estes elementos vão ser pouco influentes no comportamento previsto

pelo modelo de transporte de massa. A remoção de elementos, em particular canais oblíquos, aumenta a resistência global da rede para o escoamento. Esta variação resulta na redução da velocidade superficial equivalente do fluido através da rede, baixando Pe e consequentemente aumentando D_L e α_L . Por outro lado a distribuição dos valores de velocidade do fluido nos canais alarga-se, resultando em maior mistura do fluido e consequentemente maior dispersão. No entanto, a remoção de câmaras e/ou canais oblíquos reduz o número de canais associados às câmaras, situação que reduz a mistura entre correntes de fluido com diferentes concentrações de traçador, aumentando assim a importância relativa da convecção. Os dois efeitos actuam em sentidos contrários, e, apesar de se esperar que a remoção de câmaras e/ou canais aumente a dispersão de massa, não é de se esperar que só por si seja capaz de justificar as diferenças observadas entre valores previstos e experimentais. A conclusão anterior é suportada pelos resultados da Secção 4.7, em que se mostrou que, pelo menos para o escoamento, o melhor acordo entre previsões e experiência se verificava quando $C \approx 4$ e sem remoção de câmaras e/ou canais oblíquos da rede.

As diferenças observadas podem ser o resultado das hipóteses assumidas para o comportamento dos elementos da rede. Em particular, a hipótese de mistura perfeita nas câmaras pode não ser adequada para as condições existentes num meio poroso real. Relaxar esta hipótese implicava a redução da mistura de fluido e a consequente redução da importância relativa da dispersão, situação contrária à observada anteriormente. Nos canais também é possível assumir que existe alguma mistura derivada da difusão radial de massa e do desenvolvimento do perfil de escoamento, devendo ser esta pouco significativa.

Outra explicação plausível e que merece análise diz respeito ao modelo geométrico e às hipóteses assumidas por este. Ao contrário do escoamento, em que o comportamento da rede é controlado apenas pela distribuição dos diâmetros dos canais, no transporte de massa as características geométricas das câmaras também têm ser tomadas em conta. Este facto é confirmado pela definição de γ , grupo adimensional que é análogo ao número de Peclet visto os canais e as câmaras serem responsáveis pela convecção e pela difusão de massa respectivamente. Como o comportamento previsto pelo modelo é fortemente dependente do γ (ver Secções 5.3.8.3 e 5.4.4.1), apenas quando os valores relativos de d , D e l são representativos dos valores reais observados num leito de enchimento é que o modelo será capaz de prever valores de α_L ou D_L em concordância com os dados experimentais.

Na Figura 5.66 e na Figura 5.67 é possível observar que quando a gama de valores de porosidade se encontra entre 0.35 e 0.45, o modelo prevê que a convecção é dominante, correspondendo a valores elevados de γ . Os dados de Montillet *et al.* (1993) mostram que para esses valores de porosidade, γ e também d/D devem ser menores, de modo a que os valores de Pe previstos sejam mais baixos, a que correspondem valores mais elevados de D_L .

Como γ é uma função da porosidade de acordo com as previsões do modelo geométrico, é possível prever que dependendo do valor de ε a concordância entre valores previstos e experimentais possa ser melhor. Notar que, de acordo com dados de Montillet *et al.* (1993), χ pode ser considerado como independente de D_p . Para verificar se estas considerações são verdadeiras, calcularam-se os valores de χ para os dados experimentais obtidos por Xu e Eckstein (1997). Estes autores usaram leitos de enchimento formados por esferas de diferentes diâmetros e com distribuições apertadas de valores de D_p , tendo efectuado experiências de transporte na gama de valores de porosidade entre 0.39 e 0.51. Mesmo com alguns valores de ε fora da gama de aplicabilidade do modelo geométrico, foram usados todos os valores reportados por estes autores. Como as previsões das variantes do modelo geométrico são similares, apenas se considerou o modelo T2S com a Equação CR. Os resultados são apresentados na Figura 5.71 por pontos, sendo possível observar que, apesar da dispersão dos valores, de facto χ é uma função de ε , diminuindo com o aumento da porosidade. Este comportamento está de acordo com a hipótese de que as diferenças observadas entre os valores previstos e experimentais de α_L são devidas a valores demasiado elevados da razão d/D , que resultam em valores de Pe demasiado elevados e uma importância excessiva da convecção.

Usando os dados experimentais disponíveis na literatura outra estratégia foi considerada para a determinação de χ . Esta baseia-se na representação dos dados experimentais na forma D_L/D_M em função de Pe_p , sendo este número adimensional definido pela Equação 5.68. É possível encontrar na literatura compilações de dados experimentais representados nesta forma (Fried e Combarnous, 1972; Dullien, 1992; Sahimi, 1995). Usando os resultados da Secção 5.3.8, assumindo que a rede possui dimensões tais que os efeitos de entrada podem ser desprezados e que o modelo geométrico é válido, é possível exprimir a razão D_L/D_M para o modelo T2S na forma

$$D_L/D_M = \frac{(K_l + K_D - 2K_h)\cos\theta}{2 \left\{ 1 + \frac{3K_l K_d^2}{K_D^3} - \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{K_d}{K_D} \right)^2} \right]^2 \left[1 + 0.5 \sqrt{1 - \left(\frac{K_d}{K_D} \right)^2} \right] \right\}^2} Pe_p \quad (5.80)$$

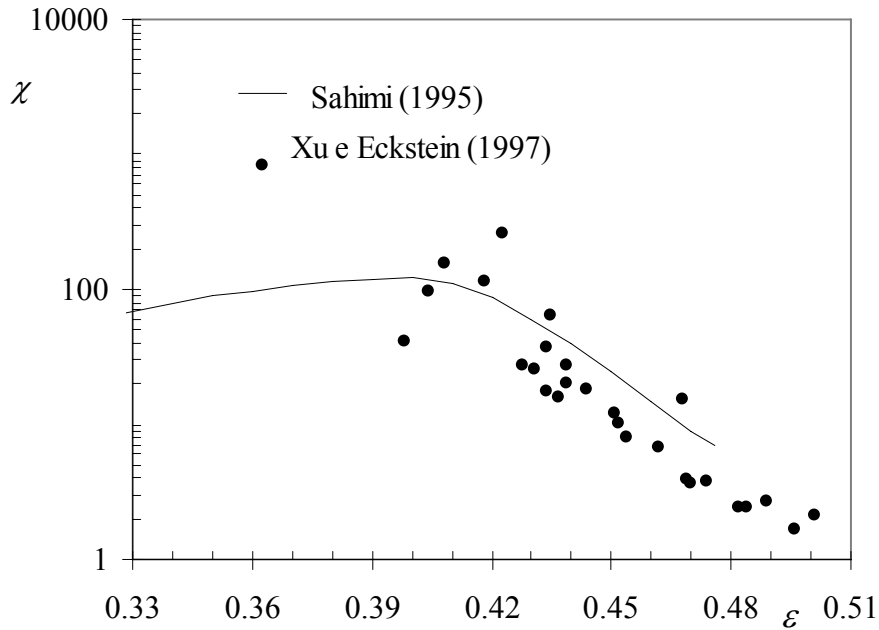


Figura 5.71 Valores de χ em função de ε usando o modelo T2S e a Equação CR para a tortuosidade para: pontos dados experimentais de Xu e Eckstein (1997); linha correlação de dados experimentais descrita em Sahimi (1995).

e para o modelo T1S na forma

$$D_L/D_M = \frac{(K_l + K_D)\cos\theta}{2 \left(1 + \frac{3K_l K_d^2}{K_D^3} \right)^2} Pe_p \quad (5.81)$$

Ao contrário das Equações 5.78 e 5.79, a constante entre D_L/D_M e Pe_p é independente do diâmetro das partículas que formam o leito de enchimento. Os resultados experimentais mostram que, quando a convecção é o mecanismo dominante de transporte de massa, se observa o comportamento previsto pela equação anterior.

Por outro lado, apesar de existir alguma dispersão dos resultados, α_L é aproximadamente igual a 1 e independente das características do meio poroso. Assim, é possível determinar qual é a evolução de χ em função de ε . Os valores calculados são apresentados na Figura 5.71, na forma de uma linha, em conjunto com os valores de χ determinados a partir dos

resultados de Xu e Eckstein (1997), observando-se boa concordância entre as duas formas de cálculo de χ . A curva possui um máximo para $\varepsilon \approx 0.38$, que corresponde também ao valor em que d/D está mais próximo de 1. No entanto, na comparação com os valores de χ previstos usando os dados de Montillet *et al.* (1993) observam-se diferenças mais significativas. O valor da constante de proporcionalidade obtida a partir dos dados experimentais apresentados por Sahimi (1995) representa um valor médio, não tomando em conta a dispersão observada, e podendo naturalmente não representar adequadamente determinados conjuntos de dados experimentais. Apenas através da utilização de uma base de dados mais larga será possível esclarecer as questões colocadas.

Os resultados anteriores mostram que a utilização do modelo geométrico permite prever as características do transporte de massa quando os valores de porosidade são baixos, $\varepsilon < 0.30$, ou elevados, $\varepsilon > 0.45$. Fora desta gama de valores, os valores previstos de α_L e D_L/D_M devem ser multiplicados por χ previsto a partir dos dados experimentais apresentados por Sahimi (1995) e representados graficamente na Figura 5.71. A estratégia proposta permite usar o modelo proposto para prever o comportamento de um leito de enchimento para a gama de valores de porosidade entre 0.26 e 0.476, e formados por partículas com uma distribuição apertada de valores de D_p .

Outra possibilidade interessante poderá ser considerada de acordo com as conclusões anteriores. A análise do comportamento de uma rede uniforme (ver Secção 5.3.8) e os resultados das simulações efectuadas mostram que o modelo proposto é similar a um modelo de tanques agitados em série, em que os atrasos devidos à velocidade finita do fluido e às irregularidades do campo de escoamento são tomadas em conta. Em engenharia química e em especial na área de engenharia das reacções químicas, o modelo de tanques agitados é usado para descrever o comportamento de um meio poroso, com base em dados experimentais obtidos quase sempre por experiências de traçador (Fogler, 1992). Usando o modelo de redes proposto (escoamento+geométrico+transporte de massa) e o parâmetro χ , o modelo de tanques agitado pode ser usado na previsão do valor de α_L a partir de informação do meio poroso facilmente disponível. A dispersividade deve ser usada em vez de D_L visto ser independente do valor da velocidade superficial do meio e depender apenas de ε e D_p , parâmetros também considerados no modelo geométrico e evitando a utilização de informação adicional. Conhecido v_T o valor do coeficiente de dispersão longitudinal pode ser estimado facilmente.

5.7 Conclusões

Nesta secção descreveu-se e analisou-se o modelo proposto para caracterizar o transporte de massa através de um meio poroso. Este baseia-se na descrição do comportamento transiente dos elementos da rede quando sujeitos a uma perturbação imposta na entrada da rede. A resposta da rede é determinada com base na resposta dos canais de saída de fluido da rede. Em relação à maior parte dos modelos propostos na literatura, este toma em conta alguns aspectos fundamentais do comportamento de um meio poroso que não são normalmente considerados.

- O efeito do atraso da resposta em relação ao tempo de imposição da perturbação de traçador, derivado da velocidade finita do fluido, é tomado em conta de uma forma explícita pelo modelo proposto. Na literatura estes aspectos são quase sempre considerados em extensões ao modelo de dispersão com alterações nas equações de balanço material (Sundaresan *et al.*, 1980; Westerterp *et al.*, 1995a, 1995b e 1996). Neste trabalho os atrasos são dependentes das características do escoamento ao nível dos elementos da rede e tomados em conta explicitamente nas equações de balanço.
- Os mecanismos principais de transporte de massa num meio poroso são associados a diferentes tipos de elementos da rede. Deste modo, é possível relacionar o comportamento previsto pelo modelo com base nas características geométricas e de escoamento nos elementos da rede. Dois parâmetros geométricos, γ e α , baseados nas dimensões características das câmaras e dos canais (γ baseia-se apenas nos valores médios) foram propostos para caracterizar e prever o comportamento da rede conhecidas as características geométricas da rede e dos seus elementos.
- O campo de escoamento é tomado em conta explicitamente pelo modelo. O modelo de dispersão assume que o perfil transversal de velocidades é uniforme, ou então um coeficiente de dispersão transversal, D_T , é definido de modo a tomar em conta este aspecto. Tal como na determinação de D_L , D_T é determinado quase sempre experimentalmente a partir da resposta observada a uma perturbação aplicada pontualmente no meio poroso (Wen e Fan, 1975). No modelo proposto os efeitos da mistura lateral de massa são tomadas em conta explicitamente e a sua influência pode ser estudada directamente sem a inclusão de parâmetros adicionais.

- Perturbações de traçador com diferentes características espaciais e temporais podem ser implementadas sem aumentar as dificuldades e o esforço necessário para resolver o sistema de equações de balanço material. Este aspecto é particularmente importante para perturbações espacialmente não uniformes.

Em relação ao algoritmo implementado, verificou-se que para redes com distribuições largas das dimensões características dos elementos (valores de σ_D e/ou σ_d elevados), ou quando a rede possui canais horizontais, as necessidades de memória e o tempo necessário requeridos para caracterizar o comportamento da rede são excessivos. Estratégias foram desenvolvidas para reduzir o número de equações diferenciais a resolver simultaneamente e reduzir o tempo de simulação. Estas tiveram um sucesso limitado, em particular para redes com canais horizontais ou em que a distribuição de valores de v_j seja larga ou mesmo bimodal. Nas restantes situações, os resultados obtidos usando o algoritmo implementado são adequados quaisquer que sejam as características da perturbação implementada. As condições óptimas para a resolução do sistema de equações diferenciais em função das características geométricas da rede e dos seus elementos foram estudadas em detalhe.

Como perturbações com diferentes características espaciais foram consideradas neste trabalho, foi analisada a influência da aplicação de diferentes tipos de condições fronteira. Verificou-se que as diferenças são pouco significativas em todos os casos estudados. De acordo com a estratégia usada na determinação de D_L , foi usada preferencialmente a condição de fluxo uniforme de entrada de traçador na rede.

A influência das características geométricas e do escoamento nos elementos da rede são tomados em conta simultaneamente pelo modelo. Os resultados obtidos pelo modelo mostram que o comportamento da rede é mais dependente das características geométricas da rede e dos seus elementos. A influência das características de escoamento são mais marcadas quando os mecanismos convectivos de transporte de massa são dominantes, em particular quando d/D é elevado. As simulações mostram também que D_L é função das características do escoamento, sendo proporcional à velocidade superficial do fluido.

A influência das características geométricas no comportamento depende principalmente de dois factores: a dimensão da rede segundo o sentido principal de escoamento, definido pelo parâmetro N_x , e os parâmetros das distribuições das dimensões características das câmaras, em particular os valores de σ_D , σ_d e de d/D . Observou-se que era possível, variando apenas

um dos parâmetros, d/D ou N_x , alterar a importância relativa da convecção ou da dispersão no comportamento previsto para a rede. Em relação ao parâmetro N_x , verificou-se que mantendo as características geométricas da rede o coeficiente de dispersão longitudinal é função da distância percorrida pelo fluido, tendendo para um valor limite. O mesmo comportamento qualitativo é observado em relação ao α , indicando que este parâmetro é adequado para caracterizar o transporte de massa nestas condições. Em relação ao parâmetro d/D , observa-se que quanto menor é a influência das câmaras menos significativa é a importância da dispersão.

Os parâmetros σ_D e σ_d apenas influenciam a dispersão de massa, tendo-se observado que quando mais elevado é o seu valor, maior é a dispersão. Em particular, verifica-se um aumento da dispersão, derivada da maior mistura lateral de traçador e das irregularidades do campo de escoamento através da rede. Para valores baixos dos valores de σ_D e σ_d mostrou-se que as previsões baseadas numa rede uniforme são adequadas. O desvio entre as previsões baseadas numa rede uniforme e os valores previstos pelo simulador de transporte representam uma medida da influência das irregularidades no transporte de massa. Os parâmetros Pe^* e Θ_B^* foram definidos para caracterizar qualitativamente a importância das irregularidades da estrutura geométrica e do campo de escoamento, tendo-se mostrado que ambos são adequados.

Os resultados permitem também concluir que ambos os parâmetros α e γ permitem caracterizar a importância relativa da convecção e da dispersão no transporte de massa através da rede. No entanto, o parâmetro γ possui suporte teórico e é mais simples de se definir e calcular que α . Existindo um modelo adequado para determinar os valores médios das dimensões características dos elementos da rede equivalente a um meio poroso, as características qualitativas do comportamento da rede podem ser facilmente obtidas. A análise do comportamento previsto pelo modelo para toda a gama de valores de γ mostrou que quanto maior for o seu valor, ou os valores de σ_D e/ou σ_d , maior deverá ser N_x para alcançar as condições em que se pode concluir que o perfil de concentrações alcançou o comportamento assintótico, no qual o modelo de dispersão é válido.

A comparação entre valores previstos e experimentais mostrou que o modelo é válido para prever o comportamento de um meio poroso para valores baixos ($\varepsilon < 0.30$) e elevados de porosidade ($\varepsilon > 0.45$). As diferenças observadas para valores intermédios de ε devem-se aos

valores elevados de d/D previstos pelo modelo geométrico, a que correspondem valores elevados de γ e consequentemente uma importância relativa excessiva da convecção sobre a dispersão de massa. Um parâmetro, χ , função apenas de ε foi definido e determinado a partir de dados experimentais disponíveis na literatura, para quantificar o desvio entre os resultados experimentais e os previstos pelo modelo. Este permite usar o modelo de redes proposto para prever o comportamento de um meio poroso, em particular leitos de enchimento em que $0.26 < \varepsilon < 0.476$ e que seja formado por partículas com uma distribuição apertada de diâmetros. Por outro lado, o parâmetro χ permite que o modelo de tanques agitados seja preditivo em vez de descritivo do comportamento de um meio poroso real, quando associado aos modelos de escoamento e geométricos descritos nos Capítulos 4 e 3 respectivamente.

Alguns aspectos podem ser considerados para trabalho futuro, com o objectivo de estender a validade e aplicabilidade do modelo proposto.

- Na versão actual, o modelo proposto é usado apenas para prever os valores do coeficiente de dispersão axial. Contudo, através da imposição de perturbações pontuais e comparação do perfil previsto com a solução do modelo de dispersão, é possível prever também o valor do coeficiente de dispersão transversal, D_T . A utilização de perturbações espacialmente uniformes não permite a determinação do valor deste parâmetro.
- O método numérico implementado deverá ser optimizado, em particular para reduzir o tempo de simulação e as necessidades de memória para redes com um número elevado de elementos e/ou distribuições de valores de v_j largas ou mesmo bimodais. De acordo com a literatura (Hairer *et al.*, 1985; Corwin *et al.*, 1997), os métodos numéricos mais adequados para resolver sistemas de equações diferenciais com atrasos envolvem a definição de funções contínuas para descrever a evolução das soluções das equações ao longo do tempo. Outra estratégia poderá passar pela análise das distribuições dos valores de α_j^E e dos tempos de passagem, que pode ser obtida usando as características geométricas dos elementos da rede e do escoamento no seu interior. Desprezando o comportamento dos elementos com a dinâmica mais lenta será possível caracterizar o comportamento da rede.
- Os efeitos do transporte de massa por difusão de massa não são tomados em conta na escrita das equações de balanço material nos elementos da rede. O modelo proposto toma

em conta estes aspectos de forma indirecta através da dispersão de massa, associada ao comportamento dos canais da rede. A influência da difusão apenas deverá ser significativa para escoamento em estado linear ou quando Pe é baixo. Assim será possível analisar a influência das propriedades do fluido em D_L (Delgado, 2001).

- A comparação entre as previsões do modelo e dados experimentais permitiu concluir que o modelo geométrico não é adequado na descrição do transporte de massa para valores de ε entre 0.35 e 0.45. Esta gama inclui a maior parte dos leitos de enchimento irregulares usados na prática. As diferenças são devidas às previsões do modelo geométrico, em particular dos valores de d/D . Este poderá ser modificado, de modo a incorporar também informação sobre o número de coordenação do meio poroso e a reduzir o valor previsto de d/D , e consequentemente de γ , para a gama de valores de porosidade entre 0.35 e 0.45. No entanto, os bons resultados obtidos na análise do escoamento (ver Secção 4.7) mostram que as alterações deverão incidir na forma de cálculo de D e possivelmente l , devendo-se manter a forma de cálculo de d devido ao facto que para o escoamento os diâmetros dos canais são os factores dominantes.
- De acordo com as hipóteses impostas no simulador hidrodinâmico, apenas podem ser usados fluidos incompressíveis. A influência da compressibilidade do fluido poderá ser significativa se o transporte de massa por difusão for significativo (Tsotas e Schlunder, 1992) ou quando o fluido é compressível e a velocidade do fluido é elevada, em que as alterações no valor da densidade influenciam directamente o campo de escoamento.
- Inclusão de termos de reacção química, na fase fluida e/ou sólida, transferência de massa entre fases, adsorção, e possíveis efeitos térmicos. As equações de balanço material deverão ser modificadas de modo a tomar em conta estes aspectos, podendo levar a alterações no algoritmo implementado. De especial interesse é a inclusão de reacção química, visto que os modelos desenvolvidos neste trabalho podem ser usados para caracterizar o comportamento de reactores de leito fixo tomando em conta as características do escoamento e do transporte de massa a nível microscópico.

6. Conclusões e Sugestões de trabalho futuro

6.1 Conclusões

Neste trabalho foi desenvolvido um modelo de redes que permite descrever, caracterizar e mesmo prever o comportamento de meios porosos, em particular leitos de enchimento formados por partículas com uma distribuição apertada das suas dimensões características. A descrição da estrutura local do meio poroso é adequada e suficientemente simples para permitir a descrição e a caracterização dos mecanismos hidrodinâmicos e de transporte de massa ao nível local. A interdependência entre os diferentes fenómenos e a influência da estrutura da rede foi tomada em conta explicitamente e analisada neste trabalho, o que se reflecte na estrutura da dissertação. De seguida são apresentadas as conclusões para cada um dos três blocos principais: geração da rede, modelização do comportamento hidrodinâmico e do transporte de massa através da rede.

6.1.1 Modelo de redes

O aspecto mais importante do modelo de redes é a utilização de dois tipos de elementos. Assim, diferentes tipos de poros de um meio poroso, em particular de um leito de enchimento, são tomados em conta. A forma geométrica dos elementos permite caracterizar o seu comportamento de acordo com o tipo de poro associado a cada um deles. A conectividade, as variações locais das dimensões características dos elementos da rede e as relações existentes entre estes ao nível local foram tomadas em conta explicitamente.

Em particular, foram considerados e analisados dois tipos de restrições entre os valores de D_i e d_j ao nível local. Comparando as alterações induzidas pela sua utilização nas distribuições dos valores de D_i e d_j impostas inicialmente ao gerador da rede, observou-se uma influência mais marcada da restrição de não intersecção dos canais associados a uma câmara. As diferenças são particularmente marcadas quando d/D é elevado ou existem canais horizontais na rede. A restrição entre os valores dos diâmetros das câmaras e dos canais associados entre si é independente da existência de canais horizontais na rede e é significativa apenas quando d/D é próximo de 1.

Um modelo foi desenvolvido para determinar os valores médios das dimensões características das câmaras e dos canais. Este baseia-se na caracterização da estrutura local de seis leitos de enchimento de esferas com o mesmo diâmetro e com uma estrutura regular. A gama de valores de porosidade definida é larga, entre 0.26 e 0.476, incluindo a maior parte dos meios porosos usados na prática. A comparação entre os valores previstos e apresentados na literatura permite concluir que a utilização da restrição $d_j < D_i$ é adequada, sendo a única que permite usar o modelo geométrico em toda a gama de valores de ε . A comparação com dados experimentais é adequada para leitos de enchimento com uma distribuição apertada das dimensões características das partículas.

6.1.2 Modelo hidrodinâmico

A característica mais importante do modelo hidrodinâmico é a diferenciação entre a resistência devida à fricção do fluido nos canais e a resultante das variações bruscas da área de escoamento originadas pelas ligações entre as câmaras e os canais. Os resultados do modelo mostram que o primeiro efeito é dominante para velocidades do fluido baixas, enquanto que o segundo efeito é dominante para velocidades do fluido elevadas. A descrição correcta do comportamento qualitativo de um meio poroso observado experimentalmente em qualquer regime de escoamento deve tomar em conta ambos os efeitos.

A definição do parâmetro $\sum K_j$ para determinar a resistência associada às expansões e contracções de fluido permite a utilização de fórmulas válidas para tubos cilíndricos, evitando a resolução de um sistema de equações de conservação de massa e de quantidade de movimento para determinar a resistência das ligações entre as câmaras e os canais. Este resultado está de acordo com as conclusões de outros autores, que atribuem a transição entre

regime linear e não linear às expansões e contracções existentes no meio poroso, e não à transição para escoamento turbulento (Blick, 1966; Payatakes *et al.*, 1973a; Niven, 2002).

Para o caso especial de uma rede uniforme é possível caracterizar analiticamente o seu comportamento e obter expressões analíticas para a permeabilidade e as constantes A e B da equação de MacDonald. Estas são adequadas para caracterizar o comportamento previsto pelo simulador de escoamento desde que os valores de σ_D e σ_d sejam baixos e só ocorra a remoção de canais horizontais.

Os resultados da análise de sensibilidade mostraram que os valores previstos são estatisticamente significativos desde que $N_x \geq 100$ e $N_y \geq 100$. Conclui-se também que os valores apresentados são independentes das características geométricas da rede e dos seus elementos, e das restrições e condições impostas nos elementos da rede, em particular os valores de σ_D e σ_d , e a remoção de câmaras e/ou canais da rede.

O modelo proposto prevê que são os canais oblíquos os elementos que controlam o comportamento da rede. Estes são os únicos em que o escoamento se dá segundo o sentido em que se aplica o gradiente macroscópico de pressões. A análise do comportamento hidrodinâmico em redes em que se efectua a remoção de câmaras e/ou canais mostra através da comparação do comportamento previsto para redes uniformes, que variações na distribuição local dos canais oblíquos têm um efeito profundo no escoamento. A comparação das distribuições das velocidades nos canais com e sem a presença de canais horizontais (ver Secção 5.4.3.4) mostra que a sua influência é sentida sobretudo através dos valores dos parâmetros geométricos da rede e possíveis alterações nas distribuições dos valores de D_i e d_j (em particular esta) por aplicação das restrições entre as dimensões características dos elementos da rede ao nível local.

Comparando as distribuições das velocidades nos canais oblíquos para diferentes condições de escoamento (ver Secção 5.4.2.1), é possível observar que a distribuição se torna mais apertada para condições de escoamento não linear. Estes resultados mostram que as características do campo de escoamento alteram-se, resultado da mudança do regime de escoamento na rede.

A comparação entre os valores previstos pelo modelo e dados experimentais foi feita usando o modelo geométrico para determinar as dimensões características dos elementos da rede

equivalente. Apenas foram considerados valores de parâmetros que caracterizam o comportamento do meio poroso a nível macroscópico, em particular a permeabilidade e as constantes A e B da equação de MacDonald. Para condições de escoamento linear, os valores previstos da permeabilidade são adequados para leitos de enchimento com uma distribuição apertada de tamanhos. Como existe uma relação linear entre k e C caso apenas se removam canais horizontais da rede, é possível estimar C para meios porosos reais com base nos resultados obtidos para redes uniformes com $C = 4$ e $C = 6$. Os resultados obtidos mostram que $C \approx 4$, sendo estes concordantes com os valores do número de coordenação médio apresentados na literatura, em particular se D_p não for muito baixo.

Também para $C \approx 4$ se observa a melhor concordância entre os valores previstos pelo simulador de escoamento e dados experimentais para qualquer regime de escoamento, em particular para zona de transição. Os resultados permitem também concluir que os $\sum K_j \approx 3.5$, valor superior a 1.5 (Shames, 1982; White, 1994) que corresponde à situação em que $d/D \ll 1$ (diâmetro das câmaras é muito maior que o diâmetros dos canais). A mistura entre o fluido com diferentes velocidades e a existência de mais do que um canal normalmente associado a cada uma das câmaras da rede resulta numa maior resistência ao escoamento (maior perda de carga), levando a valores mais elevados de $\sum K_j$.

6.1.3 Transporte de massa

O modelo proposto neste trabalho associa mecanismos de transporte de massa diferentes a cada um dos elementos da rede: convecção nos canais e dispersão nas câmaras. Os atrasos dos canais derivados da velocidade finita de escoamento são tomados em conta explicitamente nas equações de balanço material escritas para os elementos da rede. O modelo é particularmente flexível nas características espaciais e temporais das perturbações temporais, sem aumentar a sua complexidade. O algoritmo de resolução do sistema de equações de balanço toma em conta as características das perturbações e dos elementos da rede para reduzir o esforço necessário na resolução do sistema de equações.

Os resultados do modelo permitem concluir que a importância relativa dos dois mecanismos principais de transporte de massa pode ser caracterizada através da razão entre o volume de vazios associados ao canais e total, α . Um parâmetro análogo, γ , foi definido com base na análise do comportamento de uma rede uniforme, tendo-se obtido expressões que permitem determinar os parâmetros que caracterizam o seu comportamento (como por exemplo Θ_B e

Pe). Este permite caracterizar qualitativamente a resposta de um meio poroso real conhecidos apenas os valores médios das dimensões características das câmaras e dos canais. O grupo adimensional γ na sua definição é equivalente a um número de Peclet modificado, visto que representa a razão entre o volume médio de um canal e de uma câmara numa rede uniforme e neste trabalho o transporte de massa por convecção e por dispersão são atribuídos apenas aos canais e às câmaras.

A comparação dos valores previstos para redes uniformes e não uniformes permite concluir que a aproximação é adequada quando a dispersão das distribuições das dimensões características dos elementos da rede é baixo. Quanto maior for este valor, mais significativa é a influência da dispersão no transporte de massa. Este comportamento é função do valor do parâmetro γ , mostrando que são as características geométricas dos elementos da rede que controlam o transporte de massa na rede.

A influência do tipo de condições fronteira foi estudado, tendo-se concluído ser pouco significativa. Os resultados permitiram analisar a influência das dimensões da rede, em particular o comprimento da rede segundo a direcção principal do escoamento. Observou-se que o valor do coeficiente de dispersão depende das dimensões da rede, tendendo para um valor constante para redes suficientemente grandes. Este comportamento está de acordo com os dados experimentais apresentados na literatura (Han *et al.*, 1985) e deve-se à influência da mistura lateral de traçador e à uniformização do campo de concentrações, que tende para o seu comportamento assintótico para tempos grandes.

Como o comportamento transiente das câmaras é tomado em conta explicitamente, é possível diferenciar entre os efeitos dispersivos derivados da mistura de correntes de traçador com diferentes valores de concentração e os devidos à resposta das câmaras à perturbação de traçador. Observou-se que assumir valores de D_i diferentes de zero aumenta a importância dos mecanismos de transporte de massa por dispersão, tendendo para um valor constante e dependente das características da distribuição das velocidades nos canais quando $D_i = 0$.

As alterações das características do campo de escoamento na passagem entre regime linear e não linear também se fazem sentir no transporte, com um aumento da importância dos mecanismos dispersivos. As alterações dependem das características geométricas da rede, sendo mais significativas para valores elevados da razão d/D . Este resultado reforça ainda

mais a conclusão de que são as características geométricas da rede e dos seus elementos os factores dominantes na caracterização do transporte de massa.

A comparação entre os valores previstos e dados experimentais mostra que o modelo proposto é adequado quando o transporte de massa por convecção é dominante, em particular se $Pe_M > 300$. Este comportamento resulta da não consideração do transporte de massa por difusão, significativo apenas quando a velocidade do fluido é baixa. Por outro lado, a comparação entre dados experimentais e previstos mostra que o modelo é adequado tanto para valores elevados com baixos de porosidade ($\varepsilon < 0.30$ e $\varepsilon > 0.45$). Para a restante gama de ε um parâmetro correctivo χ , função apenas da porosidade, é determinado a partir de dados experimentais disponíveis na literatura.

6.2 Sugestões de trabalho futuro

Uma das características mais importantes do modelo proposto nesta dissertação para caracterizar os fenómenos de transporte num meio poroso é a sua flexibilidade. Nas secções seguintes são apresentadas sugestões e aspectos considerados importantes para análise futura.

6.2.1 Modelo de redes

Os resultados obtidos mostram que o comportamento hidrodinâmico e de transporte de massa na rede dependem em grande medida das características geométricas da rede e dos seus elementos. Assim, quanto mais representativo de um meio poroso real for o modelo de redes mais correctas serão as previsões baseadas neste. Uma das possibilidades é passar a rede de bidimensional para tridimensional. Esta alteração evitaria a determinação de um valor da espessura equivalente da rede, necessária para calcular a velocidade superficial através da rede. Outra possibilidade é relaxar a hipótese de θ ser um valor constante, o que poderia ser efectuado modificando a estrutura da rede aleatoriamente. Esta alteração modificaria a estrutura local do meio, tornando-o mais irregular. Ambas as alterações tornam o modelo mais rigoroso mas aumentam a sua complexidade.

A utilização da condição $d_j < D_i$ entre os diâmetros das câmaras e dos canais associados entre si pode levar a considerar um volume de vazios associado aos canais superior ao real, pois alguma sobreposição dos canais pode ocorrer. Este volume deveria ser descontado na

determinação da espessura equivalente. Na versão actual, o gerador da rede não toma em conta este aspecto, que deverá ser significativo apenas para valores elevados da razão d/D .

O modelo geométrico previsto neste trabalho é adequado para leitos de enchimento em que a distribuição das dimensões características das partículas que o constituem é apertada. Quando as distribuições dos diâmetros das partículas é mais larga, as distribuições dos valores de D_i e d_j são mais largas e mesmo multimodais (Nolan e Kavanagh, 1995). Além destes efeitos, poderá ocorrer segregação entre as diferentes partículas, originando zonas do meio poroso em que as distribuições das dimensões características dos elementos da rede equivalente são diferentes. Na versão actual do modelo não é possível a inclusão destes efeitos, que podem ser significativos na caracterização de um meio poroso.

O modelo geométrico também não permite estimar C . Este é estimado na Secção 4.7.3.1 a partir dos valores previstos pelo modelo geométrico com $C = 4$ e $C = 6$, e dos valores de permeabilidade experimentais. A correlação proposta neste trabalho deverá ser melhorada e validada recorrendo a um conjunto maior de dados experimentais, devendo também ser estudada a influência das características da rede e dos seus elementos. A distribuição dos valores de C_i pode ser determinada analisando-se a estrutura local do leito de enchimento e o posicionamento relativo das partículas ou dos espaços vazios existentes no seu interior (Chan e Ng, 1986 e 1988; Chu e Ng, 1988; Mata, 1998). O gerador da rede permite considerar uma distribuição não pontual de valores de C_i desde que C seja conhecido, através da remoção aleatória de câmaras e/ou canais, procedimento que não toma em conta possíveis correlações locais da estrutura do meio poroso.

Alguns autores (Chan e Ng, 1988) consideram que a presença de uma parede delimitadora do meio poroso altera a distribuição espacial dos valores de C_i e a estrutura local do meio poroso nessa zona. A imposição de fronteiras não periódicas permite tomar em conta este aspecto parcialmente, mas sem alterar as distribuições das dimensões características dos elementos da rede. Diferentes estratégias foram consideradas na literatura para tomar em conta a diferente estrutura do meio poroso nas proximidades da parede (Chu e Ng, 1988; Avilés e Levan, 1991), podendo no futuro o modelo para a geração da rede ser estendido de modo a descrever adequadamente as fronteiras de um meio poroso.

6.2.2 Simulador hidrodinâmico

No modelo hidrodinâmico implementado a resistência ao escoamento ao nível dos elementos da rede é associada aos canais. Mesmo os termos de resistência associados às ligações entre as câmaras e os canais são expressos em função de d_j . Os efeitos da estrutura local da rede e dos valores das dimensões características dos seus elementos são tomados em conta indirectamente através das restrições impostas na geração da rede, não sendo significativos na caracterização do comportamento hidrodinâmico local.

O objectivo principal do modelo IQM era a determinação de expressões analíticas que permitissem calcular $\sum K_j$ conhecidas as características geométricas e de escoamento locais. No seu estado actual de desenvolvimento o modelo IQM não pode ser usado pois prevê valores de R_j negativos, situação fisicamente impossível. Em condições de escoamento não linear a hipótese de mistura perfeita nas câmaras pode ser inadequada, sendo necessário tomar em conta estes aspectos na escrita das equações de balanço. A utilização de técnicas de CFD poderá ser uma opção adequada para caracterizar o comportamento das câmaras e determinar qual é a influência das características geométricas e de escoamento ao nível local nos valores previstos para R_j^{ET} .

Neste trabalho tanto C como $\sum K_j$ foram determinados a partir de dados experimentais do escoamento através de leitos de enchimento formados por partículas com uma distribuição apertada de diâmetros. Uma extensão será a determinação de correlações para os dois parâmetros, baseadas em dados experimentais, e função da porosidade e das características das partículas do meio de enchimento, de modo a possibilitar a utilização do modelo de redes em condições menos restritivas e para um conjunto mais largo de meios porosos.

Outro aspecto que poderá ser relaxado no futuro é a hipótese de incompressibilidade do fluido, que limita a utilização do modelo ao escoamento de líquidos ou de gases desde que a queda de pressão seja baixa. Quando os efeitos de compressibilidade do fluido são significativos, as expressões de cálculo de R_j devem tomá-los em conta de modo explícito. Diferentes opções podem ser consideradas para a inclusão destes efeitos na caracterização do escoamento, como por exemplo através da sua inclusão nas equações de conservação que caracterizam o comportamento dos elementos da rede.

Por outro lado, as propriedades do fluido podem variar pela variação da temperatura e/ou da concentração de alguns componentes do fluido. De particular importância é a variação de temperatura pois modifica os valores da densidade e da viscosidade do fluido, influenciando os valores de R_j previstos. A inclusão destes efeitos implica que as equações de balanço material escritas para os elementos da rede devem ser consideradas, passando o comportamento hidrodinâmico e o transporte de massa a ter que ser tomado em conta simultaneamente. Notar que a influência da reacção química pode ocorrer também através de alterações na estrutura local da rede, como por exemplo nas obstruções dos canais, caso em que as variações no tempo no campo de escoamento devem ser tomadas em conta.

6.2.3 Transporte de massa

Como o modelo proposto para o transporte de massa através da rede toma em conta a mistura transversal do traçador, sem complicações excessivas, uma das extensões naturais está relacionada com a determinação do coeficiente de dispersão transversal. Usando uma perturbação em degrau aplicada pontualmente, D_T pode ser determinado analisando a evolução no espaço e no tempo do campo de concentrações no interior da rede (Wen e Fan, 1975). A análise da influência das características geométricas da rede e dos seus elementos poderia ser efectuada de um modo similar ao efectuado no Capítulo 5 para D_L e parâmetros relacionados.

Outra extensão natural é a inclusão de reacção química e/ou adsorção. Na forma mais simples poderia ser considerada apenas reacção química na fase fluida. A ocorrência de adsorção e/ou reacção química pode ser descrita assumindo que esta ocorre na interface sólido/líquido, sendo os efeitos do transporte de massa por difusão tomados em conta através da definição de um factor de eficiência. A influência destes fenómenos nos valores dos parâmetros macroscópicos que caracterizam o comportamento da rede, como por exemplo Pe , pode ser determinada deste modo. A inclusão da reacção química permite prever o comportamento em estado estacionário de um reactor de leito fixo, a partir da resposta limite da rede a uma perturbação em degrau de traçador. A dependência de parâmetros como a conversão e a selectividade nas características da estrutura local e dos elementos da rede, a forma como os reagentes são introduzidos e o regime de escoamento, entre outro aspectos, podem ser analisados sem aumentar a complexidade do modelo físico. Diferentes modos de operação, em particular envolvendo estados não transientes de operação, podem ser descritos usando o

modelo proposto, permitindo prever qual é o seu comportamento e a forma mais adequada de operação.

A inclusão dos termos reactivos pode implicar a necessidade de se tomarem em conta os efeitos térmicos. Como se descreveu na secção anterior, nestas condições as equações que descrevem o escoamento e o transporte de massa devem ser resolvidas simultaneamente. O sistema de equações a resolver é sempre não linear, pois as funções que descrevem a variação das propriedades físicas do fluido e das constantes cinéticas de reacção são não lineares, independentemente das condições de escoamento. Por outro lado, o comportamento da fase sólida teria de ser tomado em conta, aumentando a complexidade do modelo.

Os resultados do modelo mostram que este é adequado quando o transporte de massa por convecção é dominante, correspondente a valores elevados de Pe . Quando Pe é baixo os efeitos do transporte de massa por difusão deverão ter de ser tomados em conta. No modelo implementado as condições em que os efeitos da difusão são significativos depende não só das características do escoamento mas também da geometria da rede e dos seus elementos. A inclusão dos termos difusivos nas equações de balanço material torna a simulação do transporte mais complexa, visto que as características das soluções das equações de balanço material modificam-se. Este aspecto é particularmente importante nos canais, em que a contabilização dos atrasos passa a ser mais complexa.

Outra questão importante é a hipótese de mistura perfeita nas câmaras. Quando a velocidade do fluido é baixa, os mecanismos de transporte de massa por difusão tendem a uniformizar o campo de concentrações no interior das câmaras, tornando adequada a hipótese de mistura perfeita. Aumentando a velocidade do fluido nos canais, a entrada do fluido nas câmaras é equivalente a jactos, ocorrendo a mistura apenas no centro das câmaras. Nestas condições, e em particular quando para distribuições largas das velocidades nos canais, é de se esperar que a mistura nas câmaras seja incompleta. A inclusão dos efeitos de mistura imperfeita nas equações de balanço material escritas para as câmaras é complexa, devendo a sua análise ser efectuada usando técnicas de CFD.

Os resultados apresentados na Capítulo 5 não analisam a influência das características locais da rede. De particular importância é o estudo da influência da distribuição de valores de C_i . Os resultados obtidos permitem concluir que os factores dominantes são as alterações na distribuição espacial dos canais oblíquos na rede, visto serem estes os canais dominantes na resistência ao escoamento através da rede. O surgimento de caminhos preferenciais pode ter

uma importância marcada no transporte de massa, com ou sem reacção química, podendo ser significativos ao nível local os mecanismos de transporte por difusão.

7. Bibliografia

- Acuna, J.A., Yortsos, Y.C., “Application of Fractal Geometry to the Study of Networks of Fractures and their Pressure Transient”, *Water Resources Research*, **31**, 527-540 (1995).
- Adler, P.M., Brenner, H., “Transport Processes in Spatially Periodic Capillary Networks. I: Geometrical Description and Linear Flow Hydrodynamics”, *Physicochemical Hydrodynamics*, **5**, 245-268 (1984a).
- Adler, P.M., Brenner, H., “Transport Processes in Spatially Periodic Capillary Networks - II: Taylor Dispersion With Mixing Vertices”, *Physicochemical Hydrodynamics*, **5**, 269-285 (1984b).
- Adler, P.M., Brenner, H., “Transport Processes in Spatially Periodic Capillary Networks. III: Nonlinear flow Problems”, *Physicochemical Hydrodynamics*, **5**, 287-297 (1984c).
- Adler, P.M., Thovert, J.F., “Fractal Porous Media”, *Transport Porous Media*, **13**, 41-78, (1993).
- Adler, P.M., *Porous Media - Geometry and Transport*, Butterworth-Heinemann Series in Chemical Engineering, 1994.
- Adler, P.M., Thovert, J.F., “Real Porous Media: Local Geometry and Macroscopic Properties”, *Applied Mechanics Reviews*, **51**, 537-585 (1998).

- Ahmed, N., Sunada, D.K., “Nonlinear Flow in Porous Media”, *J. Hydr. Div. Proc. ASCE*, **6**, 1847-1857 (1969).
- Agarwal, P.K., O'Neill, B.K., “Transport Phenomena in Multi-Particle Systems. I: Pressure Drop and Friction Factors: Unifying the Hydraulic-Radius and Submerged-Object Approaches”, *Chem. Eng. Sci.*, **43**, 2487-2499 (1988).
- Al-Raoush, R., Thompson, K., Willson, C.S., “Comparison of Network Generation Techniques for Unconsolidated Porous Media”, *Soil Science Society America*, **67**, 1687-1700 (2003).
- Alvarado, V., Davis, H.T., Scriven, L.E., “Effects of Pore-Level Reaction on Dispersion in Porous Media”, *Chem. Eng. Sci.*, **52**, 2865-2881 (1997).
- Alvarado, V., Scriven, L.E., Davis, H.T., “Stochastic-Perturbation Analysis of a One-Dimensional Dispersion-Reaction Equation: Effects of Spatially-Varying Reaction Rates”, *Transport Porous Media*, **32**, 139-161 (1998).
- Ananthakrishnan, V., Gill, W.N., Barduhn, A.J., “Laminar Dispersion in Capillaries. Part I: Mathematical Analysis”, *AIChE J.*, **11**, 1063-1072 (1965).
- Andersson, K.E.B., “Pressure Drop in Packed Beds”, *Trans. Roy. Inst. Technol. Stockholm*, 3-37 (1963).
- Andrade, J.S., Rajagopal, K., McGreavy, C., “Chromatography in Pore Networks II - The Role of Structure and Adsorption in the Band Broadening”, *Chromatographia*, **32**, 345-349 (1991).
- Andrade, J.S., Benyahia, F., Foumeny, E.A., McGreavy, C., Rajagopal, K., “On the Permeability of Binary Packings of Spheres”, *Chem. Eng. Technol.*, **15**, 1-14 (1992).
- Andrade, J.S., “Hydrodynamic Dispersion in Binary Packings of Spheres”, *Physica A*, **199**, 431-444 (1993).
- Andrade, J.S., Shibusa, Y., Arai, Y., McGreavy, C., “A Network Model for Diffusion and Adsorption in Compacted Pellets of Bidisperse Grains”, *Chem. Eng. Sci.*, **50**, 1943-1951 (1995).
- Andrade, J.S., Alencar, A.M., Almeida, M.P., Filho, J.M., Buldyrev, S.V., Zapperi, S., “Asymmetric Flow in Symmetric Branched Structures”, *Phys. Rev. Letters*, **81**, 926-929 (1998).

-
- Androutsopoulos, G.P., Mann, R., “Evaluation of Mercury Porosimeter Experiments Using a Network Pore Structure Model”, *Chem. Eng. Sci.*, **34**, 1203-1212 (1979).
 - Aral, M.M., Liao, B., “Analytical Solutions for Two-Dimensional Transport Equation with Time-Dependent Dispersion Coefficients”, *J. Hydrol. Engng. Proc. ASCE*, **1**, 20-32 (1996).
 - Arbabi, S., Sahimi, M., “Computer Simulation of Catalyst Deactivation - I: Model Formulation and Validation”, *Chem. Eng. Sci.*, **46**, 1739-1747 (1991a).
 - Arbabi, S., Sahimi, M., “Computer Simulation of Catalyst Deactivation - II: The Effect of Morphological Transport and Kinetic Parameters and Kinetic Parameters of the Performance of the Catalyst”, *Chem. Eng. Sci.*, **46**, 1749-1755 (1991b).
 - Arcangelis, L., Koplik, J., Redner, S., Wilkinson, D., “Hydrodynamic Dispersion in Network Models of Porous Media”, *Phys. Rev. Letters.*, **57**, 996-999 (1986).
 - Aris, R., “On the Dispersion of Solute in a Fluid Flowing Through a Tube”, *Proc. Roy. Soc. London*, **235**, 67-77 (1956).
 - Aris, R., “The Longitudinal Diffusion Coefficient in Flow through a Tube with Stagnant Pockets”, *Chem. Eng. Sci.*, **11**, 194-198 (1959a).
 - Aris, R., “On the Dispersion of a Solute by Diffusion, Convection and Exchange Between Phases”, *Proc. Roy. Soc. London*, **252**, 538-550 (1959b).
 - Aris, R., “On the Dispersion of a Solute in Pulsating Flow through a Tube”, *Proc. Roy. Soc. London*, **252**, 370-376 (1960).
 - Armatas, G.S., Petrakis, D.E., Pomonis, P.J., Estimation of Diffusion Parameters in Functionalized Silicas with Modulated Porosity. Part II: Pore Network Modeling”, *J. Chromatography A*, **1074**, 61-69 (2005).
 - Assouline, S, Rouault, Y., “Modeling the Relationships between Particle and Pore Size Distributions in Multicomponent Sphere Packs: Application to the Water Retention Curve”, *Colloids Surfaces A*, **127**, 201-210 (1997).
 - Avilés, B.E., LeVan, M.D., “Network Models for Nonuniform Flow and Adsorption in Fixed Beds”, *Chem. Eng. Sci.*, **46**, 1935-1944 (1991).
 - Azzam, M.I.S., Dullien, F.A.L., “Calculation of the Permeability of Porous Media from the Navier-Stokes Equation”, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, **15**, 281-285 (1976).

- Azzam, M.I.S., Dullien, F.A.L., “Flow in Tubes with Periodic Step Changes in Diameter: A Numerical Solution”, *Chem. Eng. Sci.*, **32**, 1445-1455 (1977).
- Bacri, J.C., Rakotomalala, N., Salin, D., “Experimental Evidence of Disorder Effects in Hydrodynamic Dispersion”, *Phys. Rev. Letters*, **58**, 2035-2038 (1987).
- Bagagaoglu, H., Ginn, T.R., Green, C.T., McCoy, B.J., “Transport in Heterogenous Media: Tracer Dynamics in Complex Flow Networks”, *AIChE J.*, **48**, 1121-1131 (2002).
- Baker, C.T.H., Paul, C.A.H., Willé, D.R., “Issues in the Numerical Solution of Evolutionary Delay Differential Equations”, Numerical Analysis Report No. 248, Manchester Centre for Computational Mathematics, University of Manchester, 1994.
- Baker, C.T.H., Paul, C.A.H., Willé, D.R., “A bibliograhpy on the Numerical Solution of Delay Differential Equations”, Numerical Analysis Report No. 269, Manchester Centre for Computational Mathematics, University of Manchester, 1995.
- Baker, C.T.H., Bocharov, G.A., Paul, C.A.H., Rihan, F.A., “Modelling and Analysis of Time-Lags in Some Basic Patterns of Cell Proliferation”, *J. Mathematical Biology*, **37**, 341-371, 1998.
- Bailey, H.R., Gogarty, W.B., “Numerical and Experimental Results on the Dispersion of a Solute in Laimanr Flow Through a Tube”, *Proc. Roy. Soc. London*, **269**, 352-367 (1962).
- Balakotaiah, V., Chang, H., “Dispersion of Chemical Solutes in Chromatographs and Reactors”, *Proc. Roy. Soc. London*, **351**, 39-75 (1995).
- Baldwin, C.A., Sederman, A.J., Mantle, M.D., Alexander, P., Gladden, L.F., “Determination and Characterization of a Pore Space from 3D Volume Images”, *J. Colloid Interfac. Sci.*, **181**, 79-92 (1996).
- Balhoff, M.T., Thompson, K.E., “A Macroscopic Model for Shear-Thining Flow in Packed Beds Based on Network Modeling”, *Chem. Eng. Sci.*, **61**, 698-711 (2006).
- Barber, J.A., Perkins, J.D., Sargent, R.W.H., “Boundary Conditions for Flow with Dispersion”, *Chem. Eng. Sci.*, **53**, 1463-1464 (1998).
- Barnea, E., Mednick, R.L., “A Generalized Approach to the Fluid Dynamics of Particulate Systems. Part III: General Correlation for the Pressure Drop through Fixed Beds of Spherical Particles”, *Chem. Eng. J.*, **15**, 215-227 (1978).

-
- Barton, N.G., “On the Method of Moments for Solute Dispersion”, *J. Fluid Mech.*, **126**, 205-218 (1983).
 - Bear, J., *Dynamics of Fluids in Porous Media*, Dover, 1972.
 - Bending, M.J., Hutchinson, H.P., “The Calculation of Steady State Incompressible Flow in Large Networks of Pipes”, *Chem. Eng. Sci.*, **28**, 1857-1864 (1973).
 - Benneker, A.H., Kronberg, A.E., Westerterp, K.R., “Longitudinal Mass and Heat Dispersion in Tubular Reactors”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 2031-2040 (1997).
 - Benneker, A.H., Kronberg, A.E., Landsbergen, I.C., Westerterp, K.R., “Mass Dispersion in Liquid Flow through Packed Beds”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **41**, 1716-1722 (2002).
 - Bentz, D.P., Martys, N., “Hydraulic Radius and Transport in Reconstructed Model Three-Dimensional Porous Media”, *Transport Porous Media*, **17**, 221-238 (1994).
 - Berkowitz, B., Ewing, R.P., “Percolation Theory and Network Modeling. Applications in Soil Physics”, *Surveys Geophysics*, **19**, 23-72 (1998).
 - Berkowitz, B., Scher, H., “The Role of Probabilistic Approaches to Transport Theory in Heterogeneous Media”, *Transport Porous Media*, **42**, 241-263 (2001).
 - Berryman, J.G., “Random Close Packing of Hard Spheres and Disks”, *Phys. Rev. A*, **27**, 1053-1061 (1983).
 - Bhatia, S.K., “Determination of Pore Size Distributions by Regularization and Finite Element Collocation”, *Chem. Eng. Sci.*, **53**, 3239-3249 (1998).
 - Bird, R. B., Stewart, W.E., Lighfoot, E.N., *Transport Phenomena*, John Wiley and Sons, 2nd Edition, 1960.
 - Bischoff, K.B., Levenspiel, O., “Fluid Dispersion-Generalization and Comparison of Mathematical Models. I: Generalization of Models”, *Chem. Eng. Sci.*, **17**, 245-255 (1962a).
 - Bischoff, K.B., Levenspiel, O., “Fluid Dispersion-Generalization and Comparison of Mathematical Models. I: Comparison of Models”, *Chem. Eng. Sci.*, **17**, 257-264 (1962b).
 - Blick, E.F., “Capillary-Orifice Model for High-Speed Flow through Porous Media”, *Ind. Eng. Chem. Proc. Dev.*, **5**, 90-94 (1966).
 - Blunt, M., King, P., “Macroscopic Parameters from Simulations of Pore Scale Flow”, *Phys. Rev. A*, **42**, 4780-4787 (1990).

- Blunt, M., King, M.J., Scher, H., “Simulation and Theory of Two-Phase Flow in Porous Media”, *Phys. Rev. A*, **46**, 7680-7699 (1992).
- Blunt, M., Jackson, M.D., Piri, M., Valvatane, P.H., “Detailed Physics, Predictive Capabilities and Macroscopic Consequences for Pore-Network Models of Multiphase Flow”, *Advances Water Resources*, **25**, 1069-1089 (2002).
- Bocharov, G.A., Rihan, F.A., “Numerical Modelling in Biosciences Using Dealy Differential Equations”, *J. Computational Applied Mathematics*, **125**, 183-199 (2000).
- Borges, F.S., *Elementos de Cristalografia*, Fundação Calouste Gulbenkian, 1982.
- Brasquet, C., Le Cloirec, P., “Pressure Drop Through Textile Fabrics – Experimental Data Modeling Using Classical Models and Neural Networks”, *Chem. Eng. Sci.*, **55**, 2767-2778 (2000).
- Brenner, H., “The Diffusion Model of Longitudinal Mixing in Beds of Finite Length – Numerical Values”, *Chem. Eng. Sci.*, **17**, 229-243 (1962).
- Brenner, H., “Dispersion Resulting From Flow Through Spatially Periodic Porous Media”, *Proc. Roy. Soc. London*, **297**, 81-133 (1980).
- Brenner, H., Adler, P.M., “Dispersion Resulting From Flow through Spatially Periodic Porous Media. II: Surface and Intraparticle Transport”, *Proc. Roy. Soc. London*, **307**, 149-200 (1982).
- Brinkman, H.C., “A calculation of the Viscous Force Exerted by a Flowing Fluid on a Dense Swarm of Particles”, *Appl. Sci. Res.*, **1**, 27-34 (1948).
- Brunjail, D., Comiti, J., “Mass Transfer and Energy Aspects for Forced Flow through Packed Beds of Long Cylindrical Particles”, *Chem. Eng. J.*, **45**, 123-132 (1990).
- Bryant, S., Blunt, M., “Prediction of Relative Permeability in Simple Porous Media”, *Phys. Rev. A*, **46**, 2004-2011 (1992).
- Bryant, S.L., King, P.R., Mellor, D.W., “Network Model Evaluation of Permeability and Spatial Correlation in a Real Random Sphere Packing”, *Transport Porous Media*, **11**, 53-70 (1993a).
- Bryant, S.L., Mellor, D.W., Cade, C.A., “Physically Representative Network Models of Transport in Porous Media”, *AIChE J.*, **39**, 387-393 (1993b).

-
- Bryant, S.L., Mason, G., Mellor, D., “Quantification of Spatial Correlations in Porous Media and Its Effect on Mercury Porosimetry”, *J. Colloid Interfac. Sci.*, **39**, 88-100 (1996).
 - Burganos, V.N., Paraskeva, C.A., Payatakes, A.C., “Monte Carlo Network Simulation of Horizontal, Upflow and Downflow Depth Filtration”, *AIChE J.*, **41**, 272-285 (1995).
 - Bryntesson, L.M., “Pore Network Modelling of the Behaviour of a Solute in Chromatography Media: Transient and Steady-State Diffusion Properties”, *J. Chromatography A*, **945**, 103-115 (2002).
 - Cao, J., Kitanidis, P.K., “Adaptive Finite Element Simulation of Stokes Flow in Porous Media”, *Advances Water Resources*, **22**, 17-31 (1998).
 - Carbonell, R.G., “Effect of Pore Distribution and Flow Segregation on Dispersion in Porous Media”, *Chem. Eng. Sci.*, **34**, 1031-1039 (1979).
 - Carman, P.C., “Fluid Flow through Granular Beds”, *Trans. IChemE*, **15**, 150-166 (1937).
 - Chan, S.K., Ng, K.M., “Geometrical Characteristics of a Computer-Generated Three-Dimensional Packed Column of Equal and Unequal Sized Spheres - with Special Reference to Wall Effects”, *Chem. Eng. Commun.*, **48**, 215-236 (1986).
 - Chan, S.K., Ng, K.M., “Geometrical Characteristics of the Pore Space in a Random Packing of Spheres”, *Powder Technol.*, **54**, 147 (1988).
 - Chan, H.C., Chen, S.C. Chang, Y.I., “Simulation: the Deposition Behavior of Brownian Particles in Porous Media by Using the Triangular Network Model”, *Separation Purification Technology*, **44**, 103-114 (2005).
 - Chandler, R., Koplik, J., Lerman, K., Willemsen, J., “Capillary Displacement and Percolation in Porous Media”, *J. Fluid Mech.*, **119**, 249-267 (1982).
 - Chang, Y.I., Chen, S.C., Chan, H.C., Lee, E. “Network Simulation for Deep Bed Filtration of Brownian Particles”, *Chem. Eng. Sci.*, **59**, 4467-4479 (2004).
 - Chang, Y.I., Chan, H.C., “Network Simulation of Deep Bed Filtration of Brownian Particles – a Supplement”, *Chem. Eng. Sci.*, **60**, 2827-2831 (2005).
 - Chaplain, V., Allain, C., Hulin, J.P., “Tracer Dispersion in Power Law Fluids through Porous Media: Evidence of a Crossover from a Logarithmic to a Power Law Behaviour”, *Europhys. J. B*, **6**, 225-231 (1998).

- Chapra, R., Canale, R., *Numerical Methods with Personal Computer Applications*, 2nd Edition, Mac-Graw Hill, 1989.
- Chatzis, I., Dullien, F.A.L., “Modelling Pore Structure by 2-D and 3-D Networks with Application to Sandstones”, *J. Can. Pet. Tech.*, 97-108 (1977).
- Chhabra, R.P., Comiti, J., Machac, I., “Flow of Non-Newtonian Fluids in Fixed and Fluidised Beds”, *Chem. Eng. Sci.*, **56**, 1-27 (2001).
- Choo, C., Tien, C., “Simulation of Hydrosol Deposition in Granular Media”, *AIChE J.*, **41**, 1426-1442 (1995).
- Chu, C.F., Ng, K.M., “Flow in Packed Beds with a Small Tube to Particle Diameter Ratio”, *AIChE J.*, **35**, 148-158 (1989a).
- Chu, C.F., Ng, K.M., “Model for Pressure Drop Hysteresis in Trickle-beds”, *AIChE J.*, **35**, 1365-1369 (1989b).
- Churchill, S.W., Usagi, R., “A General Expression for the Correlation of Rates of Transfer and Other Phenomena”, *AIChE J.*, **18**, 1121-1128 (1972).
- Cieslicki, K., “Some Remarks on flows in Channels with Periodic Abrupt Expansions”, *Chem. Eng. Commun.*, **64**, 67-81 (1988).
- Clement, T.P., “Generalized Solution to Multispecies Transport Equations Coupled with a First-Order Reaction-Network”, *Water Resources Research*, **37**, 157-163 (2001).
- Coelho, D., Thovert, J.F., Adler, P.M., “Geometrical and Transport Properties of Random Packings of Spheres and Aspherical Particles”, *Phys. Rev. E*, **55**, 1959-1978 (1997).
- Comiti, J., Renaud, M., “A new Model for Determining Mean Structure Parameters of Fixed Beds from Pressure Drop Measurements: Application to Beds Packed with Parallelepipedal Particles”, *Chem. Eng. Sci.*, **44**, 1539-1549 (1989).
- Comiti, J., Sabiri, N.E., Montillet, A., “Experimental Characterization of Flow Regimes in Various Porous Media. III: Limit of Darcy's or Creeping Flow Regime for Newtonian and Purely Viscous Non-Newtonian Fluids”, *Chem. Eng. Sci.*, **55**, 3057-3061 (2000).
- Constantinides, G.N., Payatakes, A.C., “A Three Dimensional Network Model for Consolidated Porous Media. Basic Studies”, *Chem. Eng. Commun.*, **81**, 55-81 (1989).
- Constantinides, G.N., Payatakes, A.C., “Network Simulation of Steady-State Two-Phase Flow in Consolidated Porous Media”, *AIChE J.*, **42**, 369-382 (1996).

-
- Conte, S.D, De Boor, Carl, *Elementary Numerical Analysis - An Algorithmic Approach*, Mac-Graw Hill, 4th Edition, 1984.
 - Corwin, S.P., Sarafyan, D., Thompson, S., “DKLAG6: a Code Based on Continuously Imbedded Sixth-order Runge-Kutta Methods for the Solution of State-Dependent Functional Differential equations”, *Applied Numerical Mathematics*, **24**, 319-330 (1997).
 - Coulaud, O., Morel, P., Caltagirone, J.P., “Numerical Modelling of Non-Linear Effects in Laminar Flow Through a Porous Medium”, *J. Fluid Mech.*, **190**, 393-407 (1988).
 - Coulson, J.M., “The Flow of Fluids through Granular Beds: Effect of Particle Shape and Voids in Streamline Flow”, *Trans. IChemE*, **27**, 237-257 (1948).
 - Daccord, G., “Chemical Dissolution of a Porous Medium by a Reactive Fluid.” *Phys. Rev. Letters*, **58**, 479-482 (1987a).
 - Daccord, G., Touboul, E., Lenormand, R. “Carbonate Acidizing: A Quantitative Study of the Wormholing Phenomenon”, SPE 16887, *62nd Annual Tech. Conf. and Exhib. SPE*, Dallas, Texas (1987b).
 - Damion, R.A., Packer, K.J., Sorbie, K.S., McDougall, S.R., “Pore-Scale Network Modelling of Flow Propagators Derived from Pulsed Magnetic Field Gradient Spin Echo NMR Measurements in Porous Media”, *Chem. Eng. Sci.*, **55**, 5981-5998 (2000).
 - Danckwerts, P.V., “Continuous Flow Systems. Distribution of Residence Times”, *Chem. Eng. Sci.*, **2**, 1-13 (1953).
 - Darcy, H., “Determination of the Laws of Flow of Water through Sand – Appendix to Histoire des Fontaines Publiques de Dijon”, 590-595, 1856– Translated by Crump, J.R., *Fluid/Particle Separation J.*, **2**, 33-35 (1989).
 - Davdar, M., Sohrabi, M., Sahimi, M., “Pore Network Model of Deactivation of Immobilized Glucose Isomerase in Packed Bed Reactors. I: Two-Dimensional Simulations at the Particle Level”, *Chem. Eng. Sci.*, **56**, 2803-2819 (2001).
 - Davdar, M., Sahimi, M., “Pore Network Model of Deactivation of Immobilized Glucose Isomerase in Packed Bed Reactors. II: Three-Dimensional Simulation at the Particle Level”, *Chem. Eng. Sci.*, **57**, 939-952 (2002).
 - Davdar, M., Sohrabi, M., Sahimi, M., “Pore Network Model of Deactivation of Immobilized Glucose Isomerase in Packed Bed Reactors. III: Multiscale Modelling”, *Chem. Eng. Sci.*, **58**, 4935-4951 (2003).

- Deans, H.A., Lapidus, L., “A Computational Model for Predicting and Correlating the Behavior of Fixed-Bed Reactors”, *AIChE J.*, **6**, 656-668 (1960).
- Deepak, P.D., Bhatia, S.K., “Transport in Capillary Network Models of Porous Media: Theory and Simulations”, *Chem. Eng. Sci.*, **49**, 245-257 (1994).
- Deiber, J.A., Schowalter, W.R., “Flow Through Tubes with Sinusoidal Axial Variations in Diameter”, *AIChE J.*, **25**, 638-645 (1979).
- Delay, F., Porel, G., Banton, O., “An Approach to Transport in Heterogeneous Porous Media Using the Truncated Temporal Moment Equations: Theory and Numerical Validation”, *Transport Porous Media*, **32**, 199-232 (1998).
- De Jong, G.J., “Longitudinal and Transverse Diffusion in Granular Deposits”, *Trans. Amer. Geophys. Union*, **59**, 67-74 (1958).
- Desoer, C.A., Kuh, E.S., *Basic Circuit Theory*, McGraw Hill, 1969.
- Dias, M.M., *Formation and Dynamics of Oil Ganglia in Porous Media*, Ph.D. Thesis, University of Houston, Texas, USA, 1984.
- Dias, M.M., Payatakes, A.C., “Network models for Two-Phase Flow in Porous Media. Part 1: Imiscible Displacement of Non-Wetting fluids”, *J. Fluid Mech.*, **164**, 305-336 (1986a).
- Dias, M.M., Payatakes, A.C., “Network Models for Two-Phase Flow in Porous Media. Part 2: Motion of Oil Ganglia”, *J. Fluid Mech.*, **164**, 337-358 (1986b).
- Didierjean, S., Souto, H.P.A., Delannay, R., Moyne, C., “Dispersion in Periodic Porous Media. Experience versus Theory for Two-Dimensional Systems”, *Chem. Eng. Sci.*, **52**, 1861-1874 (1997).
- Dill, L.H., Brenner, H., “Dispersion Resulting From Flow Through Spatially Periodic Porous Media - III: Time-Periodic Processes”, *PhysicoChem. Hydrodynam.*, **4**, 279-302 (1983).
- Dodds, J.A., Lloyd, P.J., “A Model for the Void Structure in Multicomponent Sphere Packs Applied to Capillary Pressure Curves”, *Powder Technol.*, **5**, 69-76 (1971).
- Dommeti, S.M.S., Balakotaiah, V., “On the Limits of Validity of Effective Dispersion Models for Bulk Reactions”, *Chem. Eng. Sci.*, **55**, 6169-6186 (2000).

-
- Drazer, G., Chertcoff, R., L., Rosen, M., Hulin, J.P., “Tracer Dispersion in Packings of Porous Activated Carbon Grains”, *Chem. Eng. Sci.*, **54**, 4137-4144, 1999.
 - Duda, J.L., Hong, S., Klaus, E., “Flow of Polymer Solutions in Porous Media: Inadequacy of the Capillary Model”, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, **22**, 299-305 (1983).
 - Dullien, F.A.L., Batra, V.K., “Determination of the Structure of Porous Media”, *Ind. Eng. Chem.*, **62**(10), 25-53, (1970).
 - Dullien, F.A.L., Azzam, M.I.S., “Flow Rate-Pressure Gradient Measurements in Periodically Nonuniform Capillary Tubes”, *AIChE J.*, **19**, 222-229 (1973).
 - Dullien, F.A.L., “Invited Review. Single Phase Flow through Porous Media and Pore Structure”, *Chem. Eng. J.*, **10**, 1-34 (1975).
 - Dullien, F.A.L., Dhawan, G.K., “Bivariate Pore-Size Distributions of Some Sandstones”, *J. Colloid Interfac. Sci.*, **52**, 129-135 (1975).
 - Dullien, F.A.L., “Two-Phase Flow in Porous Media”, *Chem. Eng. Technol.*, **11**, 407-424 (1988).
 - Dullien, F.A.L., “Characterization of Porous Media – Pore Level”, *Transport Porous Media*, **6**, 581-606 (1991).
 - Dullien, F.A.L., *Porous Media. Fluid Transport and Pore Structure*, Second Edition, Academic Press, 1992.
 - Dullien, F.A.L., “Capillary Effects and Multiphase Flow in Porous Media”, *J. Porous Media*, **1**, 1-29 (1998).
 - Dungan, S.R., Shapiro, M., Brenner, H., “Convective-Diffusive-Reactive Taylor Dispersion in Particulate Multiphase Systems”, *Proc. Roy. Soc. London*, **429**, 639-671 (1990).
 - Dwyer, H.A., DeBus, K., Shahcheraghi, N., “The Use of Oversets Meshes in Particle and Porous Media Three-Dimensional Flows”, *Int. J. Num. Meth. Fluids*, **31**, 393-406 (1999).
 - Dybbs, A., Edwards, R.V., “A New Look at Porous Media Fluid Mechanics - Darcy to Turbulent”, em *Fundamentals of Transport Phenomena in Porous Media*, J. Bear e Yavuz Corapcioglu (eds.), Kluwer Academic Pub., Dodrecht, 199-256, 1984.

- Edwards, D.A., Shapiro, M., Bar-Yoseph, P., Shapira, M., “The Influence of Reynolds Number upon the Apparent Permeability of Spatially Arrays of Cylinders”, *Phys. Fluids*, **2**, 45-55 (1990).
- Edwards, D.A., “The Macrotransport of Aerosol Particles in the Lung: Aerosol Deposition Phenomena”, *J. Aerosol Sci.*, **26**, 293-317 (1995).
- Ekambara, K., Joshi, J.B., “Axial Mixing in Pipe Flows: Turbulent and Transition Regimes”, *Chem Eng. Sci.*, **58**, 2715-2724 (2003).
- El-Nafaty, U.A., Mann, R., “Support-Pore Architecture Optimization in FCC Catalys Particles Using Designed Pore Networks”, *Chem. Eng. Sci.*, **54**, 3475-3484 (1999).
- El-Nafaty, U.A., Mann, R., “Coke Burnoff in a Typical FCC Particle Analysed by a SEM 2-D Network Pore Structure”, *Chem. Eng. Sci.*, **56**, 865-872 (2001).
- Ergun, S., “Fluid Flow Through Packed Columns”, *Chemical Engineering Progress*, **48** , 89-94 (1952).
- Espinoza, C., Valocchi, A.J., “Temporal Moments Analysis of Transport in Chemically Heterogeneous Porous Media”, *J. Hydrologic Engng. Proc. ASCE*, **3**, 276-284 (1998).
- Evans, E.V., Kenney, C.N., “Gaseous Dispersion in Laminar Flow through a Circular Tube with Mass Transfer to a Retentive Layer”, *Proc. Roy. Soc. London*, **293**, 562-572 (1966).
- Ewing, R.P., Gupta, S.C., “Modeling Precolation Properties of Random Media Using a Domain Network” *Water Resources Research*, **29**, 3169-3178 (1993).
- Fand, R.M., Kim, B.Y.K., Lam, A.C.C., Phan, R.T., "Resistance to the Flow of Fluids through Simple and Complex Porous Media whose Matrices are Composed of Randomly Packed Spheres ", *J. Fluids Eng. Trans. ASME*, **109**, 268-274 (1987).
- Fand, R.M., Sundaram, M., Varahasamy, M., “Incompressible Fluid Flow Through Pipes Packed with Spheres at Low Dimension Ratios”, *J. Fluids Eng. Trans. ASME*, **115**, 169-172 (1993).
- Fatt, M., “The Network Model of Porous Media. I - Capillary Pressure Characteristics”, *Pet. Trans.*, **207**, 142-164 (1956).
- Fedkiw, P., Newman, J., “Mass Transfer at High Peclet Numbers for Creeping Flow in a Packed-Bed Reactor“, *AIChE J.*, **23**, 255-263 (1977).

-
- Fife, P.C., Nicholes, K.R.K., “Dispersion in Flow through Small Tubes”, *Proc. Roy. Soc. London*, **344**, 131-145 (1975).
 - Figueiredo, J., Ribeiro, F.R., *Catálise Heterogênea*, Fundação Calouste Gulbenkian, 1988.
 - Field, M.S., “Efficient Hydrologic Tracer-Test Design for Tracer-Mass Estimation and Sample-Collection Frequency. 1: Method Development”, *Environmental Geology*, **42**(7), 827-838 (2002).
 - Field, M.S., “Efficient Hydrologic Tracer-Test Design for Tracer-Mass Estimation and Sample-Collection Frequency. 2: Experimental Results”, *Environmental Geology*, **42**(7), 839-850 (2002).
 - Field, M.S., “A Review of Some Tracer-Test Design Equations for Tracer-Mass Estimation and Sample-Collection Frequency”, *Environmental Geology*, **43**(8), 867-881 (2002).
 - Figus, C., Le Bray, Y., Bories, S., Prat, M., “Heat and Mass Transfer with Phase Change in a Porous Structure Partially Heated: Continuum Model and Pore Network Simulations”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **42**, 2557-2569 (1999).
 - Finney, J.L., “Random Packings and the Structure of Simple Liquids. I: The Geometry of Random Close Packing”, *Proc. Roy. Soc. London*, **319**, 479-493 (1970).
 - Fogler, H., *Elements of Chemical Reaction Engineering*, Second Edition, Prentice-Hall, 1992.
 - Foscolo, P.U., Gibilaro, L.G., Waldram, S.P., “A Unified Model for Particulate Expansion of Fluidized Beds and Flow in Fixed Porous Media”, *Chem. Eng. Sci.*, **38** (8), 1251-1260 (1983).
 - Fogler, H., *Elements of Chemical Reaction Engineering*, Second Edition, Prentice-Hall, 1992.
 - Foumeny, E.A., Chowdhury, M.A., McGreavy, C., Castro, J., “Estimation of Dispersion Coefficients in Packed Beds”, *Chem. Eng. Technol.*, **15**, 168-191 (1992).
 - Foumeny, E.A., Kulkarni, A., Roshani, S., Vatani, A., “Elucidation of Pressure Drop in Packed-Bed Systems”, *Appl. Thermal Technol.*, **16**, 195-202 (1996).
 - Frevel, L.K., Kressley, L.J., “Modifications in Mercury Porosimetry”, *Analytical Chemistry*, **35**(10), 1492- (1963).

- Fried, J.J., Combarous, M.A., “Dispersion in Porous Media”, *Advances Hydrosiences*, **7**, 169-282 (1971).
- Friedman, S., Seaton, N.A., “On the Properties of Anisotropic Networks of Capillaries”, *Water Resources Research*, **32**, 339-347 (1996).
- Froment, G., Bischoff, K., *Chemical Reactor Engineering*, John Wiley & Sons, 2nd Edition, 1990.
- Gaganis P., Skouras, E.D., Theodoropoulou, M.A., Tsakiroglou, C.D., Burganos, V.N., “On the Evaluation of Coefficients from Visualization Experiments in Artificial Porous Media”, *J. Hydrology*, **307**, 79-91 (2005).
- Gallegos, D.P., Smith, D.M., “A NMR Technique for the Analysis of Pore Structure: Determination of Continuous Pore Size Distributions”, *J. Colloid Interfac. Sci.*, **122**, 143-153 (1988).
- Gavalas, G.R., Kim, S., “Periodic Capillary Models for Diffusion in Porous Solids”, *Chem. Eng. Sci.*, **36**, 1111-1122 (1981).
- Gay, B., Middleton, P., “The Solution of Pipe Network Problems”, *Chem. Eng. Sci.*, **26**, 109-123 (1971).
- Gay, B., Preece, P.E., “Matrix Methods for the Solution of Fluid Network Problems: Part I: Mesh Methods”, *Trans. IChemE*, **53**, 12-15 (1975).
- Geerstema J., “Estimating the Coefficient of Inertial Resistance in Fluid Flow Through Porous Media”, *SPE J.*, **14**, 445-450 (1974).
- Gill, W.N., Ananthakrishnan, V., “Laminar Dispersion in Capillaries. Part II: Effect of Inlet Boundary Conditions and Turner Type of System Capacitance”, *AIChE J.*, **12**, 906-915 (1966).
- Gill, W.N., “Analysis of Axial Dispersion with Time Variable Flow”, *Chem. Eng. Sci.*, **22**, 1013-1017 (1967a).
- Gill, W.N., Ananthakrishnan, V., “Laminar Dispersion in Capillaries. Part IV: Slug Stimulus”, *AIChE J.*, **13**, 801-807 (1967b).
- Gill W.N., “A Note on the Solution of Transient Dispersion Problems”, *Proc. Roy. Soc. London*, **298**, 335-339 (1967c).

-
- Gill W.N., Sankasubramian, S., “Exact Analysis of Unsteady Convective Dispersion”, *Proc. Roy. Soc. London*, **316**, 341-350 (1970).
 - Gill W.N., Sankasubramian, S., “Dispersion of a Non-Uniform Slug in Time-Dependent Flow”, *Proc. Roy. Soc. London*, **322**, 101-117 (1971).
 - Gill W.N., Sankasubramian, S., “Dispersion of Nonuniformly Distributed Time-Variable Continuous Sources in Time-Independent Flow”, *Proc. Roy. Soc. London*, **327**, 191-208 (1972).
 - Gill, W.N., Ruckenstein, E., Hsieh, H.P., “Homogeneous Models for Porous Catalysts and Tubular Reactors with Heterogeneous Reaction”, *Chem. Eng. Sci.*, **30**, 685-694 (1975).
 - Gladden, L.F., “Influence of Pellet Structure on Selectivity during Pressure Swing Adsorption Separations”, *Chem. Eng. Sci.*, **46**(10), 2455-2464 (1991).
 - Gladden, L.F., “Nuclear Magnetic Resonance Studies of Porous Media”, *Trans. IChemE*, **71**, 657-674 (1993).
 - Gladden, L.F., “Nuclear Magnetic Resonance in Chemical Engineering: Principles and Applications”, *Chem. Eng. Sci.*, **49**, 3339-3408 (1994).
 - Gladden, L.F., Hollewand, M.P., Alexander, P., “Characterization of Structural Inhomogeneities in Porous Media”, *AIChE J.*, **41**, 894-906 (1995).
 - Goode, P. A., Ramakrishnan, T.S., “Momentum Transfer across Fluid-Fluid Interfaces in Porous Media: A Network Model”, *AIChE J.*, **39**, 1124-1134 (1993).
 - Gratton, L.C., Fraser, H.J., “Systematic Packing of Spheres-With Particular Attention to Porosity and Permeability”, *J. Geology*, **43**, 785-909 (1935).
 - Grattoni, C.A., Dawe, R.A., Bidner, M.S., “On the Simultaneous Determination of Dispersion and Nonlinear Adsorption Parameters from Displacement Tests by Using Numerical Models and Optimisation Techniques”, *Advances Water Resources*, **16**, 127-135 (1993).
 - Grimes, B.A., Meyers, J.J., Liapis, A.I., “Determination of the Intraparticle Electroosmotic Volumetric Flow-Rate, Velocity and Peclet Number in Capillary Electrochromatography from Pore Network Theory”, *J. Chromatogr. A*, **890**, 61-72 (2000).

- Grubert, D., “Effective Dispersivities for a Two-Dimensional Periodic Fracture Network by a Continuous Time Random Walk Analysis of Single-Intersection Simulations”, *Water Resources Research*, **37**, 41-49 (2001).
- Guell, D.C., Cox, R.G., Brenner, H., “Taylor Dispersion in Conduits of Large Aspect Ratio”, *Chem. Eng. Commun.*, **58**, 231-244 (1987).
- Gunn, D.J., “Theory of Axial and Radial Dispersion in Packed Beds”, *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, **47**, T351-T359 (1969).
- Gunn, D.J., “Axial and Radial Dispersion in Fixed Beds”, *Chem. Eng. Sci.*, **42**, 363-373 (1987).
- Gunn, D.J., “An Analysis of Convective Dispersion and Reaction in the Fixed Bed-Reactor”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **47**, 2861-2875 (2004).
- Gupta P.S., “Effect of Homogeneous and Heterogeneous Reactions on the Dispersion of a Solute in the Laminar Flow between Two Plates”, *Proc. Roy. Soc. London*, **330**, 59-63 (1972).
- Guyon, E., “Disorders in Granular Matter”, *Physica A*, **357**, 150-158 (2005).
- Hackert, C.L., Ellzey, J.L., Ezekoye, O.A., Hall, M.J., “Transverse Dispersion at High Peclet Numbers in Short Porous Media”, *Exp. Fluids*, **21**, 286-290 (1996).
- Hampton, J.H.D., Savage, S.B., Drew, R.A., “Computer Modelling of Filter Pressing and Clogging in a Random Tube Network”, *Chem. Eng. Sci.*, **48**, 1601-1611 (1993).
- Han, N., Bhakta, J., Carbonell, R.G., “Longitudinal and lateral dispersion in packed beds: Effect of column length and particle size distribution”, *AIChE J.*, **31**, 277-288 (1985).
- Happel, J., “Viscous Flow in Multiparticle Systems: Slow Motion of Fluids Relative to Beds of Spherical Particles”, *AIChE J.*, **4**, 197-201 (1958).
- Happel, J., “Viscous Flow Relative to Arrays of Cylinders”, *AIChE J.*, **5**, 174-177 (1959).
- Happel, J., Brenner, H., *Low Reynolds Number Hydrodynamics*, Kluwer Academic Publishers, 2nd Edition, 1983.
- Haring, R.E., Greenkorn, R.A., “A Statistical Model of a Porous Medium with Nonuniform Pores”, *AIChE J.*, **16**, 477-483 (1970).
- Harleman, D.R.F., Rumer, R.R., “Longitudinal and Lateral Dispersion in a Isotropic Porous Medium”, *J. Fluid Mech.*, **16**, 385-394 (1963).

-
- Hashemi, M., Dabir, B., Sahimi, M., “Dynamics of Two-Phase Flow in Porous Media: Simultaneous Invasion of Two Fluids”, *AIChE J.*, **45**, 1365-1382 (1999).
 - Hasimoto, H., “On the Periodic Fundamental Solutions of the Stokes Equations and Their Application to Viscous Flow Past a Cubic Array of Spheres”, *J. Fluid Mech.*, **5**, 317-328 (1959).
 - Hemmat, M., Borhan, A., “Creeping Flow through Sinusoidally Constricted Capillaries”, *Phys. Fluids*, **7**, 2111-2221 (1995).
 - Hiby, J.W., “Longitudinal and Transverse Mixing During Single-Phase Flow Through Granular Beds”, *Interaction Between Fluids and Particles Symposia*, 312-325 (1962).
 - Hicks, R.E., “Pressure Drop in Packed Beds of Spheres”, *Ind. Eng. Chem. Fund.*, **9**, 500-502 (1970).
 - Hinkley, R.E., Dias, M.M, Payatakes, A.C., “On the Motion of Oil Ganglia in Porous Media”, *PhysicoChem. Hydrodynam.*, **8**, 185-211 (1987).
 - Hoagland, D.A., Prud'Homme, R.K., “Taylor-Aris Dispersion Arising From Flow in a Sinusoidal Tube”, *AIChE J.*, **31**, 236-244 (1985).
 - Hoefner, M.L., Fogler, H.S., “Pore Evolution and Channel Formation During Flow and Reaction in Porous Media”, *AIChE J.*, **34**, 45-54 (1988).
 - Hollewand, M.P., Gladden, L.F., “Representation of Porous Catalysts Using Random Pore Networks”, *Chem. Eng. Sci.*, **47**, 2757-2762 (1992).
 - Hooper, W.B., “The Two-K Method Predicts Head Losses in Pipe Fittings”, *Chem. Eng.*, 96-100 (1981- August, 24).
 - Horn, F.J.M., “Calculation of Dispersion Coefficients by Means of Moments”, *AIChE J.*, **17**, 613-620 (1971).
 - Houache, O.A., Khezzar, L., “Matrix Methods for Pipe Network Analysis: Observations on Partitioning and Cut Methods”, *Trans. IChemE*, **74**, 321-328 (1996).
 - Houpert, A., “On the Flow of Gases in Porous Media”, *Rev. Inst. Français Pet.*, **14**, 1468-1497 (1959).
 - Huang, K., Van Genuchten, M.T., Zhang, R., “Exact Solutions for One-Dimensional Transport with Asymptotic Scale-Dependent Dispersion”, *Appl. Math. Modelling*, **20**, 298-308 (1996).

- Huseby, O., Thovert, J.F., Adler, P.M., “Dispersion in Three-Dimensional Fracture Networks”, *Phys. Fluids*, **13**, 594-615 (2001).
- Imdakm, A.O., Sahimi, M., “Transport of Large Particles in Flow through Porous Media”, *Phys. Rev. A*, **36**, 5304-5309 (1987).
- Imdakm, A.O., Sahimi, M., “Computer Simulation of Particle Transport Processes in Flow Trough Porous Media”, *Chem. Eng. Sci.*, **46**, 1977-1993 (1991).
- Ioannidis, M.A., Chatzis, I., “Network Modelling of Pore Structure and Transport Properties of Porous Media”, *Chem. Eng. Sci.*, **48**, 951-972 (1993).
- Ioannidis, M.A., Chatzis, I., “On the Geometry and Topology of 3D Stochastic Porous Media”, *J. Colloid Interfac. Sci.*, **229**, 323-334 (2000).
- Iordanidis, A.A., Annaland, M.V., Kronberg, A.E., Kuipers, J.A.M., “A critical Comparison between the Wave Model and the Standard Dispersion Model”, *Chem. Eng. Sci.*, **58**, 2785-2795 (2003).
- Irandoust, S., Anderson, B., “Monolithic Catalysts for Nonautomobile Applications”, *Catal. Rev.*, **30**, 341-392 (1988).
- Jia, X., Williams, “A Packing Algorithm for Particles of Arbitrary Shapes”, *Powder Technol.*, **120**, 175-186 (2001).
- Johns, M.L., Sederman, A.J., Bramley, A.S., Gladden, L.F., Alexander, P., “Local Transitions in Flow Phenomena Through Packed Beds Identified by MRI”, *AIChE J.*, **46**, 2151-2161 (2000).
- Johnson, G.W., Kapner, R.S., “The Dependence of Axial Dispersion on Non-Uniform Flows in Beds of Uniform Packing”, *Chem. Eng. Sci.*, **45**, 3329-3339 (1990).
- Jones E.H., Smith, C.C., “Non-Equilibrium Partitioning Tracer Transport in Porous Media: 2D Physical Modelling and Imaging Using a Partitioninf Fluorescent Dye”, *Water Research*, **39**, 5099-5111 (2005).
- Kaneko, K., “Determination of Pore Size Distribution 1. Adsorbents and Catalysts.” *J. Membrane Sci.*, **96**, 59-89 (1994).
- Kantzas, A., Chatzis, I., “Application of the Perconditioned Conjugate Gradients Method in the Simulation of Realtive Permeability Properties of Porous Media”, *Chem. Eng. Commun.*, **69**, 169-189 (1988a).

-
- Kantzas, A., Chatzis, I., “Network Simulation of Relative Permeability Curves Using a Bond Correlated-Site Percolation Model of Pore Structure”, *Chem. Eng. Commun.*, **69**, 191-214 (1988b).
 - Kaviany, M., *Principles of Heat Transfer in Porous Media*, Springer Mechanical Engineering Series, 1995.
 - Kececioglu, I., Jiang, Y., “Flow through Porous Media of Packed Beds Saturated with Water”, *J. Fluids Eng. Trans. ASME*, **116**, 164-170 (1994).
 - Keil, F.J., Rieckmann, C., “Optimization of Three-Dimensional Catalyst Pore Structures”, *Chem. Eng. Sci.*, **49**, 4811-4822 (1994).
 - Keil, F.J., “Diffusion and Reaction in Porous Networks”, *Catalysis Today*, **53**, 245-258 (1999).
 - Keller, A.A., Roberts, P.V., Blunt, M.J., “Effect of Fracture Variations on the Dispersion of Contaminants”, *Water Resources Research*, **35**, 55-63 (1999).
 - Kelly, W.E., Mazac, O., Mares, S., “Dispersion Parameters from the Impulse Response Using Regression”, *J. Hydrol.*, **163**, 85-94 (1994).
 - Kim, B.Y.K., *The Resistance to Flow in Simple and Complex Porous Media Whose Matrices are Composed of Spheres*, M.Sc. Dissertation, University of Hawai at Manoa, 1985.
 - Knackstedt, M.A., Sheppard, A.P., Sahimi, M., “Pore Network Modeling of Two-Phase Flow in Porous Rock: the Effect of Correlated Heterogeneity”, *Advances Water Research*, **24**, 257-277 (2001).
 - Kocabas, I., Islam, M.R., “Concentration and Temperature Transients in Heterogeneous Porous Media. I – Longitudinal Transport”, *J. Petrol. Sci. Engng.*, **26**, 211-220 (2000a).
 - Kocabas, I., Islam, M.R., “Concentration and Temperature Transients in Heterogeneous Porous Media. II – Radial Transport”, *J. Petrol. Sci. Engng.*, **26**, 221-233 (2000b).
 - Koch, D.L., Brady, J.F., “Dispersion in Fixed Beds”, *J. Fluid Mech.*, **154**, 399-427 (1985).
 - Koplik, J., “Creeping Flow in Two-Dimensional Networks”, *J. Fluid Mech.*, **119**, 219-247 (1982).

- Koplik, J., Lasseter, T.J., “Two-Phase Flow in Random Network Models of Porous Media”, SPE 11014, *57th Annual Fall Technical Conference and Exhibition of the SPE*, 1982.
- Koplik, J., Lasseter, T.J., “One and Two Phase Flow in Network Models of Porous Media”, *Chem. Eng. Commun.*, **26**, 285-295 (1984).
- Koplik, J., Redner, S., Wilkinson, D., “Transport and Dispersion in Random Networks with Percolation Disorder”, *Phys. Rev. A.*, **37**, 2619-2636 (1988).
- Korenaga, T., Shen, F., Takahashi, T., “An Experimental Study of the Dispersion in Laminar Tube Flow”, *AIChE J.*, **35**, 1395-1398 (1989).
- Kronberg, A.E., Benneker, A.H., Westerterp, K.R., “Wave Model for Longitudinal Dispersion: Application to the Laminar-Flow Tubular Reactor”, *AIChE J.*, **42**, 3133-3144 (1996).
- Kruyer S., “The Penetration of Mercury and Capillary Condensation in Packed Spheres”, *Trans. Faraday Society*, **54**, 1758-1767 (1958).
- Küfner, R., Hofmann, H., “Implementation of Radial Porosity and Velocity Distribution in a Reactor Model for Heterogeneous Catalytic Gasphase Reactions (Torus-Model)”, *Chem. Eng. Sci.*, **45**, 2141-2146 (1990).
- Kuwabara, S., “The Forces Experienced by Randomly Distributed Parallel Circular Cylinders or Spheres in a Viscous Flow at Small Reynolds Numbers”, *J. Phys. Soc. Japan*, **14**, 527-532 (1959).
- Lage, J.L., Antohe, B.V., Nield, D.A., “Two Types of Nonlinear Pressure-Drop versus Flow-Rate Relation Observed for Saturated Porous Media”, *J. Fluids Eng. Trans. ASME*, **119**, 700-706 (1997).
- Lahbabi, A., Chang, H., “Flow in Periodically Constricted Tubes: Transition to Inertial and Nonsteady Flows”, *Chem. Eng. Sci.*, **41**, 2487-2505 (1986).
- Langer, G., Roethe, A., Roethe, K.P., Gelbin, D., “Heat and Mass Transfer in Packed Beds- III: Axial Mass Dispersion”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **21**, 751-759 (1978).
- Langmuir, I., “The Velocity of Reactions in Gases Moving Through Heated Vessels and the Effect of Convection and Diffusion”, *J. Am. Chem. Soc.*, **30**, 1742-1754 (1908).

-
- Lao, H.W., Neeman, H.J., Papavassiliou, D.V., “A Pore Network Model for the Calculation of Non-Darcy Flow Coefficients in Fluid Flow Through Porous Media”, *Chem. Eng. Comm.*, **191**, 1285-1322 (2004).
 - Larson, R.G., Morrow, N.R., “Effects of Sample Size on Capillary Pressures in Porous Media”, *Powder Technol.*, **30**, 123-138 (1981).
 - Larson, R.E., Higdon, J.J.L., “A Periodic Grain Consolidation Model of Porous Media”, *Phys. Fluids*, **1**, 38-46 (1989).
 - Latour, L. L., Kleinberg, R. L., Mitra, P. P., “Pore-Size Distributions and Tortuosity in Heterogeneous Porous Media”, *J. Magnetic Resonance A*, **112**, 83-91 (1995).
 - Laurindo, J.B., Prat, M., “Numerical and Experimental Network Study of Evaporation in Capillary Porous Media. Drying Rates”, *Chem. Eng. Sci.*, **53**, 2257-2269 (1998).
 - Le Bray, Y., Prat, M., “Three-Dimensional Pore Network Simulation of Drying in Capillary Porous Media”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **42**, 4207-4224 (1999).
 - Lee, S.L., Yang, J.H., “Modeling of Darcy-Forchheimer Drag for Fluid Flow across a Bank of Circular Cylinders”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **40**, 3149-3155 (1997).
 - Lenormand, R., “A Stream Tube Model for Miscible Flow. Part 1: Macrodispersion in Random Porous Media”, *Transport Porous Media*, **18**, 245-261 (1995a).
 - Lenormand, R., Wang, B., “A Stream Tube Model for Miscible Flow. Part 2: Macrodispersion in Porous Media with Long Range Correlations”, *Transport Porous Media*, **18**, 263-282 (1995).
 - Levenspiel, O., Bischoff, K.B., “Patterns of Flow in Chemical Process Vessels”, *Advances Chem. Engng.*, **7**, 95-198 (1972).
 - Levenspiel, O., *The Chemical Reactor Omnibook*, OSU Bookstores, 1979.
 - Li, J., Helm, D., “Viscous Drag, Driving Forces, and their Reduction to Darcy’s Law”, *Water Resources Research*, **34**, 1675-1684 (1998).
 - Li, X., Yortsos, Y.C., “Theory of Multiple Bubble Growth in Porous Media by Solute Diffusion”, *Chem. Eng. Sci.*, **50**, 1247-1271 (1995a).
 - Li, X., Yortsos, Y.C., “Visualization and Simulation of Bubble Growth in Pore Networks”, *AIChE J.*, **41**, 214-222 (1995b).

- Liapis, A.I., Meyers, J.J., Crosser, O.K., “Modeling and Simulation of the Dynamic Behavior of Monoliths. Effects of Pore Structure from Pore Network Model Analysis and Comparison with Columns Packed with Porous Spherical Particles” *J. Chromatogr. A*, **865**, 13-25 (1999).
- Liang, Z., Ioannidis, M.A.; Chatzis, I., “Geometrical and Topological Analysis of Three-Dimensional Porous Media: Pore Space Partitioning on Morphological Skeletonization”, *J. Colloid Interfac. Sci.*, **221**, 13-24 (1999).
- Liang, Z., Ioannidis, M.A., Chatzis, I., “Permeability and Electrical Conductivity of Porous Media from 3D Stochastic Replicas of the Microstructure”, *Chem. Eng. Sci.*, **55**, 5247-5262 (2000).
- Lim, C.S., Ti, H.C., “Mixed Specification Problems in Large-Scale Pipeline Networks”, *Chem. Eng. J.*, **71**, 23-35 (1998).
- Lin, C.Y., Slattery, J.C., “Three-Dimensional, Randomized, Network Model for Two-Phase Flow through Porous Media”, *AIChE J.*, **28**, 311-324 (1982).
- Liu, S., Afacan, A., Masliyah, J., “Steady Incompressible Laminar Flow in Porous Media”, *Chem. Eng. Sci.*, **49**, 3565-3586 (1994).
- Liu, S., Masliyah, J.H., “Single Phase Fluid Flow in Porous Media”, *Chem. Eng. Commun.*, **148-150**, 653-732 (1996).
- Liu, S., Masliyah, J.H., “Non-Linear Flows in Porous Media”, *J. Non Newtonian Fluid Mech.*, **86**, 229-252 (1999).
- Liu, C., Szecsody, J.E., Zachara, J.M., Ball, W.P., “Use of the Generalized Integral Transform Method for Solving Equations of Solute Transport in Porous Media”, *Advances Water Research*, **23**, 483-492 (2000).
- Logan, J.D., “Solute Transport in Porous Media with Scale-Dependent Dispersion and Periodic Boundary Conditions”, *J. Hydrol.*, **184**, 261-272 (1996).
- Loh, K.C., Wang, D.I.C., “Characterization of Pore Size Distribution of Packing Materials Used in Perfusion Chromatography Using a Network Model.” *J. Chromatogr. A*, **718**, 239-255 (1995).
- Loh, K.C., Geng, A., “Hydrodynamic Dispersion in Perfusion Chromatography – a Network Model Analysis”, *Chem. Eng. Sci.*, **58**, 3439-3451(2003).

-
- Lopes, J.C.L., *Dynamics of Droplets in Annular Flow*, PHD. Thesis, University of Houston, Texas, USA, 1984.
 - Lucille, P.L., Burnol, A., Ollar, P., “Chemtrap: a Hydrogeochemical Model for Reactive Transport in Porous Media”, *Hydrogeological Processes*, **14**, 2261-2277 (2000).
 - Ma, H., Ruth, D.W., “A Numerical Analysis of the Interfacial Drag Force for Fluid Flow in Porous Media”, *Transport Porous Media*, **17**, 87-103 (1994).
 - MacDonald, I.F., El-Sayed, M.S., Mow, K., Dullien, F.A.L., “Flow through Porous Media. The Ergun Equation Revisited”, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, **18**, 199-208 (1979).
 - MacDonald, M.J., Chu, C.F., Guilloit, P.P., Ng, K.M., “A Generalized Blake-Kozeny Equation for Multisized Spherical Particles”, *AIChE J.*, **37**, 1583-1588 (1991).
 - Mann, R., Golshan, H., “Application of a Stochastic Network Pore Model to a Catalyst Pellet”, *Chem. Eng. Commun.*, **12**, 377-391 (1981).
 - Mann, R., Almeida, J.J., Mugerwa, M.N., “A Random Pattern Extension to the Stochastic Network Pore Model”, *Chem. Eng. Sci.*, **41**, 2663-2671 (1986).
 - Mann, R., “Catalyst Deactivation by Coke Deposition: Approaches Based on Interaction of Coke Laydown with Pore Structure”, *Catalysis Today*, **37**, 331-349 (1997).
 - Mann, R., “Quantification of Random Structures of Porous Adsorbents”, *AIChE National Meeting*, November 1991.
 - Manz, B., Gladden, L.F., Warren, P.B., “Flow and Dispersion in Porous Media: Lattice-Boltzmann and NMR Studies”, *AIChE J.*, **45**, 1845-1854 (1999).
 - Marmur, A., Cohen, R.D., “Characterization of Porous Media by the Kinetics of Liquid Penetration: The Vertical Capillaries Model”, *J. Colloid Interfac. Sci.*, **189**, 299-304 (1997).
 - Martin, J.L., McCabe, W.L., Monrad, C.C., “Pressure Drop through Stacked Spheres - Effect of Orientation”, *Chem. Eng. Prog.*, **47**, 91-94 (1951).
 - Martin, A.R., Saltiel, C., Shyy, W., “Frictional Losses and Convective Heat Transfer in Sparse, Periodic Cylinder Arrays in Cross Flow”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **41**, 2383-2397 (1998).
 - Martin, A.D., “Interpretation of Residence Time Distribution Data”, *Chem. Eng. Sci.*, **55**, 5907-5917 (2000).

- Mata, V.G.M. *Caracterização de Meios Porosos: Porosimetria, Modelização 3D e Tomografia Seriada. Aplicação a Suportes Catalíticos*, Tese de Doutoramento, DEQ-FEUP, Porto, Portugal, 1998.
- Mata, V.G., Lopes, J.C.B., Dias, M.M., “Porous Media Characterization Using Mercury Porosimetry Simulation. 1: Description of the Simulator and its Sensivity to Model Parameters”, *Ind. Eng. Chem. Res*, **40**, 3511-3522 (2001a).
- Mata, V., V.G., Lopes, J.C.B., Dias, M.M., “Porous Media Characterization Using Mercury Porosimetry Simulation. 2: An Iterative Method for the Determination of the Real Pore Size Distribution and the Mean Coordination Number”, *Ind. Eng. Chem. Res*, **40**, 4836-4843 (2001b).
- Matthews, G.P., Moss, A.K., “The Effects of Correlated Networks on Mercury Intrusion Simulations and Permeabilities of Sandstone and Other Porous Media.” *Powder Technol.*, **83**, 61-77 (1995).
- Mauret, E., Renaud, M., “Transport Phenomena in Multiparticle Systems-I: Limits of Aplicability of Capillary Model in High Voidage Beds - Application to Fixed Beds of Fibres and Fluidized Beds of Spheres”, *Chem. Eng. Sci.*, **52**, 1807-1817 (1997).
- Mayagoitia, V., Rojas, F., Kornhauser, I., Aguilar, H.P., “Modeling of Porous Media and Surfaces Structures. Their True Essence as Networks”, *Langmuir*, **13**, 1327-1331 (1997).
- Mayer, R.P., Stowe, R.A., “Mercury Porosimetry: Breakthrough Pressure for Penetration between Packed Spheres”, *J. Colloid Sci.*, **20**, 893-911 (1965).
- Mayer, R.P., Stowe, R.A., “Mercury Porosimetry: Filling of Toroidal Void Volume Following Between Packed Spheres”, *J. Phys. Chem.*, **70**, 3867-3873 (1966).
- McCabe, W.L., Smith, J.C, Harriot, P., *Unit Operations of Chemical Engineering*, McGraw-Hill International Editions, 4th Edition, 1985.
- McGreavy, C., Andrade, J.S., Rajagopal, K., “Size Exclusion Chromatography in Pore Networks”, *Chromatographia*, **30**, 639-644 (1990).
- McGreavy, C., Andrade, J.S., Rajagopal, K., “Shape Selectivity in Porous Catalysts”, *J. Catalysis*, **131**, 319-325 (1991).
- McGreavy, C., Andrade, J.S., Rajagopal, K., “Consistent Evaluation of Effective Diffusion and Reaction in Pore Networks”, *Chem. Eng. Sci.*, **47**, 2751-2756 (1992).

-
- Mehta, D., Hawley M.C., “Wall Effects in packed Columns”, *I&EC Proc. Des. Dev.*, **8**, 280-282 (1991).
 - Mei, C.C., Auriault, J.L., “The Effect of Weak Inertia on Flow through a Porous Medium”, *J. Fluid Mech.*, **222**, 647-663 (1991).
 - Melli, T.R., De Santos, J.M., Kolb, W.B., Scriven, L.E., “Cocurrent Downflow in networks of Passages. Microscale roots of macroscale flow regimes”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **29**, 2367-2379 (1990).
 - Melli, T.R., Scriven, L.E., “Theory of Two Phase Cocurrent Downflow in Networks of Passages”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **30**, 951-969 (1991).
 - Meyers, J.J., Liapis, A.I., “Network Modeling of the Intraparticle Convection and Diffusion of Molecules in Porous Particles Packed in a Chromatographic Column”, *J. Chromatogr. A*, **827**, 197-213 (1998).
 - Meyers, J.J., Liapis, A.I., “Network Modeling of the Convective Flow and Diffusion of Molecules Adsorbing in Monoliths and in Porous Particles Packed in a Chromatographic Column”, *J. Chromatogr. A*, **852**, 3-23 (1999).
 - Meyers, J.J., Crosser, O.K., Liapis, A.I., “Pore Network Modelling of Affinity Chromatography: Determination of the Dynamic Profiles of the Pore Diffusivity of β -Galactosidase onto anti- of β -Galactosidase varies with time”, *J. Biochem. Biophys. Methods*, **49**, 123-139 (2001).
 - Meyers, J.J., Crosser, O.K., “Pore Network Modeling: Determination of the Dynamic Profiles of the Pore Diffusivity and its Effect on Column Performance as the Loading of the Solute in the Adsorbed Phase Varies with Time.”, *J. Chromatogr. A*, **908**, 35-47 (2001a).
 - Meyers, J.J., Nahar, S., Ludlow, D.K., Liapis, A.I., “Determination of the Pore Connectivity and Pore Size Distribution and Pore Spatial Distribution of Porous Chromatographic Particles from Nitrogen Sorption Measurements and Pore Network Modelling Theory”, *J. Chromatogr. A*, **907**, 57-71 (2001b).
 - Mickley, H.S., Smith, K.A., Korchak, E.I., “Fluid Flow in Packed Beds”, *Chem. Eng. Sci.*, **20**, 237-246 (1965).
 - Molerus, O., “A Coherent Representation of Pressure Drop in Fixed Beds and of Bed Expansion for Particulate Fluidized Beds”, *Chem. Eng. Sci.*, **35**, 1331-1340 (1980).

- Molerus, O., Schweinzer, J., “Resistance of Particles Beds at Reynolds Numbers up to $Re=10^4$ ”, *Chem. Eng. Sci.*, **44**, 1071-1079 (1989).
- Moreno, L., Neretnieks, I., “Fluid Flow and Solute Transport in a Network of Channels”, *J. Contaminant Hydrology*, **14**, 163-192 (1993).
- Moreno, L., Tsang, C-F., “Flow Channeling in Strongly Heterogeneous Porous Media: A Numerical Study”, *Water Resources Research*, **30**, 1421-1430 (1994).
- Montillet, A., Comiti, J., Legrand, J., “Axial dispersion in liquid flow through packed, reticulated metallic foams and fixed beds of different structures”, *Chem. Eng. J.*, **52**, 63-71 (1993).
- Muhammad, O.H.J., Kam, E.K.T., “Analysis of Coke Laydown in FCC Catalyst through Structured Catalyst Modelling and Experimentation”, *Catalysis Today*, **38**, 85-95 (1997).
- Mukhopadhyay, S., Cushman, J.H., “Monte Carlo Simulation of Contaminant Transport: I: Morphological Disorder in Fracture Connectivity”, *Transport Porous Media*, **31**, 183-211 (1998).
- Nandakumar, K., Shu, Y., Chuang, K.T., “Predicting Geometrical Properties of Random Packed Beds from Computer Simulation”, *AIChE J.*, **45**, 2286-2297 (1999).
- Nauman, E.B, Buffham, B.A., *Mixing in Continuous Flow Systems*, John Wiley & Sons, 1983.
- Neira, M.A., Payatakes, A.C., “Collocation Solution of Creeping Newtonian Flow Through Periodically Constricted Tubes with Piecewise Continuous Wall Profile”, *AIChE J.*, **24**, 43-54 (1978).
- Neira, M.A., Payatakes, A.C., “Collocation Solution of Creeping Newtonian Flow Through Sinusoidal Tubes”, *AIChE J.*, **25**, 725 (1979).
- Nelson, P.W., Perelson, A.S., “Mathematical Analysis of Delay Differential Equation Models of HIV-1 Infection”, *Mathematical Biosciences*, **179**, 73-94 (2002).
- Ng, K.M., Payatakes, A.C., “Stochastic Simulation of the Motion, Breakup and Stranding of Oil Ganglia in Water-Wet Granular Porous Media During Immiscible Displacement”, *AIChE J.*, **26**, 419-429 (1980).
- Ng, K.M., Payatakes, A.C., “Critical Evaluation of the Flow Rate-Pressure Drop Relation Assumed in Permeability Models”, *AIChE J.*, **31**, 1569-1571 (1985).

-
- Nguyen, C., Do, D. D., “Simple Optimization Approach for the Characterization of Pore Size Distribution”, *Langmuir*, **16**, 1319-1322 (2000).
 - Nicholson, D., Petropoulos, J.H., “Capillary Models for Porous Media. I - Two-Phase Flow in a Serial Model. ”, *J. Phys. D*, **1**, 1379-1385 (1968).
 - Nicholson, D., Petropoulos, J.H., “Capillary Models for Porous Media. III- Two-Phase Flow in a Three-Dimensional Network with Gaussian Radius Distribution”, *J. Phys. D*, **4**, 181-189 (1971).
 - Nicholson, D., Petropoulos, J.H., “Capillary Models for Porous Media. IV - Flow Properties of Parallel and Serial Capillary Models with Various Radius Distributions”, *J. Phys. D*, **6**, 1737-1744 (1973).
 - Nicholson, D., Petrou, J.K., Petropoulos, J.H., “Relation between Macroscopic Conductance and Structural Parameters of Stochastic Networks with Application to Fluid Transport in Porous Materials”, *Chem. Eng. Sci.*, **43**, 1385-1393 (1988).
 - Nigam, K.D.P., Saxena, A.K., “Residence Time Distribution in Straight and Curved Tubes”, *Encyclopediae Fluid Mech.*, **1**, 675-762 (1986).
 - Niven, A.A., “Physical Insight into the Ergun and Wen&Yu Equations for Fluid Flow in Packed and Fluidized Beds”, *Chem. Eng. Sci.*, **57**, 527-534 (2002).
 - Nolan, G.T., Kavanagh, P.E., “The Size Distribution of Interstices in Random Packings of Spheres”, *Powder Technol.*, **78**, 231-238 (1994).
 - Nolan, G.T., Kavanagh, P.E., “Random Packing of Nonspherical Particles”, *Powder Technol.*, **84**, 199-205 (1995a).
 - Nolan, G.T., Kavanagh, P.E., “Octahedral Configurations in Random Close Packing”, *Powder Technol.*, **83**, 253-258 (1995b).
 - Novakowski, K., Bogan, J.D., “A Semi-Analytical Model for the Simulation of Solute Transport in a Network of Fractures Having Random Orientations”, *Int. J. Numer. Anal. Methods Geomechanics*, **23**, 317-333 (1999).
 - Nunge, R.J., Gill, W.N., “Mechanisms Affecting Dispersion and Miscible Displacement”, *Ind. Eng. Chem.*, **61**, 33-49 (1969).
 - Oliveros, G., Smith, J.M., “Dynamic Studies of Dispersion and Channeling in Fixed Beds”, *AIChE J.*, **28**, 751-759 (1982).

- Paine, M.A., Carbonell, R.G., Whitaker, S., “Dispersion in Pulsed Systems. I: Heterogeneous Reaction and Reversible Adsorption in Capillary Tubes”, *Chem. Eng. Sci.*, **38**(11), 1781-1793 (1983).
- Pal, D., “Effect of Chemical Reaction on the Dispersion of a Solute in a Porous Medium”, *Appl. Math. Modelling*, **23**, 557-566 (1999).
- Palm, W.J., *Control Systems Engineering*, John Wiley & Sons, 1983.
- Pang, L., Goltz, M., Close, M., “Application of the Method of Temporal Moments to Interpret Solute Transport with Sorption and Degradation”, *J. Contaminant Hydrology*, **60**, 123-134 (2003).
- Panigrahi, M.R., Murty, J.S., “A Generalized Spherical Multi-Particle Model for Particulate Systems: Fixed and Fluidized Beds”, *Chem. Eng. Sci.*, **46**, 1863-1868 (1991).
- Paraskeva, C.A., Burganos, V.N., Payatakes, A.C., “Three-Dimensional Trajectory Analysis of Particle Deposition in Constricted Tubes”, *Chem. Eng. Commun.*, **108**, 23-48 (1991).
- Patzek, T.W., Silint, D.B., “Shape Factor and Hydraulic Conductance in Noncircular Capillaries. I: One-Phase Creeping Flow”, *J. Colloid Interfac. Sci.*, **236**, 295-304 (2001).
- Paul, C.A.H., Baker, C.T.H., “Explicit Runge-Kutta Methods for the Numerical Solution of Singular Delay Differential Equations”, Numerical Analysis Report No. 212, Manchester Centre for Computational Mathematics, University of Manchester, 1992.
- Paul, C.A.H., “Designing Efficient Software for Solving Delay Differential Equations”, *J. Computational Applied Mathematics*, **125**, 287-295 (2000).
- Payatakes, A.C., Tien, C., Turian, R.M., “A New Model for Granular Porous Media. Part I: Formulation”, *AIChE J.*, **19**, 58-67 (1973a).
- 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 J.*, **19**, 67-76 (1973b).
- Payatakes, A.C., Tien, C., Turian, R.M., “Trajectory Calculation of Particle Deposition in Deep Bed Filtration”, *AIChE J.*, **20**, 889-905 (1974).
- Payatakes, A.C., Neira, M.A., “Model of the Constricted Unit Cell Type for Isotropic Granular Porous Media”, *AIChE J.*, **23**, 922-930 (1977).

-
- Payatakes, A.C., Ng, K.M., Flumerfelt, R.W., “Oil Ganglion Dynamics during Immiscible Displacement: Model Formulation”, *AIChE J.*, **26**, 430-442 (1980).
 - Payatakes, A.C., Dias, M.M., “Immiscible Microdisplacement and Ganglion Dynamics in Porous Media”, *Rev. Chem. Engng.*, **2**, 85-174 (1984).
 - Pendse, H., Chiang, H., Tien, C., “Analysis of Transport Processes with Granular Media using the Constricted Tube Model”, *Chem. Eng. Sci.*, **38**, 1137-1150 (1983).
 - Perkins, T.K., Johnston, O.C., “A Review of Diffusion and Dispersion in Porous Media”, *Society Petroleum Engineers J.*, 70-84, 1963.
 - Petersen, E.E., “Diffusion in a Pore of Varying Cross Section”, *AIChE J.*, **4**, 343-345 (1958).
 - Petropoulos, J. H., Petrou, J. K., Kanellopoulos, N. K., “Explicit Relation Between Relative Permeability and Structural Parameters in Stochastic Pore Networks”, *Chem. Eng. Sci.*, **44**, 2967-2977 (1989).
 - Pietsch, W., “Sucessfully Use Agglomeration for Size Enlargement”, *Chem. Eng. Prog.*, 29-45 (April 1996).
 - Pilotti, M., “Generation of Realistic Porous Media by Grains Sedimentation”, *Transport Porous Media*, **33**, 257-278 (1998).
 - Plourde, F., Prat, M., “Pore Network Simulations of Drying of Capillary Porous Media”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **46**, 1293-1307 (2003).
 - Pozrikidis, C., “Creeping Flow in Two-Dimensional Channels”, *J. Fluid Mech.*, **180**, 495-514 (1987).
 - Punčochář, M., Drahoš, J., Čermák, J., “The Limits of Applicability of Pressure Drop Correlations”, *Chem. Eng. Sci.*, **45**, 2994-2998 (1990).
 - Punčochář, M., Drahoš, J., “Limits of Applicability of Capillary Model for Pressure Drop Correlation”, *Chem. Eng. Sci.*, **55**, 3951-3954 (2000).
 - Quiblier, J.A., “A New Three-Dimensional Modelling Technique for Studying Porous Media”, *J. Colloid Interface Sci.*, **98**, 84-102 (1984).
 - Quintard, M., Whitaker, S., “Transport in Ordered and Disordered Porous Media: Volume-Averaged Equations, Closure Problems and Comparison with Experiment”, *Chem. Eng. Sci.*, **48**, 2537-2564 (1993).

- Ramirez, J.A., Puebla, H., “Control of a Nonlinear System with Time-Delayed Dynamics”, *Physics Letters A*, **262**, 166-173 (1999).
- Ramirez-Cuesta, A.J., Cordero, S., Rojas, F., Faccio, R.J, Riccardo, J.L., “On Modeling, Simulation and Statistical Properties of Realistic Three Dimensional Porous Networks”, *J. Porous Materials*, **8**, 61-76 (2001).
- Rasmusson, A., Neretnieks, I., “Exact Solution of a Model for Diffusion in Particles and Longitudinal Dispersion in Packed Beds”, *AIChE J.*, **26**, 686-690 (1980).
- Rege, S.D., Fogler, H.S., “Network Model for Straining Dominated Particle Entrapment in Porous Media”, *Chem. Eng. Sci.*, **42**, 1553-1564 (1987).
- Rieckmann, C., Keil, F.J., “Multicomponent Diffusion and Reaction in Three-Dimensional Networks: General Kinetics”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 3275-3281 (1997).
- Rieckmann, C., Keil, F.J., “Simulation and Experiment of Multicomponent Diffusion and Reaction in Three-Dimensional Networks”, *Chem. Eng. Sci.*, **54**, 3485-3493 (1999).
- Rigby, S.P., Gladden, L.F., “NMR and Fractal Modelling Studies of Transport in Porous Media”, *Chem. Eng. Sci.*, **51**, 2263-2272 (1996).
- Rigby, S.P., “A Hierarchical Structural Model for the Interpretation of Mercury Porosimetry and Nitrogen Sorption”, *J. Colloid Interfac. Sci.*, **224**, 382-396 (2000).
- Rigby, S.P., Daut, S., “A Statistical Model for the Heterogeneous Structure of Porous Catalyst Pellets”, *Advances Colloid Interfac. Sci.*, **98**, 87-119 (2002).
- Rigby, S.P., Fletcher, R.S., “Interfacing Mercury Porosimetry with Nitrogen Sorption”, *Part. Part. Syst. Charact.*, **21**, 138-148 (2004a).
- Rigby, S.P., Fletcher, R.S., Riley, S.N., “Characterisation of Porous Solids Using Integrated Nitrogen Sorption and Mercury Porosimetry”, **59**, 41-51 (2004b).
- Rigby, S.P., Watt-Smith, M.J., R.S., “Simultaneous Determination of the Pore-Length Distribution and Pore Connectivity for Porous Catalyst Supports using Integrated Nitrogen Sorption and Mercury Porosimetry”, *J. Catalysis*, **227**, 68-76 (2004c).
- Rodier, E., Dodds, J.A., Leclerc, D., Clément, G., “Changes in Fluid Residence Time Distribution during Deep-Bed Filtration”, *Chem. Eng. J.*, **68**, 131-138 (1997).
- Rose, W., “Myths about Later-Day Extensions of Darcy’s Law”, *J. Petrol. Sci. Engng.*, **26**, 187-198 (2000).

-
- Rosencrans, S., “Taylor Dispersion in Curved Channels”, *SIAM J. Appl. Math.*, **57**, 1216-1241 (1997).
 - Rouault, Y., Assouline, S., “A Probabilistic Approach Towards Modeling the Relationships Between Particle and Pore Size Distributions: The Multicomponent Packed Sphere Case”, *Powder Technol.*, **96**, 33-41 (1998).
 - Roux, S., Mitescu, C., Charlaix, E., Baudet, C., “Transfer Matrix Algorithm for Convection-Biased Diffusion”, *J. Phys. A*, **19**, L687-L692 (1986).
 - Roux, S., Plouraboué, F., Hulin, J.P., “Tracer Dispersion in Rough Open Cracks”, *Transport Porous Media*, **32**, 97-116 (1998).
 - Rumpf, C.H., Gupte, A.R., “Einflüsse der Porosität und Korngrößenverteilung im Widerstandsgesetz der Porenströmung”, *Chemie Ing. Techn.*, **43**, 367-375 (1971).
 - Russell, B.P., LeVan, M.D., “Nonlinear Adsorption and Hydrodynamic Dispersion in Self-Similar Networks”, *Chem. Eng. Sci.*, **52**, 1501-1510 (1997).
 - Ruth, D.W., Ma, H., “Numerical Analysis of Viscous, Incompressible Flow in a Diverging-Converging RUC”, *Transport Porous Media*, **13**, 167-177 (1993).
 - Saeger, R.B., Scriven, L.E., Davis, H.T., “Transport Processes in Periodic Porous Media”, *J. Fluid Mech.*, **299**, 1-15 (1995).
 - Sáez, A.E., Carbonnel, R.G., Levec, J., “The Hydrodynamics of Trickling Flow in Packed Beds. Part I: Conduit models”, *AIChE J.*, **32**, 353-368 (1986).
 - Saffman, P.G., “A Theory of Dispersion in a Porous Medium”, *J. Fluid Mech.*, **6**, 321-349 (1959a).
 - Saffman, P.G., “Dispersion in Flow through a Network of Cappilaries”, *Chem. Eng. Sci.*, **11**, 125-129 (1959b).
 - Saffman, P.G., “Dispersion due to Molecular Diffusion and Macroscopic Mixing Through a Network of Cappilaries”, *J. Fluid Mech.*, **12**, 194-208 (1960).
 - Sahimi, M., Davis, H.T., Scriven, L.E., “Dispersion in Disordered Porous Media”, *Chem. Eng. Commun.*, **23**, 329-341 (1983).
 - Sahimi, M., Hughes, B.D., Scriven, L.E., Davis, H.T., “Dispersion in Flow through Porous Media - I: One Phase Flow”, *Chem. Eng. Sci.*, **41**, 2103-2122 (1986).

- Sahimi, M., Imdakm, A.O., “The Effect of Morphological Disorder on Hydrodynamic Dispersion in Flow through Porous Media”, *J. Phys. A*, **21**, 3833-3870 (1988).
- Sahimi, M., Gavalas, G.R., Tsois, T.T., “Statistical and Continuum Models for Fluid-Solid Reactions in Porous Media”, *Chem. Eng. Sci.*, **45**, 1443-1502 (1990).
- Sahimi, M., “Flow Phenomena in Rocks: From Continuum Models to Fractals, Cellular Automata and Simulated Annealing”, *Rev. Mod. Phys.*, **65**, 1393-1534 (1993a).
- Sahimi, M., “Nonlinear Transport Process in Disordered Media”, *AIChE. J.*, **39**, 369-386 (1993b).
- Sahimi, M., *Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock. From Classical Methods to Modern Approaches*, Springer Verlag, 1995.
- Salmi, T., Romanainen, J.J., “A Novel Exit Boundary Condition for the Axial Dispersion Model”, *Chem. Eng. Process.*, **34**, 359-366 (1995).
- Shampine, L.F., Thompson, S., “Solving DDEs in Matlab”, *Applied Numerical Mathematics*, **37**, 441-458 (2001).
- Sangani, A.S., Acrivos, A., “Slow Flow Past Periodic Arrays of Cylinders with Application to Heat Transfer”, *Int. J. Multiphase Flow*, **8**, 193-206 (1982a).
- Sangani, A.S., Acrivos, A., “Slow Flow through A Periodic Array of Spheres”, *Int. J. Multiphase Flow*, **8**, 343-360 (1982b).
- Sangani, A.S., Yao, C., “Transport Processes in Random Arrays of Cylinders. II: Viscous Flow”, *Phys. Fluids*, **8**, 2435-2444 (1988).
- Sankasubramian, S., Gill W.N., “Dispersion from a Prescribed Concentration Distribution in Time Variable Flow”, *Proc. Roy. Soc. London*, **329**, 479-492 (1972).
- Sankasubramian, S., Gill W.N., “Unsteady Convective Diffusion with Interphase Mass Transfer”, *Proc. Roy. Soc. London*, **333**, 115-132 (1973).
- Santos, J.M., Melli, Tomás R., Scriven, L.E., “Mechanics of Gas-Liquid Flow in Packed-Bed Contactors”, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **23**, 233-260 (1991).
- Sardin, M., Schweich, D., Leij, F.J., Van Genuchten, M.T., “Modeling the Nonequilibrium Transport of Linearly Interacting Solutes in Porous Media”, *Water Resources Research*, **27**, 2287-2307 (1991).

-
- Satik, C., Yortsos, Y.C., “A Pore-Network Study of Bubble Growth in Porous Media Driven by Heat Transfer”, *J. HeatTransfer Trans. ASME*, **118**, 455-462 (1996).
 - Scheidegger, A.E., *The Physics of Flow through Porous Media*, University of Toronto Press, 3rd Edition, 1960.
 - Schnitzlein, K., Hofmann, H., “An Alternative Model for Catalytic Fixed Bed Reactors”, *Chem. Eng. Sci.*, **42**, 2569-2577 (1987).
 - Sederman, A.J., Johns, M.L., Bramley, A.S., Alexander, P., Gladden, L.F., “Magnetic Resonance Imaging of Liquid Flow and Pore Structure Within Packed Beds”, *Chem. Eng. Sci.*, **52**, 2239-2250 (1997).
 - Sederman, A.J., Johns, M.L., Alexander, P., Gladden, L.F., “Structure-Flow Correlations in Packed Beds”, *Chem. Eng. Sci.*, **53**, 2117-2128 (1998).
 - Seguin, D., Montillet, A., Comiti, J., “Experimental Characterization of Flow in Various Porous Media. I: Limit of Laminar Flow Regime”, *Chem. Eng. Sci.*, **53**, 3751-3761 (1998a).
 - Seguin, D., Montillet, A., Comiti, J., Huet, F., “Experimental Characterization of Flow in Various Porous Media. II: Transition to Turbulent Regime”, *Chem. Eng. Sci.*, **53**, 3897-3909 (1998b).
 - Shah, C.B., Yortsos, Y.C., “Aspects of Flow of Power-Law Fluids in Porous Media”, *AIChE J.*, **41**, 1099-1112 (1995).
 - Shames, I., *Mechanics of Fluids*, Mac Graw Hill, 2nd Edition, 1982.
 - Shapiro, M., Brenner, H., “Taylor Dispersion of Chemically Reactive Species: Irreversible First-Order Reactions in Bulk and on Boundaries”, *Chem. Eng. Sci.*, **41**, 1417-1433 (1986).
 - Shapiro, M., Brenner, H., “Chemically Reactive Generalized Taylor Dispersion Phenomena”, *AIChE J.*, **33**, 1155-1167 (1987).
 - Shapiro, M., Brenner, H., “Dispersion of a Chemically Reactive Solute in a Spatially Periodic Model of a Porous Medium”, *Chem. Eng. Sci.*, **43**, 551-571 (1988).
 - Sharma, M.M., Yortsos, Y.C., “Transport of Particulate Suspensions in Porous Media: Model Formulation”, *AIChE J.*, **33**, 1636-1643 (1987a).

- Sharma, M.M., Yortsos, Y.C., “A Network Model for Deep Filtration Process”, *AIChE J.*, **33**, 1644-1653 (1987b).
- Sharratt, P.N., Mann, R., “Some Observations on the Variation of Tortuosity with Thiele Modulus and Pore Size Distribution”, *Chem. Eng. Sci.*, **42**, 1565-1576 (1987).
- Schwatz, B.C.E., Devinny, J.S., Tsotsis, T.T., “A biofilter Network Model – Importance of the Pore Structure and Other Large-Scale Heterogeneities”, *Chem. Eng. Sci.*, **56**, 475-483 (2001).
- Segura, L.A., Toledo, P.G., “Pore-Level Modeling of Isothermal Drying of Pore Networks. Effects of Gravity and Pore Shape and Size Distributions on Saturation and Transport Parameters”, *Chem. Eng. J.*, **111**, 237-252 (2005).
- Shearer, J.L., Murphy, A.T., Richardson, H.H., *Introduction to System Dynamics*, Addison-Wesley Publishing Company, 1967.
- Sheffield, R.E., Metzner, A.B., “Flows of Nonlinear Fluids through Porous Media”, *AIChE J.*, **22**, 736-744 (1976).
- Sherwood, J.D., “A Model for Static Filtration of Emulsions and Foams”, *Chem. Eng. Sci.*, **48**, 3355-3361 (1993).
- Sim, Y., Chrysikopoulos, C.V., “Analytical Dispersion for Solute Transport in Saturated Porous Media with Semi-Infinite or Finite Thickness”, *Advances Water Research*, **22**, 507-519 (1999).
- Skjetne, E., Hansen, A., Gudmundsson, J.S., “High Velocity in a Rough Fracture”, *J. Fluid Mech.*, **383**, 1-28 (1999).
- Song, Y-Q., “Determining Pore Sizes Using an Internal Magnetic Field”, *J. Magnetic Resonance*, **143**, 397-401 (2000).
- Sorbie, K.S., Clifford, P.J., Jones, E.R.W., “The Rheology of Pseudoplastic Fluids in Porous Media using Network Modelling”, *J. Colloid Interfac. Sci.*, **130**, 508-534 (1989).
- Sorbie, K.S., Clifford, P.J., “The Inclusion of Molecular Diffusion Effects in The Network Modelling of Hydrodynamic Dispersion in Porous Media”, *Chem. Eng. Sci.*, **46**, 2525-2542 (1991).
- Spedding, M., Spencer, K., “Simulation of Packing Density and Liquid Flow in Fixed Beds”, *Comp. Chem. Engng.*, **19**, 43-73 (1995).

-
- Srivastava, R., Sharma, P.K., Brusseau. M.L., “Spatial Moments for Reactive Transport in Heterogeneous Porous Media”, *J. Hydrologic Eng., Proc. ASCE*, **7**, 336-341 (2002).
 - Srivastava, R., Sharma, P.K., Brusseau. M.L., “Reactive Transport in Macroscopically Homogeneous Porous Media: Analytical Solutions for the Temporal Moments”, *J. Contaminant Hydrology*, **69**, 27-43 (2004).
 - Stark, J., Manga, M., “The Motion of Long Bubbles in a Network of Tubes”, *Transport Porous Media*, **40**, 201-218 (2000).
 - Stewart, T., Kim, D.S., “Modeling of Biomass-Plug Development and Propagation in Porous Media”, *Biochemical Eng. J.*, **17**, 107-119 (2004).
 - Stone, H.A., Brenner, H., “Dispersion in Flows with Streamwise Variations of Mean Velocity: Radial Flow”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **38**, 851-854 (1999).
 - Subramanian, R.S., Gill, W.N., Marba, R.A., “Dispersion Models of Unsteady Tubular Reactors”, *Can. J. Chem. Eng.*, **52**, 563-568 (1974).
 - Suchomel, B.J., Chen, B.M., Allen, M.B., “Network Model of Flow, Transport and Biofilm Effects in Porous Media”, *Transport Porous Media*, **30**, 1-23 (1998a).
 - Suchomel, B.J., Chen, B.M., Allen, M.B., “Macroscale Properties of Porous Media From a Network Model of Biofilm Processes”, *Transport Porous Media*, **31**, 39-66 (1998b).
 - Sugita, F., Gillham, R.W., Mase, C., “Pore Scale Variation in Retardation Factor as a Cause of Nonideal Reactive Breakthrough Curves. 2: Pore Network Analysis”, *Water Resources Research*, **31**, 113-119 (1995).
 - Sun, Y., Petersen, J.N., Clement, T.P., “Analytical Solutions for Multiple Species Reactive Transport in Multiple Dimensions”, *J. Contaminant Hydrol.*, **35**, 429-440 (1999a).
 - Sun, Y., Petersen, J.N., Clement, T.P., Skeen, R.S. “Development of Analytical Solutions for Multispecies Transport with Serial and Parallel Reactions”, *Water Resources Research*, **35**, 185-190 (1999b).
 - Sundaresan, S., Amundson, N.R., Rutherford, A., “Observations on Fixed-Bed Dispersion Models: The Role of the Interstitial Fluid”, *AIChE J.*, **26**, 529-536 (1980).
 - Susskind, H., Becker, W., “Pressure Drop in Geometrical Ordered Packed Beds of Spheres”, *AIChE J.*, **13**, 1155 (1967).

- Takahashi, T., Korenaga, T., Shen, F., “A Numerical Solution for the Dispersion in Laminar Flow through a Circular Tube”, *Can. J. Chem. eng.*, **68**, 191-196 (1990).
- Tallmadge, J.A., “Packed Bed Pressure Drop. An Extension to Higher Reynolds Numbers”, *AIChE J.*, **16**, 1092-1093 (1970).
- Tassopoulos, M., Rosner, D.E., “Microstructural Descriptors Characterizing Granular Deposits”, *AIChE J.*, **38**, 15-25 (1992).
- Taylor, G.I., “Dispersion of Soluble Matter in Solvent Flowing Slowly through a Tube”, *Proc. Roy. Soc. London*, **219**, 186-203 (1953).
- Taylor, G.I., “The Dispersion of Matter in Turbulent Flow through a Pipe”, *Proc. Roy. Soc. London*, **223**, 446-468 (1954a).
- Taylor, G.I., “Conditions under Which Dispersion of a Solute in a Stream of Solvent can be Used to Measure Molecular Diffusion”, *Proc. Roy. Soc. London*, **223**, 473-477 (1954b).
- Thauvin, F., Mohanty, K.K., “Network Modeling of Non-Darcy Flow Through Porous Media”, *Transport Porous Media*, **31**, 19-37 (1998).
- Thies-Weesie, D., Philipse, A., “Liquid Permeation of Bidisperse Colloidal Hard-Sphere Packings and the Kozeny-Carman Scaling Relation”, *J. Colloid Interfac. Sci.*, **162**, 470-480 (1994).
- Thompson, K.E., Fogler, H.S., “Modelling Flow in Disordered Packed Beds from Pore-Scale Fluid Mechanics”, *AIChE J.*, **43**(6), 1377-1389 (1997).
- Tichacek, L.J., Barkelaw, C.H., Baron, T., “Axial Mixing in Pipes” *AIChE J.*, **3**, 439-442 (1957)
- Tilton, J.N., Payatakes, A.C., “Collocation Solution of Creeping Newtonian Flow Through Sinusoidal Tubes: a Correction”, *AIChE J.*, **30**, 1016-1021 (1984).
- Toledo, P.G., Davis, H.T., Scriven, L.E., “Transport Properties of Anisotropic Media - Effective Medium Theory”, *Chem. Eng. Sci.*, **47**, 391-405 (1992).
- Torelli, L., Scheidegger, A.E., “Three Dimensional Branching Type Models of Flow through Porous Media”, *J. Hydrol.*, **15**, 23-35 (1972).
- Trussel, R.R., Chang, M., “Review of Flow Through Porous Media as Applied to Head Loss in Water Filters”, *J. Environ. Engng.*, **125**, 998-1006 (1999).

-
- Tsakiroglou, C.D., Payatakes, A.C., “A New Simulator of Mercury Porosimetry for the Characterization of Porous Materials”, *J. Colloid Interfac. Sci.*, **137**, 315-339 (1990).
 - Tsakiroglou, C.D., Payatakes, A.D., “Characterization of the Pore Structure of Reservoir Rocks with the Aid of Serial Sectioning Analysis, Mercury Porosimetry and Network Simulation”, *Advances Water Resources*, **23**, 773-789 (2000).
 - Tsakiroglou, C.D., “A methodology for the Derivation of Non-Darcian Models for the flow of Generalized Newtonian Fluids in Porous Media”, *J. Non Newtonian Fluid Mech.*, **105**, 79-110 (2002).
 - Tseng, P.C., Besant, R.W., “Dispersion of a Solute in a Fully Developed Laminar Tube Flow”, *Proc. Roy. Soc. London*, **317**, 91-99 (1972).
 - Tsotsas, E., Schlunder, E.U., “On Axial Dispersion in Packed Beds with Fluid Flow”, *Chem. Eng. Process.*, **24**, 15-31 (1988).
 - Turner, G.A., “The Flow-Structure in Packed Beds”, *Chem. Eng. Sci.*, **7**, 156-165 (1958).
 - Van Brakel, J., “Pore Space Models for Transport Phenomena in Porous Media - Review and Evaluation with Emphasis on Capillary Transport”, *Powder Technol.*, **11**, 205-236 (1975).
 - Venkataraman, P., Rao, P.R.M., “Darcian, Transitional, and Turbulent Flow Through Porous Media”, *J. Hydraulic Eng. Trans. ASCE*, **124**, 840-846 (1998).
 - Venkatesan, M., Rajagoplan, R., "A Hyperboloidal Constricted Tube Model of Porous Media ", *AIChE J.*, **26**, 694-698 (1980).
 - Villiermaux, E., Schweich, D., “Hydrodynamic Dispersion on Self-Similar Structures: A Laplace Space Renormalization Group Approach”, *J. Physique II*, **2**, 1023-1043 (1992).
 - Vogel, H.J., Roth, K., “Quantitative Morphology and Network Representation of Pore Structure”, *Advances Water Research*, **24**, 233-242 (2000).
 - Vrentas, J.S., Vrentas, C.M., “Dispersion in Laminar Tube Flow at Low Peclet Numbers or Short Times”, *AIChE J.*, **34**, 1423-1430 (1988).
 - Vrentas, J.S., Vrentas, C.M., “Asymptotic Solutions for Laminar Dispersion in Circular Tubes”, *Chem. Eng. Sci.*, **55**, 849-855 (2000).

- 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", *J. Colloid Interfac. Sci.*, **112**, 24-41 (1986).
- Yiotis, A.G., Stubos, A.K., Boudouvis, A.G., Yortsos, Y.C., "A 2-D Pore Network Model of the Drying of Single-Component Liquids in Porous Media", *Advances Water Research*, **24**, 439-460 (2001).
- Yiotis, A.G., Stubos, A.K., Boudouvis, A.G., Tsimpanogianis, I.N., Yortsos, Y.C., "Pore-Network Modeling of Isothermal Drying in Porous Media", *Transport in Porous Media*, **58**, 63-86 (2005).
- Yu, A.B., Zou, R.P., Standish, N., "Modifying the Linear Packing Model for Predicting the Porosity of Nonspherical Particle Mixtures", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **35**, 3730-3741 (1996).
- Yu, D., Jackson, K., Harmon, T.C., "Dispersion and Diffusion in Porous Media Under Supercritical Conditions", *Chem Eng. Sci.*, **54**, 357-367 (1999).
- Yun, T., Smith, M.S., Guichon, G., "Theoretical Analysis of the Behaviour of a Centrally Injected Band in a Homogeneous Chromatographic Column", *J. Chromatogr. A*, **828**, 19-35 (1998).
- Wall, G.G., Brown, R.J.C., "The Determination of Pore-Size Distributions from Sorption Isotherms and Mercury Penetration in Interconnected Pores: The Application of Percolation Theory", *J. Colloid Interfac. Sci.*, **82**, 141-149 (1981).
- Wan, C., Ziegler, E.N., "Effect of Mixing on Yield in Isothermal Tubular Reactors", *Ing. Eng. Chem. Fundam.*, **12**, 55-63 (1973).
- Wang, J.C., Stewart, W.E., "Multicomponent Reactive Dispersion in Tubes: Collocation vs. Radial Averaging", *AIChE J.*, **35**, 490-499 (1989).
- Wang, G.T., Shingh, V.P., Chen, S., "Mixing Cell Method for Solving the Solute Transport Equation with Spatially Variable Coefficients", *Hydrogeological Processes*, **12**, 781-795 (1998).
- Wang, G.T., Li, B.Q., Chen, S., "A Semi-Analytical Method for Solving Equations Describing the Transport of Contaminants in Two-Dimensional Homogeneous Porous Media", *Mathematical Computer Modeling*, **30**, 63-74 (1999a).

-
- Wang, X., Thauvin, F., Mohanty, K.K., “Non-Darcy Flow Through Anisotropic Porous Media”, *Chem. Eng. Sci.*, **54**, 1859-1869 (1999b).
 - Ward, J.C., “Turbulent Flow in Porous Media”, *J. Hydr. Div. Proc. ASCE*, **5**, 1-12 (1964).
 - Wen, C.Y., Fan, L.T., *Models for Flow Systems and Chemical Reactors*, Marcel Dekker Inc. New York, 1975.
 - Weng, C.B., Cowie, P., Bernabé, Y., Main, I., “Relating Flow Channeling to Tracer Dispersion in Heterogenous Networks”, *Advances Water Resources*, **27**, 843-855 (2004).
 - Wentz, C.A., Thodos, G., “Pressure Drops in the Flow of Gases through Packed and Distended Beds of Spherical Particles”, *AIChE J.*, **9**, 81-84 (1963).
 - Westerterp, K.R., Dil'man, V.V., Kronberg, A.E., “Wave Model for Longitudinal Dispersion: Development of the Model”, *AIChE J.*, **41**, 2013-2028 (1995a).
 - Westerterp, K.R., Dil'man, V.V., Kronberg, A.E., Benneker, A.H., “Wave Model for Longitudinal Dispersion: Analysis and Applications”, *AIChE J.*, **41**, 2029-2039 (1995b).
 - Westerterp, K.R., Kronberg, A.E., Benneker, A.H., Dil'man, V.V., “Wave Concept in the Theory of Hydrodynamical Dispersion - A Maxwellian Type Approach”, *Trans. IChemE*, **74**, 944-952 (1996).
 - Whitaker, S., “The Equations of Motion in Porous Media”, *Chem. Eng. Sci.*, **21**, 291-300 (1966).
 - Whitaker, S., “Diffusion and Dispersion in Porous Media”, *AIChE J.*, **13**, 420-427 (1967).
 - Whitaker, S., “Advances in Theory of Fluid Motion in Porous Media”, *Ind. Eng. Chem.*, **61**, 14-28 (1969).
 - Whitaker, S., “The Transport Equations for Multiphase Systems”, *Chem. Eng. Sci.*, **28**, 139-147 (1973).
 - Whitaker, S., “Flow in Porous Media I: A Theoretical Derivation of Darcy's Law”, *Transport Porous Media*, **1**, 3-25 (1986).
 - Whitaker, S., “Volume Averaging of Transport Equations”, *Advances in Fluid Mechanics 13 - Fluid Transport in Porous Media*, J.P. Duplessis Ed., Computational Mechanics Publications, 1996.
 - White, F.M., *Fluid Mechanics*, Mac-Graw Hill, 3rd Edition, 1994.

- Wise, W., “A New Insighth on Pore Structure and Permeability”, *Water Resources Research*, **28**, 189-198 (1992).
- Wood, J., Gladden, L.F., “Modeling Diffusion and Recation Accompanied By Capillary Condensation Using Three-Dimensional Pore Networks. Part 1: Fickian Diffusion and Pseudo-First-Order Kinetics”, *Chem. Eng. Sci.*, **57**, 3033-3045 (2002a).
- Wood, J., Gladden, L.F., Keil, F.J., “Modeling Diffusion and Recation Accompanied By Capillary Condensation Using Three-Dimensional Pore Networks. Part 2: Dusty Gas Model and General Reaction Kinetics”, *Chem. Eng. Sci.*, **57**, 3047-3059 (2002b).
- Wyllie, M.R.J., Gregory, A.R., “Fluid Flow through Unconsolidated Porous Aggregates. Effect of Porosity and Particle Shape on Kozeny-Carman Constants”, *Ind. Eng. Chem.*, **47**, 1379-1380 (1955).
- Xu, M., Eckstein, Y., “Statistical Analysis of the Relationships between Dispersivity and Other Physical Properties of Porous Media”, *Hydrogeology J.*, **5**, 4-20 (1997).
- Zeiser, T., Lammers, P., Klemm, E., Li, Y.W., Bersdorf, J., Brenner, G., “CFD-Calculation of Flow, Dispersion and Reaction in a Catalyst Filled Tube by the Lattice Boltzmann Method”, *Chem Eng Sci.*, **56**, 1697-1704 (2001).
- Zhang, L., Seaton, N.A., “The Application of Continuum Equations to Diffusion and Reaction in Pore Networks”, *Chem. Eng. Sci.*, **49**, 41-50 (1994).
- Zhu, Y., Fox, P.J., Morris, J.P., “A Pore-Scale Numerical Model for Flow through Porous Media”, *Int. J. Num. Anal. Methods Geomechanics*, **23**, 881-904 (1999).
- Zick, A.A., Homsy, G.M., “Stokes Flow Through Periodic Arrays of Spheres”, *J. Fluid Mech.*, **115**, 13-25 (1982).
- Ziółkoskwa, I., Ziółkowski, D., “Fluid Flow Inside Packed Beds”, *Chem. Eng. Process.*, **23**, 137-164 (1988).

A. Apêndices do Capítulo 3

A.1 Introdução

Nesta secção são apresentados os apêndices associados ao Capítulo 3, sendo descrito de seguida os objectivos de cada um destes.

- Na Secção A.2 é descrito como os valores de D e d , e consequentemente K_D e K_d , são determinados com base na análise geométrica da estrutura dos leitos de enchimento regulares. Em particular, mostra-se: (i) porque razão apenas é possível obter dois valores de K_D ; (ii) porque se implementou na determinação dos valores de K_D a estratégia de igual valor de porosidade entre a célula e o leito de enchimento, em vez de se assumir para o valor de d_j o diâmetro da maior esfera que pode atravessar cada um dos leitos de enchimentos regulares sem modificar a sua estrutura.
- Na Secção A.3 é descrita a forma como o número total dos elementos da rede (câmaras, canais e calotes originadas pela entrada dos canais nas câmaras) são determinados em função das dimensões e características da rede. A influência das expressões nos valores dos parâmetros geométricos da rede, em particular o valor da espessura equivalente da rede, é discutida. Expressões para a determinação do número de coordenação médio da rede, C , são também deduzidas e analisadas.

- Na Secção A.4 são apresentadas as funções densidade de probabilidade usadas neste trabalho no procedimento de remoção de câmaras e/ou canais ou para descrever os diâmetros das câmaras e dos canais da rede. São consideradas as funções densidade de probabilidade uniforme, para a remoção de câmaras e canais, Normal e ULLN, estas duas para as distribuições das dimensões características dos elementos da rede. Apenas esta última é analisada em detalhe, devido ao facto de existirem na literatura excelentes descrições da distribuição Normal. A implementação destas no gerador da rede também é descrita em detalhe.
- Na Secção A.5 são caracterizadas as calotes esféricas originadas pela entrada de um canal numa câmara da rede. São determinadas as expressões para h_{ij} , comprimento da calote originada pela entrada do canal na câmara, e para o volume das calotes, em função dos diâmetros da câmara e do canal associados entre si.
- Na Secção A.6 são deduzidas as expressões usadas para a verificação dos critérios de não intersecção. É descrita a estratégia que serviu de base à sua determinação, sendo esta aplicada a cada um dos critérios.

A.2 Determinação dos Valores Médios das Distribuições de Tamanhos

A.2.1 Introdução

Nesta secção é descrita a forma como são deduzidas as expressões de D e d para cada um dos quatro leitos de enchimento de esferas iguais com estruturas regulares, com base nas hipóteses consideradas no Capítulo 3 e na análise da estrutura geométrica de cada um deles. De notar que apesar de existirem seis leitos de enchimento regulares formados por esferas iguais, como estes só definem quatro valores de porosidade diferentes e como se assumiu no modelo geométrico que igual valor de porosidade implica o mesmo conjunto de valores médios das dimensões características dos elementos da rede, apenas é necessário considerar quatro casos diferentes.

A.2.2 Determinação do valor médio do diâmetro das câmaras

Na determinação de D , parte-se da análise da célula fundamental do leito regular cúbico, pois as células fundamentais dos restantes leitos de enchimento regulares podem ser obtidas

através do deslocamento relativo entre as diferentes camadas de esferas, como se pode observar nas Figuras 3.19 a 3.22.

A célula fundamental associada ao leito regular cúbico é apresentada na Figura A.1. Para simplificar a visualização da estrutura geométrica, as esferas não são representadas, estando o seu centro posicionado nos vértices da célula fundamental. Os ângulos internos da célula são todos iguais a 90° , encontrando-se um oitavo do volume de total de cada esfera no interior da célula. As arestas têm o mesmo comprimento igual ao diâmetro das partículas, D_p .

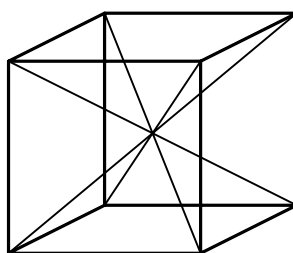


Figura A.1 Célula fundamental do leito regular cúbico.

O valor de D é determinado como a distância entre os vértices que se encontram em posições opostas entre duas faces paralelas. De acordo com a estrutura geométrica da célula fundamental, é possível definir mais três segmentos de recta com as mesmas características, tendo como ponto comum o centro da célula fundamental, onde se encontra também o centro da câmara. O posicionamento destas linhas e as alterações da estrutura da célula fundamental ao passar de um leito regular para outro vão servir de base à determinação de D nos restantes três leitos de enchimento regulares.

O valor de D pode ser determinado definindo um triângulo rectângulo cuja hipotenusa é um dos segmentos de recta representados na Figura A.1, como se observa na Figura A.2a. O comprimento do cateto vertical é igual a D_p , visto que corresponde ao comprimento de uma aresta da célula fundamental. O comprimento b do cateto horizontal é igual ao comprimento da diagonal de uma face da célula fundamental, como se pode observar na Figura A.2b em que se apresenta a vista de cima da célula fundamental apresentada na Figura A.1.

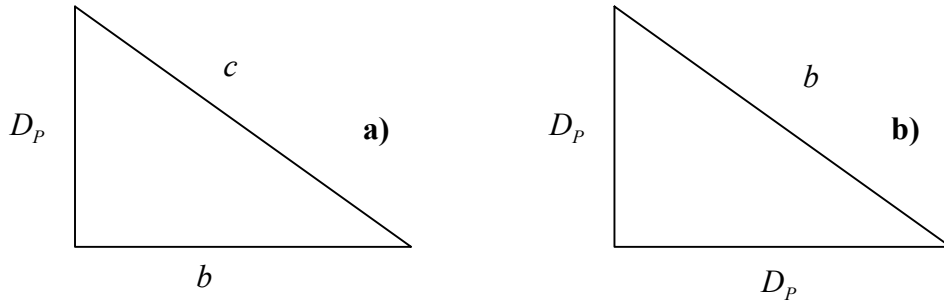


Figura A.2 Diagramas usados para a determinação de D : a) triângulo rectângulo que define a distância entre vértices opostos de faces paralelas da célula fundamental; b) vista de cima que permite definir o valor de b .

Aplicando o teorema de Pitágoras, obtém-se $b = \sqrt{2}D_p$ e $c = \sqrt{3}D_p$. O centro da esfera é definido no centro do segmento de recta de comprimento c . Como em cada um dos extremos se encontra uma esfera do enchimento, $D = c - D_p$.

Substituindo a expressão de c , verifica-se que D é função apenas de D_p ,

$$D = (\sqrt{3} - 1)D_p \quad (\text{A.1})$$

a que corresponde $K_D = \sqrt{3} - 1$. O facto de K_D depender apenas de D_p é válido também para os restantes leitos de enchimento regulares, como se vai ver de seguida.

A mesma estratégia considerada para o leito cúbico pode ser aplicada para o leito ortogonal. De acordo com a Figura 3.19, a célula fundamental do leito ortogonal pode ser obtida deslocando a linha de esferas que formam a parte de cima da célula fundamental $D_p/2$. Na estrutura do leito de enchimento regular, esta transformação é efectuada deslocando as camadas de esferas paralelas entre si de modo a que as esferas de cada um dos planos se encaixem umas nas outras. A figura geométrica é similar a uma romboedro, como se pode ver na Figura A.3, tendo os ângulos internos valores iguais a 60° , 120° ou 90° .

A determinação de D é efectuada de forma similar à do leito cúbico. Na Figura A.3 são apresentados os segmentos de recta considerados anteriormente, mas depois de se aplicar a transformação geométrica que converte o leito cúbico no leito ortogonal.

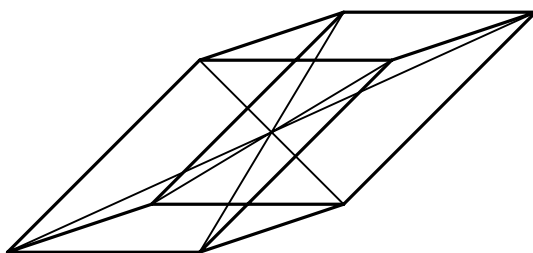


Figura A.3 Estrutura da célula fundamental do leito ORT que serve de base à determinação de D .

A aplicação da transformação modifica o comprimento dos segmentos, passando estes a ser iguais dois a dois. De acordo com a definição de diâmetro de câmara, D é obtido do comprimento do segmento de recta de menores dimensões, após se ter retirado a parte deste que se encontra associado às esferas que formam o leito de enchimento que se encontram no interior da célula fundamental. De acordo com a estrutura geométrica desta, o segmento de recta mais pequeno corresponde à diagonal de uma face quadrada, como se pode ver observar na Figura A.4. Como as quatro esferas que definem a face são tangentes entre si, o valor da diagonal é igual a $\sqrt{2}D_p$, o que permite concluir que

$$D = (\sqrt{2} - 1)D_p \quad (\text{A.2})$$

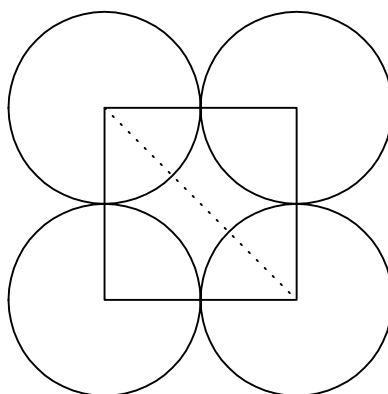


Figura A.4 Face quadrada definida por quatro esferas tangentes entre si.

Comparando com o resultado obtido com o valor previsto para o leito cúbico, Equação A.1, verifica-se que houve uma forte variação no valor deste parâmetro. Este facto pode ser justificado pelas alterações na estrutura da célula fundamental necessárias para a geração do leito ortogonal. Em particular, a altura da célula reduz-se, passando de D_p para $(\sqrt{3}/2)D_p$, o que limita as dimensões da maior esfera que é possível introduzir no interior da célula sem a modificar.

Por outro lado, o posicionamento relativo das faces quadradas da célula fundamental modifica-se, como se pode observar na Figura A.3. Apesar das faces quadradas que se encontram em lados opostos continuarem a ser paralelas, os ângulos internos deixam de ser iguais, sendo 60° ou 120° conforme a posição dos vértices. Por outro lado, a deslocação gera mais duas faces quadradas, como se pode observar na Figura A.3. Os segmentos de recta que servem de base à determinação de D representam as diagonais destas novas faces quadradas. Deste modo, D corresponderá à maior esfera que é possível encaixar no nas faces quadradas definidas interior da célula fundamental.

Os leitos de enchimento regulares tetragonal e romboédrico-piramidal possuem valores de porosidade ainda mais baixos que os casos já analisados. De acordo com as células fundamentais associadas a cada uma destes leitos de enchimento regulares, em cada uma destas é possível definir faces quadradas e triangulares, como se pode observar na Figura 3.18, estando a zona de espaço vazio de maiores dimensões associada sempre às faces quadradas. Deste modo, para os leitos regulares tetragonal e romboédrico-piramidal, D toma o valor dado pela Equação A.2.

Deste modo apenas é possível definir dois valores diferentes de D para os leitos de enchimento regulares. De modo a permitir ao modelo geométrico tomar em conta a influência da porosidade do leito, assumiu-se no cálculo de d a igualdade entre os valores de porosidade do meio e da célula fundamental.

A.2.3 Determinação do valor do diâmetro médio dos canais

Apesar de ser possível em cada um dos leitos de enchimento regulares definir uma rede de câmaras e canais com base na sua estrutura geométrica, as diferenças entre as estruturas destas e da rede de câmaras e canais impede a sua utilização directa. Deste modo, d é determinado de modo a verificar a igualdade entre os valores de porosidade do leito de enchimento e da sua célula fundamental, sendo possível então evitar os problemas originados pela obtenção de apenas dois valores para D .

A determinação de d é feita com base no volume dos vazios das células fundamentais e toma em conta os valores conhecidos de D . Por outro lado, como o volume de vazios associado aos canais da rede é função do comprimento médio dos canais oblíquos da rede, l_o , os dois valores devem ser determinados simultaneamente (ver Secção 3.5.4). Dependendo das hipóteses assumidas para este parâmetro, diferentes modelos foram considerados, tendo-se

concluído no Capítulo 3 que os modelos mais adequados assumem que a distância percorrida pelo fluido segundo o sentido principal de escoamento é igual na rede de elementos e no leito de enchimento regular (modelos T1, T2, T1S e T2S). Desta forma, a influência do parâmetro θ também é tomada em conta.

Os valores de d são determinados resolvendo as equações de balanço aos vazios da célula fundamental, sendo as equações e a estratégia de resolução descrita em detalhe na Secção 3.5.4. Com base na estrutura dos leitos de enchimento regulares, é possível estimar valores limite para d . Assumindo que o diâmetro médio das câmaras é aproximado pela maior esfera que pode percolar através de um leito de enchimento sem ser necessário modificar a sua estrutura (Nolan e Kavanagh, 1994), d pode ser estimado como sendo o diâmetro equivalente das restrições das faces definidas nas células fundamentais que não se encontrem associadas às câmaras. De acordo com esta hipótese, dois valores limites de d podem ser definidos, como se pode observar na Figura A.5.

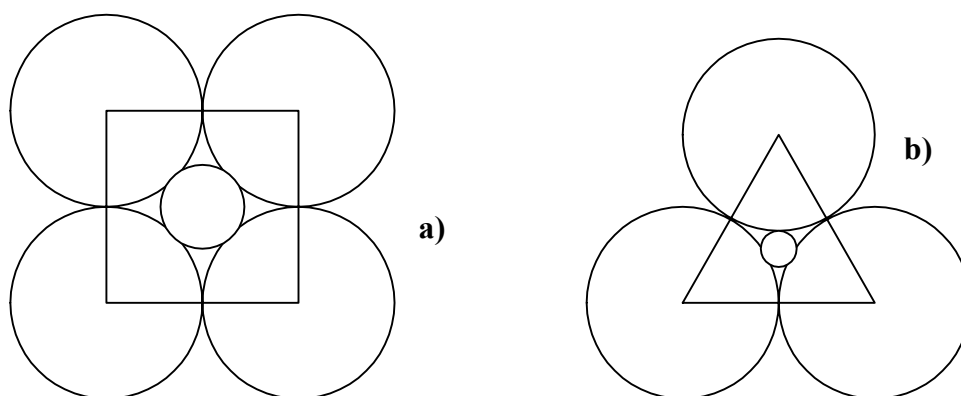


Figura A.5 Tipos de faces presentes nas células fundamentais dos leitos de enchimento regulares de esferas: a) face quadrada; b) face triangular.

O valor máximo esperado de d obtém-se para a face quadrada, como a que é apresentada na Figura A.5a. O valor deste parâmetro é obtido do subtraindo ao comprimento da diagonal da face quadrada o diâmetro da esfera obtendo-se $d = (\sqrt{2} - 1)D_p \approx 0.4142D_p$. Este valor corresponde ao leito cúbico, o único leito de enchimento regular em que as faces quadradas não se encontram associadas às câmaras da rede equivalente, mas sim aos canais.

O limite inferior corresponde à maior esfera que pode atravessar uma face triangular, como se pode ver na Figura A.5b. A análise geométrica deste caso é muito mais complexa do que o caso da face quadrada. Visto que as três esferas que formam a face se encontram nos seus vértices e possuem o mesmo diâmetro, ligando os centros das esferas obtém-se um triângulo

equilátero cujo eixo central do canal se encontra no centro. Para facilitar a determinação de d , foram traçadas as linhas que ligam o vértice ao centro da aresta na face oposta, como se pode ver na Figura A.6a. Esses segmentos de recta definem um triângulo rectângulo, de onde se pode obter d em função de D_p , como se mostra na Figura A.6b.

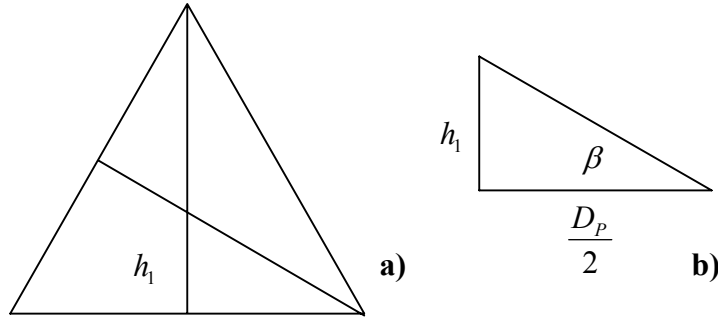


Figura A.6 Diagramas usados para determinar d associado a uma face triangular: a) posição do centro do canal; b) triângulo rectângulo definido para a determinação do valor de d .

O segmento de recta que define h_2 tem um dos extremos no vértice da face, correspondente ao centro de uma esfera do leito de enchimento, e o outro extremo no ponto de tangência entre as duas esferas no lado oposto do triângulo. O ponto de tangência encontra-se no ponto central da mesma aresta. Deste modo, o segmento bissecta o ângulo interno da face, sendo então $\beta = \pi/6$. O comprimento h_1 pode ser calculado a partir da expressão

$$\tan \beta = \frac{h_1}{D_p/2} \Rightarrow h_1 = \frac{\sqrt{3}}{6} D_p \quad (\text{A.3})$$

O valor de d é calculado relacionando a altura do triângulo equilátero h_1 , através da expressão, válida para o segmento de recta que define a altura do triângulo

$$\frac{\sqrt{3}}{2} D_p = h_1 + \frac{d}{2} + \frac{D_p}{2} \quad (\text{A.4})$$

Substituindo a expressão de h_1 na equação anterior, d é dado pela expressão

$$d = 2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} \right) D_p = \frac{2\sqrt{3}-3}{3} D_p \approx 0.1547 D_p \quad (\text{A.5})$$

Comparando os valores limites obtidos com os valores previstos pelos diferentes modelos, verifica-se que boa concordância entre estes. É possível então concluir que para os leitos regulares cúbico e romboédrico-piramidal, assumir que o diâmetro dos canais é o diâmetro da maior esfera que pode percolar através do leito de enchimento sem alterar a sua estrutura é uma hipótese válida.

No entanto, a aplicação da condição anterior na determinação de d resultaria na mesma situação observada na determinação dos valores de D , em que apenas é possível definir dois valores diferentes para toda a gama de valores de porosidade possível. Os valores obtidos também corresponderiam aos mesmos leitos de enchimento regulares. Assumindo que este comportamento era válido, o modelo proposto neste trabalho preveria o mesmo comportamento hidrodinâmico para leitos de enchimento regulares com valores de porosidade diferentes, contrário ao comportamento qualitativo observado experimentalmente.

Como o comportamento hidrodinâmico da rede é mais dependente da distribuição dos diâmetros dos canais do que das câmaras, assumiu-se que d é função de ε . O valor deste parâmetro é calculado de modo a assegurar igual valor da razão entre o volume de vazios e total do leito de enchimento ideal e rede equivalente. Como se conclui na Secção 3.6, o comportamento dos valores obtidos está de acordo com o comportamento qualitativo esperado.

A.3 Determinação do Número de Câmaras, Canais e Calotes

A.3.1 Introdução

Nesta secção são determinadas as expressões que permitem calcular o número de câmaras, N_{Cam} , canais, N_{Can} , e calotes esféricas, N_{Cal} , em função das características geométricas e das dimensões da rede. Assume-se em todas as expressões a determinar que não ocorre remoção de câmaras e/ou canais da rede. As expressões obtidas são usadas para determinar a influência das características estruturais da rede no comportamento qualitativo do valor da espessura equivalente da rede, parâmetro necessário para comparar as previsões do simulador hidrodinâmico e de transporte de massa com dados experimentais disponíveis na literatura.

A.3.2 Determinação do Número de Câmaras

Quando não ocorre remoção de câmaras e/ou canais da rede, a estrutura da rede é análoga a uma grelha regular, cujos nós são definidos pelos centros das câmaras. Assim

$$N_{Can} = N_x N_y \quad (A.6)$$

A.3.3 Determinação do Número Total de Canais

O número total de canais, N_{Can} , é função das condições impostas ao gerador, em particular do tipo de fronteiras e da existência ou não de canais horizontais. O valor de N_{Can} é igual à soma do número total de canais oblíquos, N_{Can}^O , e horizontais, N_{Can}^H .

Em relação ao tipo de fronteiras, duas situações distintas podem ser consideradas. Quando se impõem fronteiras periódicas, a distribuição de números de coordenação das câmaras da rede, C_i , é espacialmente uniforme e igual a C , o número de coordenação médio que depende da existência ou não de canais horizontais. No caso geral N_{Can} é dado por

$$N_{Can} = \frac{C}{2} N_x N_y + 2N_y \quad (A.7)$$

O termo $2N_y$ resulta da linha de canais no fundo da rede da rede. Aplicando a Equação A.7 para as redes de tipo 11 e 10, em que C é respectivamente igual a 6 e 4, são obtidas as seguintes expressões

$$N_{Can} = 3N_x N_y + 2N_y, \quad \text{Rede Tipo 11} \quad (A.8)$$

$$N_{Can} = 2N_x N_y + 2N_y, \quad \text{Rede Tipo 10} \quad (A.9)$$

A Equação A.7 não pode ser aplicada a rede sem fronteiras periódicas, pois nessa situação a distribuição de valores de C_i é espacialmente não uniforme. A contagem do número de canais deve ser efectuada linha a linha, tomando em conta as características particulares de cada uma das redes.

As linhas de canais oblíquos de redes tipo 01 e 00 possuem a mesma estrutura. Em cada uma destas, existem sempre $2N_y - 1$ canais. Apenas existem canais horizontais para redes do tipo

01, sendo possível definir $N_y - 1$ canais em cada linha da rede. Somando os dois termos, obtém-se as seguintes expressões

$$N_{Can} = (N_x + 1)(2N_y - 1) + N_x(N_y - 1), \quad \text{Rede Tipo 01} \quad (\text{A.10})$$

$$N_{Can} = (N_x + 1)(2N_y - 1), \quad \text{Rede Tipo 00} \quad (\text{A.11})$$

As expressões obtidas são válidas desde que não ocorra remoção de câmaras e/ou canais durante a geração da rede. Se esta condição não se verificar, a contagem do número total de canais é feita câmara a câmara, contabilizando-se apenas os canais com um diâmetro maior que zero.

O número de canais oblíquos, N_{Can}^O , depende apenas do tipo de fronteiras da rede, sendo o seu valor dado pelas Equações A.9 e A.11 para redes com e sem fronteiras periódicas respectivamente. O número de canais horizontais, N_{Can}^H depende apenas da existência ou não de canais horizontais na rede. Para redes sem canais horizontais, como é o caso de redes tipo 10 e 00, $N_{Can}^H = 0$. Para os restantes tipos de redes, o seu valor é obtido subtraindo as expressões obtidas para redes com o mesmo tipo de fronteiras mas com e sem canais horizontais. Logo, para redes com fronteiras periódicas deve-se subtrair a Equação A.9 na Equação A.8, e para redes sem fronteiras periódicas deve-se subtrair a Equação A.10 na Equação A.11, obtendo-se as seguintes expressões

$$N_{Can}^H = N_x N_y, \quad \text{Rede Tipo 11} \quad (\text{A.12})$$

$$N_{Can}^H = N_x(N_y - 1), \quad \text{Rede Tipo 01} \quad (\text{A.13})$$

A.3.4 Determinação do Número Total de Calotes

Na determinação do número de calotes, N_{Cal} , deve-se tomar em conta o posicionamento relativo dos canais e das câmaras no interior da rede. Com excepção dos canais oblíquos nas linhas de topo e fundo da rede e nos lados abertos da rede quando as fronteiras são periódicas, cada canal possui duas calotes associadas.

Quando não ocorre remoção de câmaras e canais, cada um dos quatro tipos de redes fundamentais deve ser analisado independentemente dos outros. De modo a simplificar a

contagem do número total de calotes, N_{Cal} , assume-se que este é a soma de três termos, correspondentes à linha de topo, N_{Cal}^{Topo} , às linhas no centro e fundo da rede, $N_{Cal}^{Centrais}$, e à linha de canais extra de saída da rede, N_{Cal}^{Fundo} , na forma

$$N_{Cal} = N_{Cal}^{Topo} + N_{Cal}^{Centro} + N_{Cal}^{Fundo} \quad (A.14)$$

Na situação em que pode ocorrer remoção de câmaras e/ou canais, a contagem do número de calotes é efectuado câmara a câmara, analisando-se os extremos de cada um dos canais associados a esta. A célula fundamental da rede, definida na Figura 3.3, é usada na determinação de N_{Cal} , pois simplifica a implementação do contador de número de calotes que se podem definir na rede, sendo analisados apenas o canais com diâmetro maior que zero.

A.3.4.1 Rede Tipo 11

O caso mais geral corresponde a uma rede com canais horizontais e fronteiras periódicas, sendo este então o caso que vai ser estudado mais em detalhe. Para as restantes redes a estratégia é idêntica sendo necessário efectuar apenas algumas modificações. A determinação de cada um dos termos de N_{Cal} é descrita de seguida.

- Linha de topo, $i=1$. Os canais oblíquos possuem apenas uma câmara associada, correspondendo deste modo a $2N_y$ calotes. Em relação aos canais horizontais, $N_y - 1$ possuem 2 calotes associadas e o canal no extremo da linha possui apenas uma calote associada, visto estar num dos lados livres da rede. Apesar do fluido que sai desse canal entrar na câmara no outro lado da rede, geometricamente estas não se encontram associadas, pelo que apenas é possível definir uma calote. Esta situação também ocorre nas restantes linhas de câmaras da rede. Somando o número total de calotes obtém-se $N_{Cal}^{Topo} = 4N_y - 1$.
- Linhas do centro e do fundo da rede, $i = 2, \dots, N_x$. A estrutura destas linhas é igual, podendo ser consideradas em conjunto. O número de canais oblíquos é igual a $2N_y$. Destes, $2N_y - 1$ possuem 2 calotes associadas e um (o que se encontra na fronteira da rede) apenas uma calote. O número de calotes associado aos canais horizontais é determinado da mesma forma que na linha do topo. Deste modo, para uma linha no centro

da rede o número total de calotes é $6N_y - 2$, obtendo-se então

$$N_{Cal}^{Centrais} = (N_x - 1)(6N_y - 2).$$

- Linha do fundo da rede, $i = N_x + 1$. Esta linha corresponde aos canais de saída do fluido da rede, possuindo $2N_y$ canais. Todos os canais possuem apenas uma câmara associada a estes, pelo que $N_{Cal}^{Fundo} = 2N_y$.

Assim, usando a Equação A.14, o número total de calotes para um rede tipo 11 é dado por

$$N_{Cal} = 6N_x N_y - 2N_x + 1 \quad (\text{A.15})$$

Para os restantes três tipos de redes fundamentais, N_{Cal} é determinado de forma análoga, alterando-se a contagem do número de calotes nos diferentes tipos de linhas de acordo com as suas características.

A.3.4.2 Rede Tipo 01

Para uma rede tipo 01, ou seja, rede sem fronteiras periódicas e com canais horizontais, deixam de existir canais associados aos lados livres nas fronteiras da rede, como se pode observar na Figura 3.4. Nas linhas do topo e do fundo da rede também deixa de existir um canal.

Deste modo, em relação à rede tipo 11, existe menos uma calote nas linhas de canais de saída do fluido, duas calotes na linha de canais oblíquos de entrada do fluido na rede, e $N_x - 1$ calotes nas linhas do centro da rede (menos uma calote por linha, correspondente ao canal no lado aberto que deixa de existir), ou seja

$$N_{Cal}^{Topo} = 4N_y - 3 \quad (\text{A.16})$$

$$N_{Cal}^{Centro} = (N_x - 1)(6N_y - 4) \quad (\text{A.17})$$

$$N_{Cal}^{Fundo} = 2N_y - 1 \quad (\text{A.18})$$

Somando os três termos, o número de calotes para uma rede tipo 01 é dado pela expressão

$$N_{Cal} = 6N_x N_y - 4N_x \quad (\text{A.19})$$

A.3.4.3 Rede Tipo 10

Uma rede tipo 10 é uma rede com fronteiras periódicas e sem canais horizontais, deixando as calotes associadas a este tipo de canais de ser consideradas. Cada um dos termos de N_{Cal} é calculado da seguinte forma.

- Linha de topo, $i = 1$. Os canais oblíquos possuem apenas uma câmara associada, correspondendo a $2N_y$ calotes.
- Linhas do centro e do fundo da rede, $i = 2, \dots, N_x$. Em relação ao caso descrito na Secção A.3.4.1, apenas é necessário considerar as calotes associadas aos canais oblíquos, sendo a contagem efectuada de forma idêntica. Logo, $N_{Cal}^{Centrais} = (N_x - 1)(4N_y - 1)$.
- Linha extra do fundo da rede, $i = N_x + 1$. Este caso é igual à mesma situação da Secção A.3.4.1, pelo que $N_{Cal}^{Fundo} = 2N_y$.

Somando os três termos, de acordo com a Equação A.14,

$$N_{Cal} = 4N_xN_y - N_x + 1 \quad (A.20)$$

A.3.4.4 Rede Tipo 00

Para uma rede tipo 00, ou seja, sem fronteiras periódicas e sem canais horizontais, em relação ao caso da secção anterior, não devem ser considerados as calotes aos canais nos lados abertos da rede. As mesmas considerações feitas para a rede tipo 10, em comparação com a rede tipo 11, são válidas aqui, obtendo-se então as seguintes expressões para cada um dos termos de N_{Cal}

$$N_{Cal}^{Topo} = 2N_y - 1 \quad (A.21)$$

$$N_{Cal}^{Centro} = (N_x - 1)(4N_y - 2) \quad (A.22)$$

$$N_{Cal}^{Fundo} = 2N_y - 1 \quad (A.23)$$

ou seja, somando os três termos anteriores

$$N_{Cal} = 4N_x N_y - 2N_x \quad (A.24)$$

A.3.5 Influência do número total de elementos da rede no valor da espessura equivalente da rede

A comparação dos valores previstos pelos simuladores hidrodinâmico e de transporte de massa requer a definição do valor da espessura equivalente da rede, E_R . Apesar do valor deste parâmetro não ser necessário na descrição do escoamento ou do transporte de massa através da rede, a determinação dos valores de parâmetros macroscópicos, como por exemplo as constantes A e B da equação de MacDonald. A análise das expressões obtidas permite prever qual é a influência das condições impostas ao gerador da rede nos parâmetros geométricos da rede neste parâmetro.

O valor de E_R é calculado com base na razão entre o volume total e de vazios da rede (ver Secção 3.4.6). O primeiro termo é função do número de linhas e colunas da rede e do espaçamento entre as câmaras, sendo este último factor função de l e θ . O segundo termo é função das distribuições das dimensões características dos elementos e do seu número total, dependente das hipóteses impostas na estrutura da rede.

Em redes em que apenas a estrutura geométrica for diferente, o factor determinante na determinação de E_R é o diferente número de elementos da rede. De acordo com as secções anteriores, apenas os valores de N_{Can} e N_{Cal} são dependentes das condições e restrições impostas ao gerador da rede. Como o volume associado às câmaras e canais é muito superior ao volume associado às calotes, apenas é necessário tomar em conta as variações do número total de canais entre os diferentes tipos de redes na análise do comportamento qualitativo de E_R .

Assumindo que não ocorre remoção de câmara e/ou canais, o tipo de fronteiras da rede e a existência ou não de canais horizontais apenas influencia o número total de canais da rede (ver Secção A.3.3). De seguida cada um destes aspectos é analisado em detalhe.

Para redes com dimensões tais que os valores estimados por estas sejam estatisticamente significativos, a diferença entre o número total de canais entre redes com e sem fronteiras periódicas é pouco significativo. Como exemplo considere-se o caso de redes tipo 11 e 01. A

razão entre o número total de elementos das duas redes, não tomando em conta as calotes, é dada pela expressão

$$\frac{N_T^{11}}{N_T^{01}} = 1 + \frac{2N_x + 1}{4N_x N_y - (2N_x + 1)} \quad (\text{A.25})$$

em que N_T^{11} e N_T^{10} são o número total de elementos de redes tipo 11 e tipo 10 respectivamente. Assumindo que N_x é constante, as diferenças entre os dois tipos de rede ocorrem apenas nas suas fronteiras. Quanto maior for o número de colunas da rede menor será a diferença entre o número total de elementos das duas redes. Nestas condições, a razão entre o volume de vazios dos tipos de rede tende também para 1, obtendo-se valores da espessura equivalente da rede idênticos (ver Secção 3.7.1.2).

Assumindo agora que N_y é constante, quando N_x tende para valores grandes obtém-se não um valor constante mas sim uma função de N_y , definida pela expressão

$$\lim_{N_x \rightarrow \infty} \frac{N_T^{11}}{N_T^{01}} = 1 + \frac{1}{4N_y - 1} \quad (\text{A.26})$$

Apenas quando N_y é baixo é que a razão entre o número total de elementos de redes com e sem fronteiras periódicas é diferente de um. Para redes com valores de N_y estatisticamente significativos, a razão entre o número total de canais é praticamente 1. Deste modo, o volume total de vazios dos dois tipos de rede é idêntico, resultando em valores idênticos de E_R .

Situação análoga é observada quando se compara o número total de elementos de rede tipo 10 e 00, que diferem apenas nas características das fronteiras da rede. Entre estes dois tipos de rede, a razão entre o número total de elementos das duas rede, não tomando em conta as calotes, é dada pela expressão

$$\frac{N_T^{10}}{N_T^{00}} = \frac{N_y}{N_y - 1} \quad (\text{A.27})$$

A expressão obtida é independente de N_x , tendendo para uma para valores elevados de N_y . Como redes deste tipo apenas diferem nas características da fronteira, diminuindo a sua influência com o aumento de N_y , este resultado era esperado.

As conclusões obtidas são válidas mesmo quando se toma em conta o volume de vazios associados às calotes da rede, visto que, de acordo com as expressões obtidas na Secção A.3.4, o número total de calotes nos dois tipos de redes é praticamente o mesmo.

A comparação das expressões obtidas para o número total dos elementos de redes com e sem canais horizontais mostra que esta condição é mais significativa que a anterior. Como exemplo considere-se o caso de redes tipo 11 e 10. Neste caso, a razão entre o número total de elementos da rede é dada pela expressão

$$\frac{N_T^{11}}{N_T^{10}} = 1 + \frac{1}{3 + \frac{2}{N_x}} \quad (\text{A.28})$$

Para valores elevados de N_x , a razão entre os valores tende para $4/3$, visto que uma rede tipo 11 tem mais um canal associado a cada uma das câmaras da rede. Como a estrutura das fronteiras dos dois tipos de redes é idêntica, o número total de elementos da rede não depende dessa característica. Como o número total de elementos de uma rede com canais horizontais é superior, o volume total de vazios vai ser também superior. Como E_R é determinado de modo a verificar o valor de porosidade imposto à rede, o valor da espessura equivalente diminui de modo a compensar o aumento do volume total de vazios. A razão entre os valores de E_R previstos para os dois tipos de redes depende se as calotes são tomadas ou não em conta na determinação do volume de calotes da rede, mas o seu comportamento qualitativo pode ser obtido das expressões anteriores.

Quando também se tomam em conta as características das fronteiras, as expressões obtidas também são função de N_x . Tomando como exemplo redes tipo 11 e 00, obtém-se a seguinte expressão para a razão entre o número total de elementos nestas

$$\frac{N_T^{11}}{N_T^{00}} = 1 + \frac{N_x N_y + N_x + 1}{3N_x N_y + 2N_y - N_x - 1} \quad (\text{A.29})$$

Os valores dos limites da expressão anterior quando N_x ou N_y tendem para infinito são dados pelas expressões

$$\lim_{N_x \rightarrow \infty} \frac{N_T^{11}}{N_T^{00}} = 1 + \frac{N_y + 1}{3N_y - 1} \quad (\text{A.30})$$

$$\lim_{N_y \rightarrow \infty} \frac{N_T^{11}}{N_T^{00}} = 1 + \frac{N_x}{3N_x + 2} \quad (\text{A.31})$$

Quando os valores constantes de N_x ou N_y se encontram dentro da gama de valores estaticamente significativos, os valores limites tendem para $4/3$, o que mostra que é a existência ou não de canais horizontais o factor dominante.

A.3.6 Determinação do Número de Coordenação Médio

O número de coordenação de uma câmara, C_i , é o número de canais associado à câmara i . No caso mais geral, existe uma distribuição de valores de C_i . Como no cálculo do número total de canais na rede, diferentes situações devem ser consideradas conforme a rede possui ou não fronteiras periódicas ou existem ou não canais horizontais.

Para redes com fronteiras periódicas, como se pode observar na Figura 3.4, o número de canais associados a uma câmara não depende da sua posição na câmara mas apenas da existência ou não de canais horizontais. Deste modo, para redes tipo 11 e 10 os valores de C são respectivamente 6 e 4.

Quando as fronteiras da rede são não periódicas, as câmaras no centro e no lado da rede vão ter um número de canais diferente. Nestas condições C é a média pesada dos números de coordenação C_i

$$C = \frac{\sum_{k=1}^6 N_{Ck} C_k}{N_{Cam}} \quad (\text{A.32})$$

em que N_{Ck} representa o número de canais com o número de coordenação C_k . A expressão anterior é válida mesmo para a situação em que ocorre remoção de câmaras e/ou canais, devendo nessa situação C ser determinado após o procedimento de remoção e tomando em conta apenas as câmaras com canais associados e os canais cujo diâmetro seja maior que zero.

O caso mais simples é uma rede tipo 00. Neste tipo de rede é possível definir dois tipos de câmaras, consoante o número de canais associados a estas. Para cada uma das linhas de da rede, existem $N_y - 1$ câmaras com quatro canais associados e uma câmara com dois canais associados. Esta encontra-se nos lados da rede, dependendo o seu posicionamento da linha de

câmaras da rede ter um índice par (encontra-se no lado direito) ou ímpar (encontra-se no lado esquerdo). Usando a Equação A.32, obtém-se a seguinte expressão de C para uma rede tipo 00

$$C = \frac{4N_x(N_y - 1) - 2N_x}{N_x N_y} = 4 - \frac{6}{N_y} \quad (\text{A.33})$$

A mesma estratégia é aplicável também a uma rede tipo 01. Neste caso, é possível definir três tipos de câmaras conforme o número de canais associados: seis, cinco e três. Os dois últimos casos ocorrem nos lados da rede, existindo sempre uma câmara com cinco e uma câmara com três por linha da rede, no total de N_x câmaras nestas condições. As restantes $N_x N_y - 2N_x$ câmaras possuem sempre 6 canais associados. Logo, aplicando a Equação A.32

$$C = \frac{6N_x(N_y - 2) - 3N_x - 5N_x}{N_x N_y} = 6 - \frac{20}{N_y} \quad (\text{A.34})$$

As expressões obtidas para redes sem fronteiras periódicas são função de N_y . Se não ocorrer remoção de câmaras e/ou canais, as únicas diferenças estruturais provocadas pelo diferente tipo de canais são a existência ou não dos canais que ligam entre si os dois lados da rede. Deste modo, quanto maior o número de colunas da rede, menos significativa é a diferença entre o número total de canais entre redes com e sem fronteiras periódicas, resultando em valores cada vez mais próximos do número de coordenação médio. Apesar de redes com um número de elementos similar possuírem também valores de C essencialmente idênticos, foram sempre consideradas as expressões obtidas para um dos tipos de rede.

A.4 Funções Densidade de Probabilidade

De acordo com as características de um meio poroso, as dimensões características dos elementos da rede podem ser descritas por funções densidade de probabilidade, cujos valores dos parâmetros devem ser determinados com base nas características do meio. Na literatura é comum recorrer a distribuições normais para caracterizar as distribuições das dimensões características dos elementos da rede. Este tipo de distribuições é fisicamente incorrecto pois existe uma probabilidade não nula de se determinarem valores negativos, o que é fisicamente impossível. A única forma de evitar este problema é usar uma função densidade de probabilidade definida num intervalo de valores, podendo estes limites ser determinados com

base em dados experimentais. Por outro lado, a função deverá ser capaz de descrever distribuições com diferentes características, como por exemplo a ocorrência de caudas ou de mais do que um máximo.

Experimentalmente obtém-se apenas valores discretos para as dimensões características dos elementos da rede. Do ponto de vista da implementação do gerador da rede, é mais conveniente usar uma aproximação contínua, com o número mínimo de parâmetros possível, evitando o uso directo de dados tabelados, com o erro inerente à interpolação necessária para o cálculo de valores não tabelados.

Três funções densidade de probabilidade foram implementadas no gerador da rede: Upper Limit Log Normal (ULLN), Normal e uniforme. Apenas as duas primeiras são usadas na determinação das distribuições das dimensões características dos elementos da rede, sendo a função seleccionada definida no ficheiro de dados lido inicialmente pelo package desenvolvido neste trabalho. Como é possível encontrar na literatura excelentes descrições da distribuição Normal (ver por exemplo Hoel, 1982), apenas é descrita em detalhe a distribuição ULLN (ver secção seguinte). A distribuição uniforme é usada no procedimento de remoção de câmaras e/ou canais, em que esta calcula os índices dos elementos que devem ser removidos, e na determinação dos valores aleatórios descritos pelas restantes rotinas (ver Secção A.4.3).

A.4.1 Distribuição ULLN

A distribuição de densidade de probabilidade Upper Limit Log Normal (ULLN) é baseada numa distribuição normal numa variável transformada, η , definida por (Lopes, 1984)

$$f(\eta) = \frac{\delta}{\sqrt{\pi}} \exp(-\delta^2 \eta^2), \quad -\infty < \eta < +\infty \quad (\text{A.35})$$

em que δ pode ser relacionado com o desvio padrão de uma distribuição normal através da relação (Hoel, 1982)

$$\delta = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma} \quad (\text{A.36})$$

A variável η pode ser considerada como sendo uma variável normalmente distribuída de média, μ , igual a zero e desvio padrão igual a σ . No algoritmo de geração da rede implementado, calcula-se x , variável normal com média igual ao valor médio de cada um dos elementos da rede, relacionada com η pela expressão

$$\eta = x - \mu \quad (\text{A.37})$$

A variável η está relacionada com a variável aleatória ξ , descrita pela distribuição ULLN, pela relação seguinte

$$\eta = \ln\left(\frac{A\xi}{\xi_{Max} - \xi}\right) \quad 0 < \xi < \xi_{Max} \quad (\text{A.38})$$

em que A e ξ_{Max} são dois parâmetros adicionais e que representam respectivamente um parâmetro ajustável e ξ_{Max} o valor máximo da gama em que se encontra definida a variável ξ . Assim, ao contrário da distribuição normal, a distribuição ULLN tem um domínio limitado entre 0 e ξ_{Max} .

Para se obter a função densidade de probabilidade ULLN, é necessária a utilização de um teorema da Estatística que permite relacionar a função de densidade de probabilidade da variável η com a da variável ξ (Hoel, 1982)

$$f(\eta) = f(\xi) \left| \frac{d\xi}{d\eta} \right| \Leftrightarrow f(\xi) = f(\eta) \left| \frac{d\eta}{d\xi} \right| \quad (\text{A.39})$$

Derivando a Equação A.39 obtém-se a expressão

$$\frac{d\eta}{d\xi} = \frac{1}{\xi} \left(\frac{\xi_{Max}}{\xi_{Max} - \xi} \right) \quad (\text{A.40})$$

Substituindo A.37 e A.38 em A.35, após rearranjo obtém-se a seguinte expressão para a função densidade de probabilidade de ξ

$$f(\xi) = \frac{\delta \xi_{Max}}{\sqrt{\pi} \xi (\xi_{Max} - \xi)} \exp \left[-\delta^2 \ln^2 \left(\frac{A\xi}{\xi_{Max} - \xi} \right) \right] \quad (\text{A.41})$$

A função de distribuição da variável ξ (também definida como sendo a função cumulativa da função densidade de probabilidade) pode ser facilmente obtida de A.41

$$F(\xi) = \frac{1}{2} [1 + \text{erf}(\delta\eta)] \quad (\text{A.42})$$

em que erf representa a função erro (Spiegel, 1973).

A.4.2 Análise da Função ULLN

A.4.2.1 Análise de sensibilidade

A função ULLN é caracterizada por quatro parâmetros: μ , valor médio da distribuição normal que serve de base à distribuição ULLN; δ , parâmetro que é inversamente proporcional ao desvio padrão da distribuição normal original; A e ξ_{Max} , dois parâmetros que controlam a forma da distribuição. O parâmetro ξ_{Max} define em particular a gama de valores em que está definida a ULLN, tendo-se assumido neste trabalho que este parâmetro é proporcional ao valor médio. O factor de proporcionalidade F_{Max} é indicado directamente ao gerador da rede, podendo o valor deste parâmetro ser obtido a partir de dados experimentais.

Na Figura A.7 são comparadas as curvas da função densidade de probabilidade para vários valores de A , para $\mu = 1$, $\delta = 1$ e $F_{Max} = 10$. Observa-se que quanto maior o valor deste parâmetro maior é a dispersão da curva em torno da moda, valor correspondente ao valor máximo da curva.

Por outro lado, as curvas deslocam-se para valores mais elevados de ξ , sendo possível observar uma “normalização”, no sentido em que as curvas se tornam cada vez mais simétricas, com o aumento de A . No entanto, o valor médio das distribuições é sempre maior que um, mesmo para os casos em que curva se torna mais simétrica.

Na Figura A.8 são comparadas as curvas da distribuição ULLN em função de δ , para $\mu = 1$, $A = 2$ e $F_{Max} = 10$. De acordo com a definição da função densidade de probabilidade ULLN, aumentar o valor δ é equivalente a diminuir o valor do desvio padrão, resultando numa maior dispersão das curvas das distribuições. Nestas condições a função densidade de probabilidade ULLN passam a ter uma forma mais simétrica, revelando um comportamento mais gaussiano.

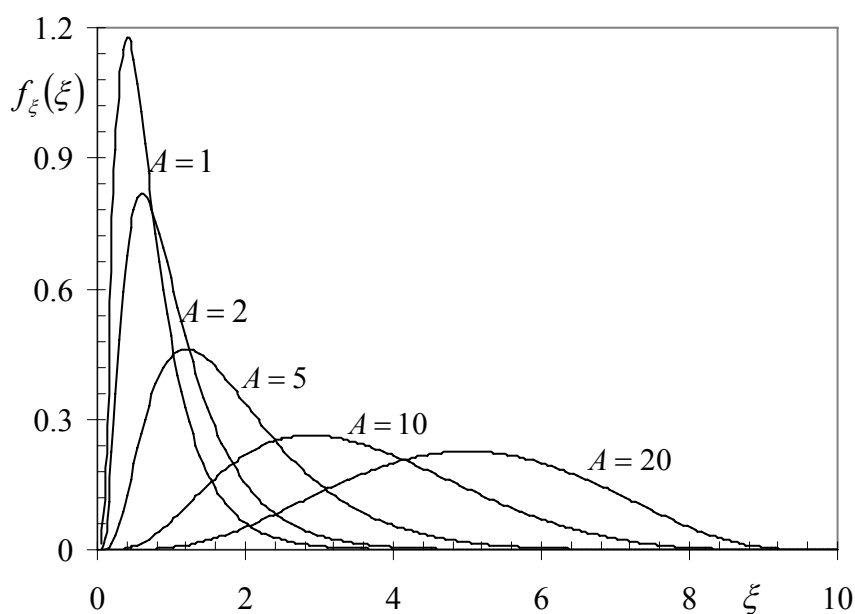


Figura A.7 Estudo de sensibilidade do parâmetro A na distribuição ULLN, para: $\mu = 1$, $\delta = 1$ e $F_{Max} = 10$.

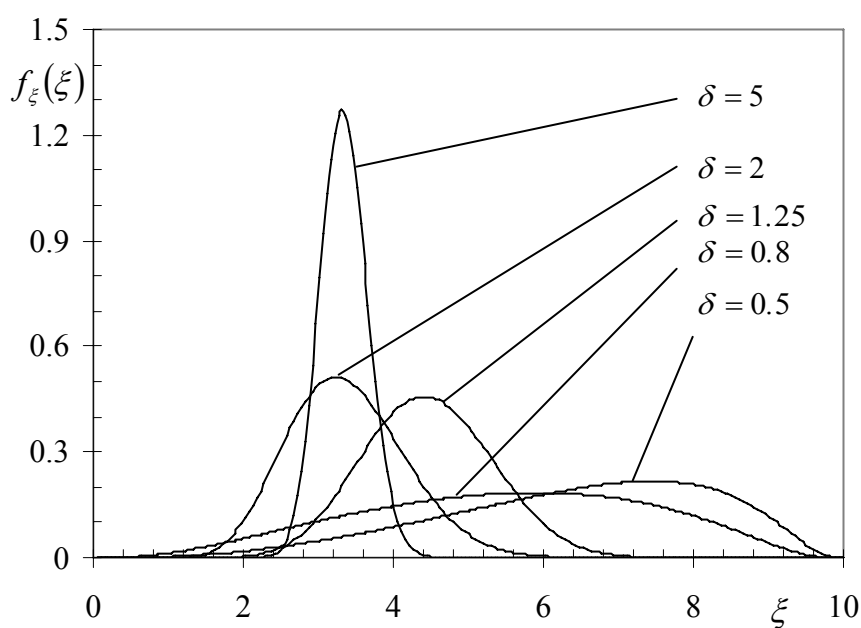


Figura A.8 Estudo de sensibilidade do parâmetro δ na distribuição ULLN, para $\mu = 1$, $A = 2$ e $F_{Max} = 10$.

Na Figura A.9 é analisada a influência do parâmetro F_{Max} , $\mu = 1$, $A = 2$ e $\delta = 1$. Como era esperado, observa-se um deslocamento da cauda das distribuições para valores mais elevados de ξ com o aumento de F_{Max} , sendo esta situação equivalente a estender a gama de definição

da função densidade de probabilidade. Por outro lado, como a gama de definição da distribuição é maior, o desvio padrão desta aumenta, como seria de se esperar. No entanto, observa-se que as curvas obtidas possuem um comportamento aproximadamente gaussiano para todos os valores de F_{Max} .

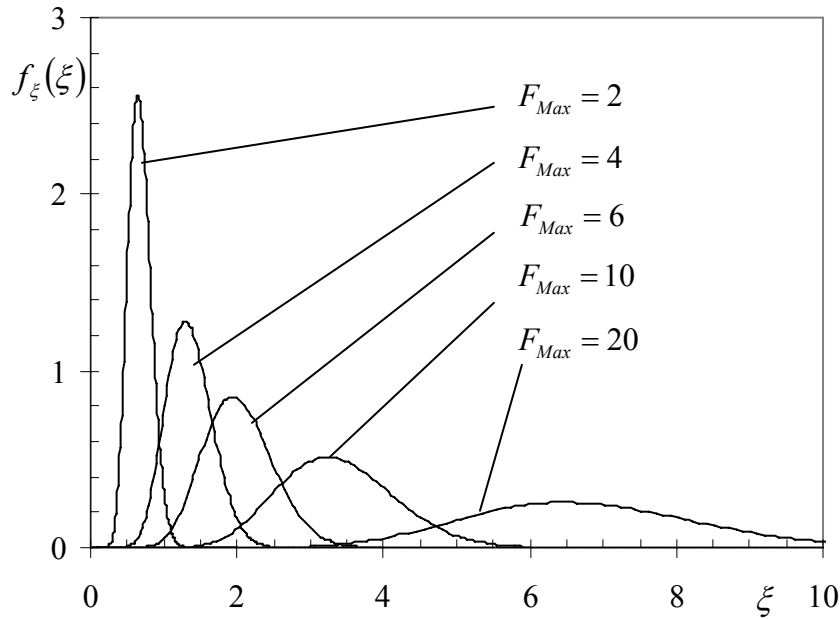


Figura A.9 Estudo de sensibilidade do parâmetro F_{Max} na distribuição ULLN, para $\mu = 1$, $A = 2$ e $\delta = 1$.

A.4.2.2 Estudo da Função ULLN

Comparando as curvas apresentadas nas figuras anteriores, é possível concluir que se forem verificadas condições entre os parâmetros da distribuição ULLN, este possui um comportamento qualitativo e mesmo quantitativo similar ao de uma distribuição Normal. Para o conjunto de parâmetros usado nas Figura A.7, Figura A.8 e Figura A.9, os parâmetros mais importantes são os valores de A e δ .

Tomando em conta as propriedades da distribuição Normal e relacionando os valores de alguns parâmetros que caracterizam as duas distribuições, é possível determinar as condições que os parâmetros da distribuição ULLN devem verificar.

Se uma distribuição for Normal, μ é igual aos valores da moda e da mediana. Apesar destas relações não serem válidas para uma distribuição ULLN, quando as duas distribuições se

aproximam assume-se que estas relações são válidas independentemente da distribuição considerada.

A mediana é o valor da variável independente (neste caso ξ) tal que a área debaixo da curva da função densidade de probabilidade entre 0 e esse ponto é igual a 0.5. Usando a função distribuição, definida pela Equação A.42, a mediana é o valor de ξ tal que $F(\xi) = 0.5$ (Spiegel, 1973). Usando esta última relação e a Equação A.38 o valor da mediana da ULLN é dada pela expressão

$$\xi_{50} = \frac{\xi_{Max}}{A + 1} \quad (A.43)$$

em que ξ_{50} representa o percentil 50%. Substituindo ξ_{50} pelo valor médio, $\langle \xi \rangle$, obtemos a relação pretendida.

A moda de uma distribuição é definida como sendo o valor de ξ em que a função densidade de probabilidade, $f(\xi)$, tem um máximo. Como para o cálculo da ULLN se define um valor médio μ , este valor deve ser igual a $\langle \xi \rangle$, valor médio da ULLN. Por outro lado, a condição de igualdade dos valores da moda e da mediana, e tomando em conta que na implementação desta distribuição se considera que $\langle \xi \rangle$ e ξ_{Max} são proporcionais (através do parâmetro F_{Max}) a Equação A.43 pode ser escrita na forma

$$\langle \xi \rangle = \frac{F_{Max} \langle \xi \rangle}{A + 1} \quad (A.44)$$

Simplificando a equação anterior, obtém-se a seguinte relação entre os parâmetros F_{Max} e A , na forma

$$A = F_{Max} - 1 \quad (A.45)$$

A Equação A.45 é apenas uma relação aproximada, visto que a influência do valor do desvio padrão da distribuição ULLN (através do parâmetro δ) não foi tomada em conta. De acordo com os resultados da Secção A.4.2.1, é de se esperar que quanto maior o valor do desvio padrão, correspondente a valores cada vez menores de δ , menor será o comportamento gaussiano da distribuição ULLN.

Na Figura A.10 a influência de δ na forma da função ULLN é analisada, para $\mu = 1$ e F_{Max} constante. O valor de A é determinado usando-se a Equação A.45. Os resultados confirmam as conclusões anteriores acerca da influência de δ no comportamento da ULLN. Para os valores de F_{Max} considerados, desde que $\delta > 2$, correspondente a $\sigma < 0.354$ é possível assumir com um erro desprezável que a função ULLN possui um comportamento Normal. Para valores de $\delta < 2$, o valor máximo da ULLN é menor que o valor médio da distribuição, sendo esta diferença tanto maior quanto menor o valor deste parâmetro.

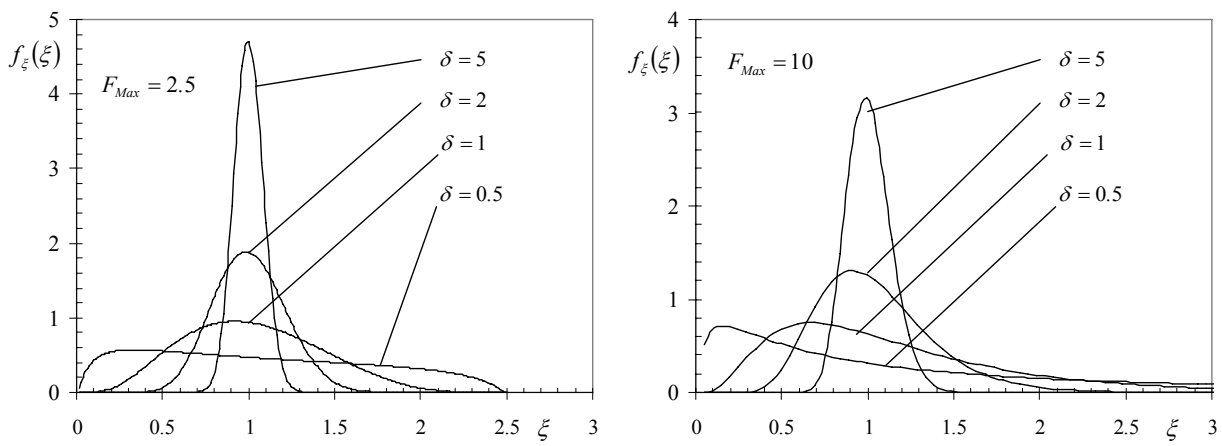


Figura A.10 Influência de δ na validade da Equação A.45, para $\mu = 1$ e dois valores de F_{Max} : 2.5 e 10.

A.4.3 Implementação das Funções Densidade de Probabilidade

Todas as distribuições são baseadas na determinação de valores usando uma distribuição uniforme definida entre 0 e 1, tendo usado a rotina *Ran1* (Press *et al*, 1992). Com base nos valores obtidos por esta rotina, os valores das restantes distribuições são obtidos tomando em conta os valores dos parâmetros estatísticos destas e a sua gama de definição.

Se ocorrer remoção de câmaras e/ou canais, é utilizada uma distribuição uniforme na selecção do elemento da rede cujo valor de diâmetro vai passar a zero. O valor determinado pela distribuição deve ser um número inteiro e encontrar-se na gama de valores possível para o índice do elemento que está a ser considerado. Independentemente do tipo de elemento, devem-se calcular dois valores definidos nos intervalos $[1, N_x]$, correspondente à linha da rede, e $[1, N_y]$, correspondente à coluna da rede, em que o elemento se encontra. Deste modo, é possível localizar na rede a câmara que vai ser removida ou à qual se encontra associada o canal a remover. Na remoção de canais deve-se calcular um terceiro valor, entre 1 e 3,

representando o canal cujo valor de diâmetro vai passar a zero. Em qualquer dos casos, o valor obtido na rotina *Ran1* é multiplicado pelo intervalo definido entre o maior e o menor valor possíveis para o variável aleatória em cálculo. De modo a evitar a obtenção de valores iguais a zero, ao resultado da multiplicação soma-se um, usando-se de seguida o maior número contido neste.

Na determinação de valores seguindo a distribuição normal, os valores obtidos pela rotina *Ran1* são utilizados pela rotina *Gas1* (Press *et al.*, 1992), sendo o valor da média e do desvio padrão tomados em conta pela rotina. A mesma rotina é usada na determinação de valores seguindo a distribuição ULLN, impondo-se então que $\mu = 0$, de acordo com a descrição desta função densidade de probabilidade efectuada na Secção A.4.1. Após a obtenção dos valores descritos pela distribuição normal, basta aplicar a mudança de variável definida pela Equação A.38 para determinar os valores correspondentes mas que seguem a distribuição ULLN.

A.5 Notas sobre a Inclusão das Calotes na Geração da Rede

A ligação entre uma câmara e um canal, apresentada na Figura A.11, dá origem a uma zona comum aos dois elementos. No cálculo do volume associado aos vazios da rede, se o volume desta zona comum não for tomado em conta, será contabilizado duas vezes ao calcular o volume de vazios associados às câmaras e aos canais da rede.

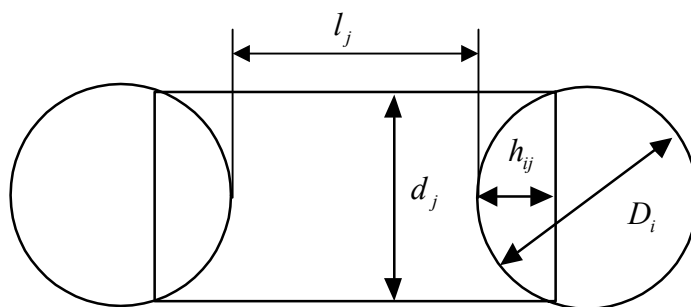


Figura A.11 Ramo da rede, mostrando as zonas de ligação entre um canal e as câmaras nos extremos deste.

Além do volume de vazios, as calotes influenciam também a distribuição dos comprimentos dos canais. No Capítulo 3, definiu-se l_j da forma apresentada na Figura A.11, em que se observa que o valor do comprimento da calote, h , deve ser conhecido de modo a calcular o valor correcto de l_j , sobretudo quando os diâmetros das câmara e do canal forem próximos um do outro.

Na Secção 3.4.8.3 foram analisadas as condições nas quais a influência das calotes pode ser desprezada na geração da rede. Nas subsecções seguintes vão ser deduzidas as expressões para o comprimento e o volume de uma calote em função das características geométricas da câmara e do canal associado.

A.5.1 Determinação do Comprimento da Calote

O comprimento de uma calote, h_{ij} , representa o comprimento da calote originada pela entrada de um canal numa câmara. Na determinação do valor deste parâmetro geométrico é tomada em conta a estrutura da ligação entre a câmara e um canal, como se pode observar na Figura A.12.

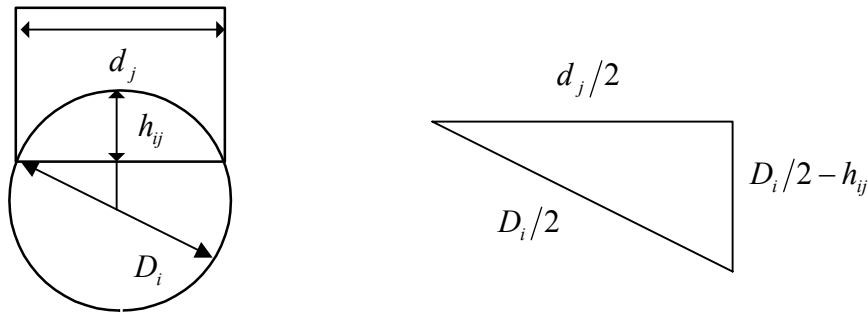


Figura A.12 Diagramas usados para o cálculo de h_{ij} .

De acordo com a figura anterior, aplicando o teorema de Pitágoras no triângulo rectângulo definido pela entrada do canal na câmara, obtém-se a seguinte expressão

$$\left(\frac{D_i}{2} - h_{ij}\right)^2 + \left(\frac{d_j}{2}\right)^2 = \left(\frac{D_i}{2}\right)^2 \quad (\text{A.46})$$

Esta pode ser expressa em termos de h_{ij} , obtendo-se a seguinte expressão geral para o comprimento da calote

$$h_{ij} = \frac{D_i}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \left(\frac{d_j}{D_i}\right)^2} \right) \quad (\text{A.47})$$

A.5.2 Determinação do Volume da Calote

A calote é um sólido de revolução obtido rodando a superfície definida pela entrada de metade do canal na câmara segundo o eixo central do canal, como se pode observar na Figura A.13 em que o centro da câmara pertence à recta em que o eixo do canal é definido.

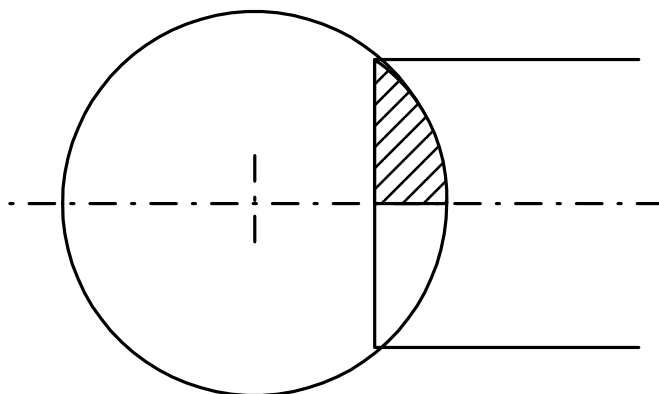


Figura A.13 Área definida pela entrada de um canal numa câmara, que serve de base à determinação do volume da calote.

Apesar de se poder usar na dedução da expressão do volume da calote, V_{Cal} , o valor do diâmetro da câmara, D_i , a dedução da expressão geral é mais simples usando o raio da câmara, R_i . O volume da calote é igual ao volume do sólido de revolução definido pela área em sombreado, através da rotação desta em torno do eixo central associado ao canal (que inclui o centro da câmara). Nestas condições, o volume do sólido de revolução é dado pela seguinte expressão

$$V_{Cal} = \pi \int_{R_i - h_{ij}}^{R_i} [f^2(x) - g^2(x)] dx \quad (A.48)$$

em que $f(x)$ é a área debaixo da circunferência definida pela câmara e $g(x)$ correspondente ao eixo de simetria do canal, que, de acordo com a forma como os canais e as câmaras se interligam entre si na rede. De modo a simplificar a determinação das funções $f(x)$ e $g(x)$, a origem dos eixos foi colocada no centro da circunferência definida pela câmara. Nestas condições, $g(x) = 0$ e $f(x) = \sqrt{R_i^2 - x^2}$, sendo esta última função correspondente à parte de cima da circunferência. Deste modo, o volume da calote é dado por

$$V_{Cal} = \pi \int_{R_i - h_{ij}}^{R_i} \left(\sqrt{R_i^2 - x^2} \right)^2 dx \quad (\text{A.49})$$

e integrando obtém-se a expressão para o volume das calotes associada à entrada dos canais na rede

$$V_{Cal} = \frac{\pi}{3} h_{ij}^2 \left(\frac{3}{2} D_i - h_{ij} \right) \quad (\text{A.50})$$

A.6 Determinação dos Critérios de Não Intersecção

Na Secção 3.4.3 foram apresentadas as condições que devem verificar os valores de D_i e d_j das câmaras e dos canais associados de forma a não ocorrerem intersecções entre estes à entrada das câmaras. De acordo com a Figura 3.6 e tomando em conta a estrutura geométrica ao nível local da rede, as diferentes situações possíveis podem ser classificadas em três tipos diferentes, para as quais se definiu um critério distinto.

O critério A1 é independente da estrutura da rede, visto os canais oblíquos em que este é aplicado se encontrarem sempre em qualquer dos tipos de rede elementar obtida pelo gerador da rede. A aplicação dos critérios A2 e A3 depende da existência ou não de canais horizontais associados à câmara em que os critérios se encontram a ser aplicados. Na Tabela 3.3 são apresentadas as possíveis combinações entre os canais associados a uma câmara da rede.

Neste apêndice são deduzidas as expressões apresentadas na Tabela 3.3 para cada um dos critérios de não intersecção. Estas baseiam-se na hipótese de que, como se pode observar na Figura A.14, no limite dois canais contíguos podem-se tocar na entrada da câmara. Os canais não se intersectam à entrada de um câmara desde que o somatório dos ângulos definidos pelos canais ao entrar na câmara seja menor ou igual ao somatório dos ângulos formados entre os eixos centrais dos canais e o eixo dos xx . Na Figura A.14 é apresentado um dos casos limite que é possível ocorrer na aplicação do critério A1.

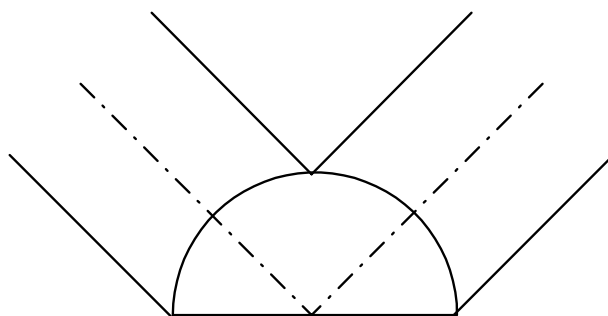


Figura A.14 Caso limite para a intersecção de dois canais à entrada de uma câmara, para um par de canais em que se deve verificar o critério A1.

Nas secções seguintes as expressões a aplicar para cada um dos critérios são obtidas com base na condição limite apresentada anteriormente.

A.6.1 Critério A1

Como a aplicação da condição limite é similar em todos os critérios, vai-se analisar mais de perto o caso do critério A1. Na Secção A.6.2 a análise efectuada é estendida aos critérios A2 e A3, indicando-se apenas as modificações que é necessário em relação ao critério A1. Na Figura A.15 é apresentado o caso dos pares de canais 1 e 2 (de acordo com a nomenclatura da Figura 3.6), em que se deve aplicar o critério A1 para verificar se estes canais se intersectam ou não à entrada da câmara.

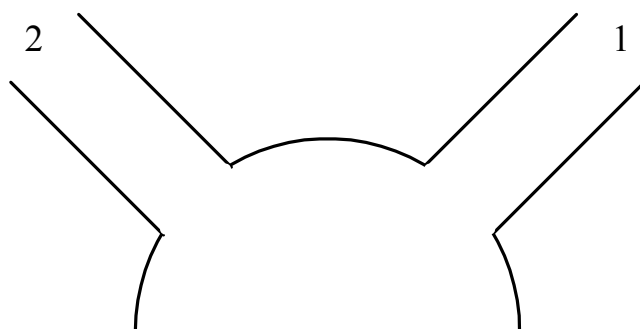


Figura A.15 Exemplo de pares de canais em que se aplica o critério A1.

Na dedução da expressão a utilizar na aplicação do critério, apenas é necessário tomar em a zona entre os eixos de simetria dos dois canais. Como cada um dos canais faz um ângulo igual a θ com a vertical, o somatório dos ângulos definidos pelos eixos de simetria dos canais é igual a 2θ . O ângulo definido pela entrada de um canal na câmara, α_j , definido na Figura A.16, toma em conta os valores relativos dos diâmetros das câmaras e dos canais.

Por considerações geométricas, os valores de d_j , D_i e α_j estão relacionadas pela expressão

$$\alpha_j = \arcsin\left(\frac{d_j}{D_i}\right) \quad (\text{A.51})$$

Esta expressão é válida independentemente do critério de não intersecção considerado. De acordo com a condição geral de não intersecção, a seguinte expressão geral pode ser escrita para o critério A1

$$2\theta \geq \sum_k \arcsin\left(\frac{d_j^k}{D_i}\right) \quad (\text{A.52})$$

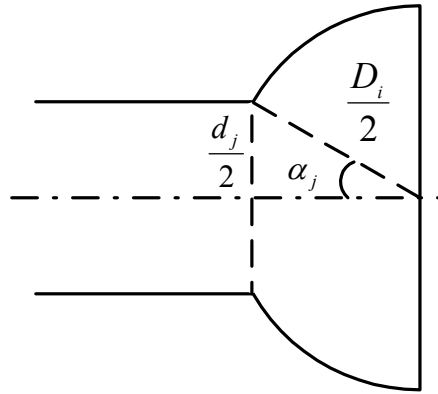


Figura A.16 Ângulo formado pela entrada de um canal de diâmetro d_j na câmara de diâmetro D_i .

Como era esperado, a expressão obtida é função das características geométricas e das dimensões características dos elementos da rede associados entre si. Como θ é constante e os valores de d_j e D_i são já conhecidos quando se aplica este critério, a implementação computacional do critério é simples, embora se deva tomar em atenção que apenas quando os dois diâmetros dos canais são diferentes de zero é que estes se devem aplicar.

A.6.2 Critérios A2 e A3

Ao deduzir as expressões correspondentes aos critérios A2 e A3, apenas é necessário modificar as expressões correspondentes ao somatório dos ângulos definidos pelos eixos de simetria dos canais em relação ao centro da câmara. Na Figura A.17 são apresentados dois exemplos de pares de canais em que se devem aplicar os critérios A2 e A3 e que servem de base à determinação das expressões pretendidas.

Como na Secção A.6.1, estes valores são função de θ apenas, sendo iguais a $\pi/2 - \theta$ e $\pi - 2\theta$ para os critérios A2 e A3 respectivamente. Usando a definição dos critérios de não intersecção e aplicando a Equação A.51, obtém-se para cada um dos critérios as expressões seguintes

$$\frac{\pi}{2} - \theta \geq \sum_k \arcsin\left(\frac{d_j^k}{D_i}\right), \text{ Critério A2} \quad (\text{A.53})$$

$$\pi - 2\theta \geq \sum_k \arcsin\left(\frac{d_j^k}{D_i}\right), \text{ Critério A3} \quad (\text{A.54})$$

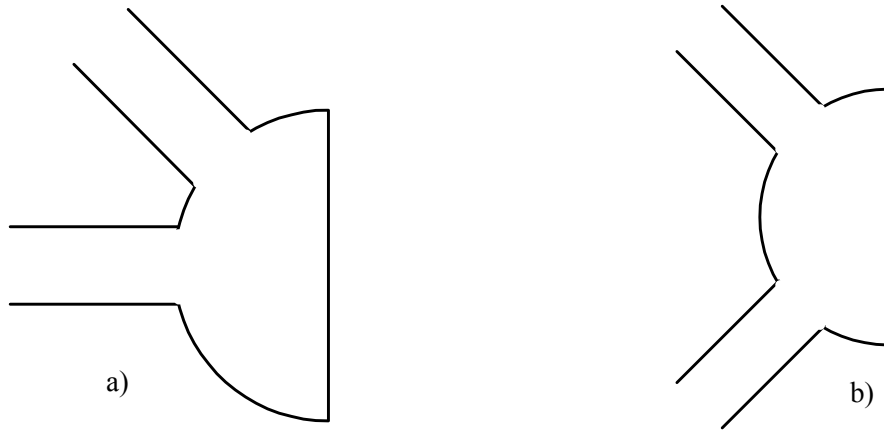


Figura A.17 Exemplos de pares de canais em que se aplica: a) critério A2; b) Critério A3.

De notar que na dedução da condição para o critério A2 usou-se $\theta = \pi/2$ para os canais horizontais, de acordo com estrutura seleccionada para a rede de elementos usada neste trabalho.

B. Apêndices do Capítulo 4

B.1 Introdução

Aqui são apresentados os apêndices associados ao Capítulo 4, descrevendo-se a seguir os objectivos de cada um destes, secção a secção.

- Na Secção B.2 são descritas e comparadas as duas formas propostas para estimar o valor do factor de fricção em função do número de Reynolds nos canais na zona de transição entre regime laminar e turbulento nos canais da rede.
- Na Secção B.3 é descrito o modelo completo para a determinação do valor do termo R_j^{ET} desenvolvido neste trabalho. Este é analisado e determinado e quais são os problemas detectados e que impediram a sua implementação neste trabalho.
- Na Secção B.4 é analisada a influência das condições e restrições impostas na geração da rede na estrutura da matriz de coeficientes $\mathbf{Y}$. Aspectos relacionados com o tipo de fronteiras definidas na rede e a remoção de câmaras e/ou canais são analisados em detalhe.

B.2 Factor de fricção nos canais na zona de transição

Como se descreveu na Secção 4.3.1, para a zona de transição entre escoamento linear e turbulento não se encontram disponíveis na literatura expressões do factor de fricção f_j em função das características geométricas e de escoamento. No entanto, na implementação e consequente simulação do escoamento através da rede de elementos, é necessário dispor de uma expressão explícita que permita determinar f_j conhecido Re_j . Duas estratégias foram consideradas, ambas baseadas na determinação de polinómios de interpolação, um linear e outro baseado em polinómios de Tchebyshev, tendo-se imposto condições diferentes na determinação dos valores dos seus coeficientes.

B.2.1 Interpolação Linear

A forma mais simples consiste na determinação de um polinómio de interpolação de primeira ordem para determinar f_j . O cálculo dos coeficientes do polinómio de interpolação requer a definição de duas condições. Estas são obtidas impondo-se que para toda a gama de valores de Re_j , as expressões para o cálculo de f_j devem ser contínuas entre si.

Como foram definidas três zonas para o escoamento, em que as expressões de $f_j(Re_j)$ são distintas, as condições a impor são igualdade entre os valores previstos do factor de fricção no limites superior e inferior das zonas de escoamento laminar e de transição, e no limite inferior e superior das zonas de escoamento turbulento e transição respectivamente. A utilização destas condições requer a definição dos valores limites de Re_j entre as diferentes zonas de escoamento num canal cilíndrico. De acordo com a literatura (Shames, 1982), foram considerados os valores de 2300 e 5000 para os limites superior da zona de escoamento laminar e limite inferior da zona de escoamento turbulento respectivamente.

As constantes do polinómio de interpolação são obtidas resolvendo um sistema de equações lineares (Chapra e Canale, 1992), e usando as Equações 4.20 e 4.21, obtém-se

$$f_j = 0.0195 + 3.63 \times 10^{-6} Re_j \quad (\text{B.1})$$

A expressão obtida está representada na Figura 4.3. Observa-se que na zona de transição, ao contrário das expressões consideradas nas restantes zonas de escoamento, f_j aumenta com Re_j . Por outro lado, nos pontos comuns às diferentes às três zonas de escoamento é possível

observar descontinuidades nos valores das derivadas. Dependendo do algoritmo utilizado para a resolução do sistema de equações, a existência de descontinuidades deste tipo pode trazer problemas numéricos, em especial se existirem muitos canais da rede em que o valor do número de Reynolds se encontra próximo dos limites entre os diferentes regimes de escoamento (Bending e Hutchison, 1973).

B.2.2 Polinómios de Tchebyshev

Para obviar o problema anterior, uma segunda estratégia foi desenvolvida em que a continuidade da função $f_j(Re_j)$ é assegurada até pelo menos à segunda derivada.

Foram assim impostas as seguintes condições na sua implementação:

- as duas aproximações devem prever valores similares de f_j para igual valor Re_j , tendo sido escolhido que para $Re_j = 3650$ os valores de f_j previstos pelas duas aproximações sejam iguais.
- nos extremos da gama de valores de Re_j em que as funções de interpolação se encontram definidas deve-se assegurar que a função e as suas primeiras são contínuas.

Deste modo, devem ser verificadas cinco condições, sendo três impostas para os extremos da zona de transição e uma condição no interior do seu intervalo, sendo assim possível determinar um polinómio de grau quatro. Contudo, na prática não é comum a utilização de polinómios de interpolação de grau tão elevados, devido às dificuldades na obtenção dos valores dos coeficientes do polinómio, visto ser necessário resolver sistemas de equações lineares mal condicionados, próximos dos extremos do intervalo em que a função é definida existe a possibilidade de fortes variações nos valores estimados por esta (Chapra e Canale, 1992). Deste modo, outros tipos de funções de interpolação devem ser escolhidos.

Neste trabalho foram seleccionados polinómios de Tchebyshev por permitirem a fácil inclusão de condições nas derivadas da função e não ocorrerem variações muito acentuadas nos valores previstos para o factor de fricção nos extremos do intervalo.

Além da condição de igualdade entre os valores de f_j no ponto central da aproximação linear, os coeficientes do polinómio são determinados minimizando o desvio entre os valores previstos pelas duas estratégias de aproximação. As variáveis do problema de optimização são

os valores de Re_j em que se define a zona de transição, sendo este resolvido pelo método dos mínimos quadrados e usando a rotina *E04FDF* da biblioteca científica *NAG*. Como estimativas iniciais foram utilizados os valores de Re_j usados para a determinação dos coeficientes do polinómio de interpolação de primeira ordem.

A utilização deste modelo determina novos valores limite de Re_j entre as três zonas de escoamento. Para escoamento em tubos lisos os novos valores limite são agora 1586 e 6175.

Os valores previstos usando polinómios de Tchebyshev são apresentados e comparados com a interpolação linear na Figura 4.3. Observa-se que entre $Re_j = 2300$ e $Re_j = 5000$, os valores previstos pelas duas aproximações são similares, sendo as diferenças mais significativas observadas na vizinhança destes valores. Ao contrário da interpolação linear, a transição entre regimes de escoamento é suave, sendo os valores previstos pela função de interpolação como as expressões consideradas para regime laminar e turbulento desprezável quando os valores de Re_j estão próximos dos valores limites.

B.2.3 Comparação do comportamento das duas aproximações

Durante a implementação e teste do simulador hidrodinâmico desenvolvido neste trabalho, as duas estratégias para estimar f_j na zona de transição foram comparadas. Usando polinómios de Tchebyshev verificou-se a convergência do algoritmo quaisquer que fossem as características das distribuições das dimensões características dos elementos da rede e de escoamento consideradas. Usando a estratégia de interpolação linear, observaram-se problemas de convergência nas zonas de transição do escoamento, em particular quando os efeitos das ligações entre as câmaras e os canais não são tomados em conta.

De acordo com os resultados da Secção 4.3.3.3, mesmo em condições de escoamento laminar nos canais, os termos não lineares associados às ligações entre as câmaras e os canais são dominantes. Como se pode observar na Figura 4.3, o modelo ICAM não apresenta variações no valor da resistência do ramo da rede do modelo FRIC, e a influência da descontinuidade na primeira derivada é menos marcada, reduzindo a possibilidade de problemas na convergência do método iterativo.

B.3 Modelo Completo IQM

Na Secção 4.3.2 foram definidos dois termos associados à resistência ao escoamento das ligações entre as câmaras e os canais da rede. O primeiro termo, R_j^{EL} , representa a resistência das forças viscosas, sendo função apenas das características geométricas dos elementos da rede associados entre si (Koplik, 1982). O segundo termo, R_j^{ET} , representa a contribuição das forças inerciais, e pode ser determinado a partir da resolução do sistema de equações de conservação de massa e de quantidade de movimento escritas para volumes de controlo, VC, definidos no interior das câmaras. Os aspectos relacionados com as diferenças de comportamento entre canais oblíquos e horizontais, a disposição dos canais associados a uma câmara e o sentido de escoamento nos canais podem assim ser tomados em conta explicitamente, o que não acontece com os termos R_j^F e R_j^{EL} , em que a resistência ao escoamento de um ramo da rede é independente do sentido de escoamento através deste.

Duas situações podem ser diferenciadas para as ligações entre as câmaras e os canais, conforme o sentido de escoamento nos canais é de entrada ou saída na câmara. De notar que num ramo qualquer da rede, com excepção dos canais nas linhas de topo e do fundo da rede e de alguns ramos nos lados da rede quando as fronteiras são não periódicas, existe sempre uma entrada e saída de fluido das câmaras associadas aos extremos do canal. Em relação às variações da área de secção recta do escoamento, a primeira situação corresponde a uma expansão do fluido e a segunda a uma contracção. Experimentalmente observa-se que o comportamento hidrodinâmico nas duas situações é distinto, devendo-se tomar em conta estes aspectos (Withe, 1992).

Numa expansão, a velocidade do fluido ao entrar na câmara diminui. Numa primeira aproximação, desprezando a influência da presença de uma parede no lado oposto da câmara, o escoamento é similar a um jacto de saída de um tubo para a atmosfera ou para um tanque de grandes dimensões. A pressão absoluta do fluido aumenta, mas existem perdas devido à mistura do fluido no interior da câmara e à formação de duas zonas de recirculação em redor do jacto de fluido formado pela saída do fluido do canal para a câmara, como se pode observar na Figura B.1a.

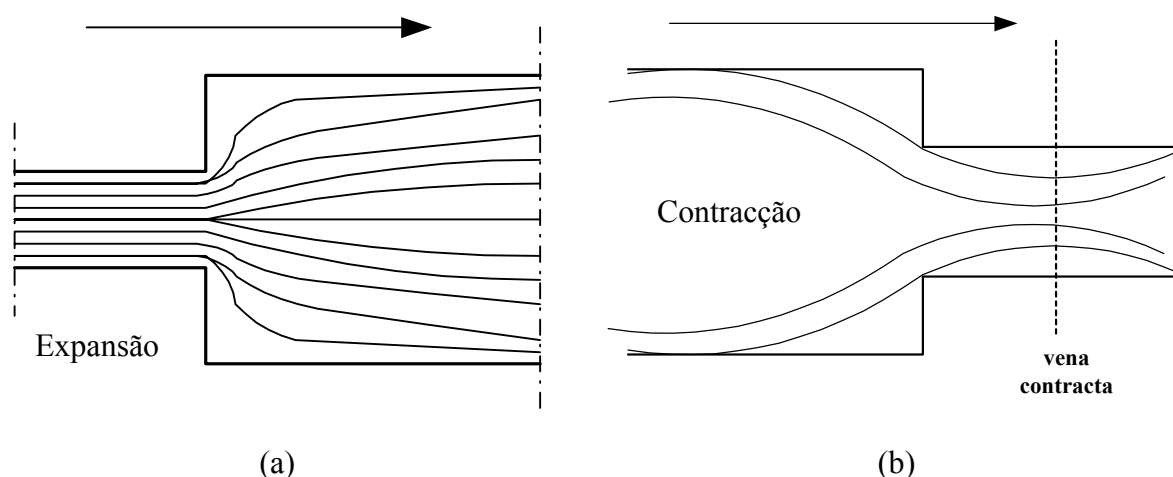


Figura B.1 Estrutura de escoamento para: (a) expansão simples; (b) contração simples. As setas representam o sentido de escoamento na expansão ou contração.

Para o escoamento numa contração, equivalente à saída de fluido de uma câmara, a velocidade aumenta ao entrar no canal, resultando numa redução da pressão. Imediatamente a seguir à entrada do fluido, forma-se uma *Vena Contracta*, como se pode ver na Figura B.1b, em que a área de secção recta disponível para o escoamento continua a diminuir. Após a *Vena Contracta*, observa-se uma zona em que a área de escoamento aumenta (equivalente a uma expansão simples), até ocupar toda a área de secção recta do canal.

Os aspectos qualitativos referidos devem ser tomados em conta na definição dos VC e na escrita das equações de conservação de massa e de quantidade de movimento para a obtenção de expressões que permitam calcular R_j^{ET} . No caso geral é necessário tomar em conta todas as diferentes combinações dos sentidos de escoamento nos canais associados a uma câmara da rede. No entanto, tomando em conta que o comportamento hidrodinâmico da rede é controlado pelos canais oblíquos, visto serem estes os únicos cujo sentido de escoamento é comum à direcção em que se impôs o gradiente de pressões na rede, é possível prever quais serão as combinações mais prováveis de sentido de escoamento. Na Figura B.2 são apresentados os casos mais prováveis para os canais oblíquos.

Os sentidos de escoamento nos canais horizontais são fortemente dependentes das dimensões características dos elementos da rede ao nível local.

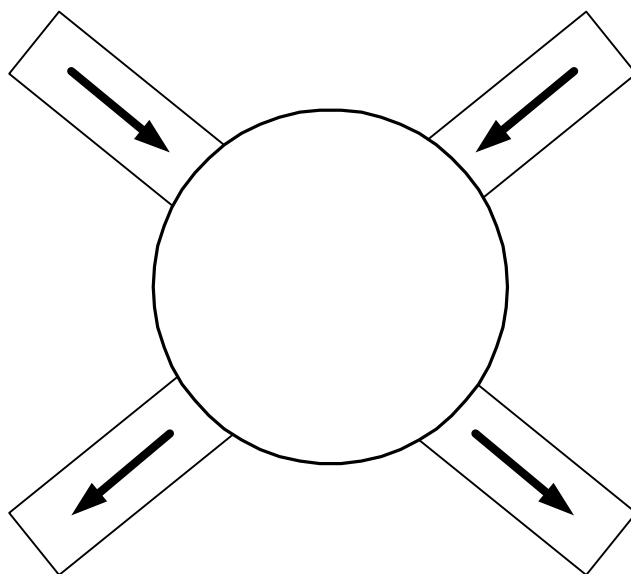


Figura B.2 Sentidos de escoamento esperados para os canais oblíquos da rede, se o gradiente de pressões tiver sido imposto segundo o eixo dos xx (ver Figura 3.5).

Do mesmo modo que para o termo R_j^F (ver Secção 4.3.1), os valores dos termos R_j^{ET} são obtidos escrevendo a equação de Bernoulli entre a interface câmara/canal e a superfície de controlo, SC, definida no interior da câmara. Tomando em conta que o sentido de escoamento na expansão ou contracção, as seguintes expressões podem ser escritas

$$P_j + \frac{\rho v_j^2}{2} = P_i + \frac{\rho v_s^2}{2} + h_{ij}^E, \text{ expansão} \quad (\text{B.2})$$

$$P_i + \frac{\rho v_s^2}{2} = P_{cj} + \frac{\rho v_{cj}^2}{2} + h_{ij}^C, \text{ contracção} \quad (\text{B.3})$$

em que: v_s é a velocidade do fluido na SC entre o VC e o resto da câmara; v_j é a velocidade no canal j ; v_{cj} é a velocidade na *Vena Contracta* associada ao canal; P_i , P_j e P_{cj} são as pressões absolutas na câmara, na interface entre a câmara e o canal de índice j e na *Vena Contracta* associada ao canal j , respectivamente; e h_{ij}^E e h_{ij}^C são os valores da queda de pressão associadas à expansão e à contracção, respectivamente. A partir dos valores dos dois últimos termos é possível obter as expressões pretendidas para o termo R_j^{ET} . De notar que as duas expressões são escritas segundo o sentido de escoamento através da ligação entre a câmara e o canal, quer seja uma expansão ou contracção do escoamento.

Como se referiu atrás, na contracção do escoamento deve ser tomada em conta a existência de uma expansão a seguir à *Vena Contracta*. Esta é modelizada do mesmo modo que uma expansão associada a uma câmara da rede

$$P_{Cj} + \frac{\rho v_{Cj}^2}{2} = P_j + \frac{\rho v_j^2}{2} + h_{ij}^{CE}, \text{ expansão} \quad (\text{B.4})$$

em que h_{ij}^{CE} é a perda de carga na zona de expansão a seguir à *Vena Contracta*. Como a perda de carga em acidentes em série é aditiva, a perda de carga total numa contracção do escoamento, h_{ij}^{CT} , é igual à soma dos valores de h_{ij}^C e h_{ij}^{CE} .

Na literatura (Shames, 1982; White, 1992) é comum calcular a perda de carga adicional associada a acidentes em tubagens, como é caso de expansões ou contracções bruscas da área de secção recta, através de um parâmetro K_j . Este é função das características geométricas e de escoamento dos elementos, devendo ser definidas constantes distintas conforme as ligações entre a câmara e o canal se comporta como uma expansão ou uma contracção. Deste modo, são definidos os parâmetros K_j^E e K_j^{CT} , relacionados com os h_{ij}^E e h_{ij}^{CT} pelas expressões

$$h_{ij}^E = K_j^E \frac{\rho v_s^2}{2}, \text{ expansão} \quad (\text{B.5})$$

$$h_{ij}^{CT} = h_{ij}^C + h_{ij}^{CE} = K_j^{CT} \frac{\rho v_j^2}{2} = (K_j^C + K_j^{CE}) \frac{\rho v_j^2}{2}, \text{ contracção} \quad (\text{B.6})$$

em que K_j^{CT} é dividido em dois termos, K_j^C e K_j^{CE} , associados a cada uma das partes da contracção do escoamento. De notar que na definição de K_j é usado o valor da velocidade após o acidente no escoamento, com excepção do termo associado à parte da contracção entre o centro da câmara e a *Vena Contracta*, em que se usa a velocidade no canal para simplificar a implementação do modelo. O valor da velocidade na SC definida na câmara pode ser determinada facilmente da equação de balanço material, como se vai ver mais à frente.

Usando a Equação B.2, K_j^E é determinado pela expressão

$$K_j^E = \frac{2h_{ij}^E}{\rho v_s^2} = \frac{2}{\rho v_s^2} \left[(P_j - P_i) + \frac{\rho}{2} (v_j^2 - v_s^2) \right] \quad (\text{B.7})$$

Para uma contracção, é conveniente determinar os valores de K_j^C e K_j^{CE} separadamente e somá-los para obter K_j^{CT} . Para a expansão a seguir à *Vena Contracta*, é possível (como se vai ver na Secção B.3.1) determinar uma expressão analítica para este parâmetro, na forma

$$K_j^{CE} = \left(\frac{1}{C_{Cj}} - 1 \right)^2 \quad (\text{B.8})$$

em que C_{Cj} é o coeficiente de contracção associado ao canal j . Este é definido como sendo a razão das áreas da *Vena Contracta* e do canal, na forma

$$C_{Cj} = \frac{A_{Cj}}{A_j} \quad (\text{B.9})$$

Este parâmetro é função das características geométricas e de escoamento antes e depois da contracção. Na literatura é possível encontrar correlações baseadas em dados experimentais que permitem determinar C_{Cj} , tendo-se usado neste trabalho a seguinte correlação (Graebel, 2000)

$$C_{Cj} = 0.602 + 0.370 \left(\frac{d_j}{D_i} \right)^2 \quad (\text{B.10})$$

Para a parte da contracção de escoamento antes da *Vena Contracta*, a seguinte expressão para K_j^C pode ser escrita baseada na Equação B.3

$$K_j^C = \frac{2h_{ij}^C}{\rho v_j^2} = \frac{2}{\rho v_j^2} \left[(P_i - P_{Cj}) + \frac{\rho}{2} (v_s^2 - v_{Cj}^2) \right] \quad (\text{B.11})$$

De notar que na última expressão se considera a pressão na *Vena Contracta* e não na interface entre a câmara e o canal, como se irá ver mais à frente.

Qualquer das expressões obtidas é a soma de dois termos, correspondentes à diferença entre os valores da pressão absoluta e da velocidade do fluido antes e depois da expansão ou contracção da área de secção recta disponível para o escoamento. Estes termos são determinados a partir das equações de conservação de quantidade de movimento e de massa escritas para os VC definidos no interior das câmaras.

Com excepção dos ramos em que o fluido entra ou sai da rede ou de alguns ramos nos lados da rede quando as fronteiras são periódicas, todos possuem duas câmaras nos seus extremos, correspondendo a expansão e uma contracção da área de secção recta disponível para o escoamento. Como a resistência ao escoamento é aditiva, R_j^{ET} pode ser expresso na forma

$$R_j^{ET} = K_j^E \frac{\rho q_s^2}{2A_s^2} + (K_j^C + K_j^{CE}) \frac{\rho q_j^2}{2A_j^2} \quad (\text{B.12})$$

em que q_s é o caudal volumétrico que atravessa a SC no interior da câmara, A_s é a área da SC entre o VC e o resto da câmara e A_j é a área de secção recta dos canais. Ao contrário do modelo ICAM, em que R_j^{ET} é determinado apenas com base no diâmetro e na velocidade observada no canal associado à câmara, na Equação B.12 é tomada em conta a influência dos diâmetros das câmaras, através do primeiro termo da soma. Uma das vantagens deste modelo é a determinação dos valores de $\sum K_j$ a partir das características geométricas e do escoamento ao nível local. Comparando a equação B.12 com as expressões obtidas para R_j^F (ver Secção 4.3.1), observa-se a mesma dependência do diâmetro dos canais, em particular com a expressão obtida para escoamento em regime laminar.

As equações de balanço material e de quantidade de movimento permitem obter expressões para as diferenças entre os valores das pressões absolutas e das velocidades entre as ligações câmara/canal e a SC definida no interior das câmaras. Desprezando os efeitos das forças de corpo, neste caso devido à influência da gravidade, os dois tipos de equações de balanço são escritas na forma (Shames, 1982)

$$\oiint_{SC} \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{A} = 0 \quad (\text{B.13})$$

$$\oiint_{SC} \mathbf{T} dA + \iiint_{VC} \mathbf{B} \rho dV = \oiint_{SC} \mathbf{v} (\rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{A}) \quad (\text{B.14})$$

em que $\mathbf{T}$ é um vector representando as forças exercidas na superfície de controlo, correspondente apenas à força exercida pelas pressões; $\mathbf{B}$ é o vector das forças de corpo, correspondentes à acção da gravidade sobre o fluido que se encontra no interior do VC; e $\mathbf{v}$ é a velocidade do fluido, na forma vectorial. A equação de conservação de quantidade de movimento é uma equação vectorial, podendo ser desdobrada em duas equações, para cada

uma das componentes das forças que se exercem no VC e SC. Como as forças exercidas pela pressão apenas se encontram na Equação B.14), é a partir desta que o termo da diferença entre as pressões absolutas é obtido. O termo da diferença entre os quadrados das velocidades no canal e no interior da câmara é obtido da equação de balanço material.

Nas secções seguintes são analisados primeiro os casos dos canais oblíquos em que o sentido de escoamento é igual ao representado na Figura B.2. Para redes sem canais horizontais, com distribuições das dimensões características dos elementos da rede com valores baixos do desvio padrão e sem remoção de câmaras e/ou canais (distribuição de valores de C_i praticamente uniforme), é pouco provável que o sentido de escoamento nos canais oblíquos seja diferente do apresentado na Figura B.2.

B.3.1 Canais oblíquos de entrada de fluido associados à parte de cima de uma câmara

Nesta secção são determinadas as expressões associadas a entradas de fluido numa câmara, estando o canal associado a um canal oblíquo da rede e a ligação câmara/canal associada ao topo de câmara. De acordo com a Figura B.2, estas são as condições usuais em que o fluido entra na câmara a partir de canais oblíquos. Nas secções seguintes é analisado inicialmente o caso geral, correspondente à situação em que existem dois canais de entrada de fluido associados à parte de cima da câmara. Dois casos simplificados são analisados de seguida, correspondentes a uma rede uniforme e a um só canal de entrada de fluido na câmara, em que é possível simplificar a análise do comportamento da entrada de fluido e para o segundo caso, comparar os valores previstos com expressões analíticas.

B.3.1.1 Caso geral

Os VC definidos para analisar este caso sem apresentados na Figura B.3, em que as variáveis usadas na escritas das equações de conservação de massa e de quantidade de movimento são também apresentadas. Na definição da SC no interior da câmara a existência ou não de canais horizontais associado à câmara deve ser tomada em conta, embora esta característica não modifique a forma das equações de balanço.

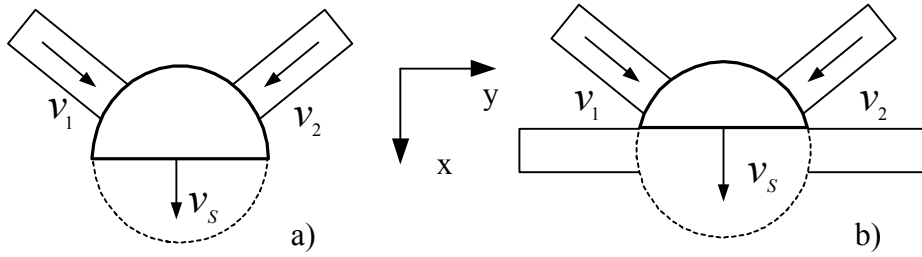


Figura B.3 Volume de Controlo para os canais oblíquos de entrada de fluido na câmara: a) sem canais horizontais, b) com canais horizontais.

A equação de balanço material pode ser escrita na forma

$$\rho v_s A_s = \rho v_1 A_1 + \rho v_2 A_2 \quad (\text{B.15})$$

em que A_1 e A_2 representam as áreas de secção recta dos canais 1 e 2 respectivamente. Como ρ é constante, a seguinte expressão geral é obtida para v_s

$$v_s = \frac{v_1 A_1 + v_2 A_2}{A_s} \quad (\text{B.16})$$

O valor de A_s é função do diâmetro da câmara e da existência ou não de canais horizontais associados a esta. Se não existirem canais horizontais associados à câmara, a SC é definida no centro da câmara, como se mostra na Figura B.3a, obtendo-se então

$$A_s = \frac{\pi D_i^2}{4} \quad (\text{B.17})$$

Quando existem canais horizontais a uma câmara, a SC deve ser definida de modo que o número de equações linearmente independentes seja igual ao número de incógnitas. Se os canais horizontais fossem incluídos no VC, o número de incógnitas seria de cinco, correspondentes a quatro diferenças de pressão nas interface câmara/canal e uma velocidade definida na SC definida no interior da câmara, valor superior ao número de equações linearmente independentes. Deste modo, o VC deve ser definido de modo a não incluir os canais horizontais, reduzindo o número de incógnitas para três, tendo sido seleccionada o VC definido na Figura B.3b, resultando na seguinte expressão para A_s

$$A_s = \frac{\pi}{4} \left[D_i^2 - (d_i^{max})^2 \right] \quad (\text{B.18})$$

em que $d_i^{\max}$ é igual ao diâmetro do maior canal horizontal associado à câmara, na forma

$$d_i^{\max} = \text{Max}(d_5, d_6, 0) \quad (\text{B.19})$$

Ao escrever as equações de conservação de quantidade de movimento, deve-se ter cuidado especial com a área que deve ser associada ao escoamento através dos canais da rede. Na literatura (Shames, 1982; Munsoon *et al.*, 1998) assume-se que, para a situação análoga em que ocorre uma expansão súbita do escoamento (ver Figura B.1), a pressão na zona em expansão não varia apreciavelmente na zona de expansão, podendo ser considerada como constante. Então, a pressão à saída do canal e na SC no interior da câmara são aproximadamente iguais. Deste modo, o termo de força derivado da pressão absoluta observada na interface entre a câmara e o canal exerce-se na parte da SC no interior da câmara e não na parte da SC definida na interface entre as duas zonas de escoamento.

Por outro lado, no caso geral existem dois canais associados à câmara e cada um destes faz um ângulo com a vertical igual a θ . Cada um destes corresponde a um termo de pressão que se exerce na SC definida no interior da câmara. Para que as expressões obtidas para R_j^{ET} verifiquem a condição limite de tender para zero quando a velocidade do fluido na rede tende para zero. A cada um deles deve-se considerar um termo equivalente mas baseado no valor da pressão absoluta no interior da câmara. Para o caso mais simples em existe apenas um canal de entrada associado ao VC, apenas é necessário considerar um termo, de modo a verificar esta condição limite.

De acordo com as considerações anteriores, as equações de conservação de quantidade de movimento para as duas componentes espaciais são escritas na seguinte forma.

$$P_1 A_S \cos \theta + P_2 A_S \cos \theta - 2 P_i A_S \cos \theta = \alpha_1 \quad (\text{B.20})$$

$$P_1 A_S \sin \theta - P_2 A_S \sin \theta = \alpha_2 \quad (\text{B.21})$$

em que α_1 e α_2 são dadas pelas expressões

$$\alpha_1 = \rho [v_S^2 A_S - (v_1^2 A_1 + v_2^2 A_2)] \cos \theta \quad (\text{B.22})$$

$$\alpha_2 = \rho (v_2^2 A_2 - v_1^2 A_1) \sin \theta \quad (\text{B.23})$$

Se as equações de conservação de quantidade de movimento forem expressas em função de $(P_1 - P_i)$ e $(P_2 - P_i)$, formam um sistema de equações lineares na forma

$$(P_1 - P_i)A_s \cos \theta + (P_2 - P_i)A_s \cos \theta = \alpha_1 \quad (\text{B.24})$$

$$(P_1 - P_i)A_s \sin \theta - (P_2 - P_i)A_s \sin \theta = \alpha_2 \quad (\text{B.25})$$

As soluções do sistema de equações linear formado pelas Equações B.24 e B.25 podem ser escritas na seguinte forma geral

$$(P_j - P_i) = \frac{\rho v_s^2}{2 \cos \theta} - \rho v_j^2 \frac{A_j}{A_s} \quad (\text{B.26})$$

Quando a velocidade do fluido na rede tende para zero, os valores de v_1 e v_2 tendem para zero, e aplicando a Equação B.16, v_s também tende para zero. Deste modo, as diferenças entre as pressões nas interfaces câmara/canal e o interior da câmara devem também tender para zero, visto que influência da gravidade no escoamento foi desprezada. Os valores previstos pela Equação B.26 verificam esta condição limite.

De acordo com a Equação B.7, é conveniente obter expressões de $(P_1 - P_i)$ e de $(P_2 - P_i)$ em função de v_s , o que é feito usando a equação de conservação de massa. Para o caso geral em que as velocidades v_1 e v_2 são diferentes, não é possível exprimi-las apenas como função de v_s . Como o parâmetro K_j^E é definido em termos de $v_s^2/2$, é conveniente por este factor em evidência, obtendo-se as seguintes expressões

$$(P_1 - P_i) = \frac{\rho v_s^2}{2} \left[\frac{1}{\cos \theta} - 2 \left(\frac{v_1}{v_s} \right)^2 \frac{A_1}{A_s} \right] \quad (\text{B.27})$$

$$(P_2 - P_i) = \frac{\rho v_s^2}{2} \left[\frac{1}{\cos \theta} - 2 \left(\frac{v_2}{v_s} \right)^2 \frac{A_2}{A_s} \right] \quad (\text{B.28})$$

O termo da diferença entre os quadrados das velocidades nos canais é determinado do mesmo modo, colocando em evidência $v_s^2/2$. Substituindo as expressões obtidas na Equação B.7, os parâmetros K_1^E e K_2^E são definidos pelas expressões

$$K_1^E = \frac{1}{\cos\theta} + \left(\frac{v_1}{v_s}\right)^2 \left(1 - 2\frac{A_1}{A_s}\right) - 1 \quad (\text{B.29})$$

$$K_2^E = \frac{1}{\cos\theta} + \left(\frac{v_2}{v_s}\right)^2 \left(1 - 2\frac{A_2}{A_s}\right) - 1 \quad (\text{B.30})$$

Nas expressões obtidas é clara a influência das características geométricas e de escoamento ao nível local. De notar que as expressões anteriores permitem determinar apenas termos de R_j^{ET} associado à entrada de fluido na câmara, de acordo com a Equação B.12.

B.3.1.2 Caso simplificado de apenas um canal de entrada de fluido na câmara

Na situação em que existe apenas um canal de entrada de fluido na câmara associado à parte de cima desta, é possível comparar as expressões obtidas com expressões analíticas disponíveis na literatura. Esta situação pode ocorrer nas câmaras associadas aos lados da rede quando as fronteiras são não periódicas ou ocorre remoção de câmaras e/ou canais da rede. Na Figura B.4 é possível observar esta situação para um canal de índice 1. O caso de um canal de tipo 2 é similar ao canal de tipo 1, pelo que apenas se vai deduzir a expressão de K_1^E . Para K_1^E basta apenas substituir o índice 1 por 2.

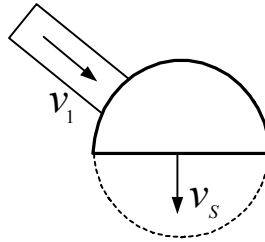


Figura B.4 Caso limite de apenas uma entrada de fluido na câmara.

Apenas é necessário escrever as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento segundo uma das direcções, tendo-se usado a equação dos componentes segundo o eixo dos xx . Como existe apenas um canal de entrada, a constante do termo associado à força exercida pela pressão absoluta sentida no interior da câmara passa de dois para um, de modo a verificar a condição limite quando a velocidade de escoamento tende para zero.

$$P_1 A_s \cos\theta - P_i A_s \cos\theta = \alpha_1 \quad (\text{B.31})$$

$$v_1 A_1 = v_s A_s \quad (\text{B.32})$$

em que α_1 é definido agora pela expressão

$$\alpha_1 = \rho[v_s^2 A_s - v_1^2 A_1 \cos \theta] \quad (\text{B.33})$$

Neste caso já é possível exprimir K_1^E em função das características geométricas da câmara e do canal, obtendo-se a expressão

$$K_1^E = \frac{2}{\cos \theta} - 1 + \left(\frac{A_s}{A_1} \right) \left[-2 + \left(\frac{A_s}{A_1} \right) \right] \quad (\text{B.34})$$

O caso limite em que $\theta = 0$ é equivalente a uma expansão simples da área de secção recta disponível para o escoamento, sendo possível obter uma expressão analítica de K_1^E equivalente à apresentada na literatura (Shames, 1982)

$$K_1^E = \left(\frac{A_s}{A_1} - 1 \right)^2 \quad (\text{B.35})$$

B.3.1.3 Rede uniforme

Outro caso simplificado ocorre quando a rede possui fronteiras periódicas e as distribuições das dimensões características dos elementos da rede são pontuais (ou seja, apenas tomam um valor). Nestas condições, as velocidades do fluido nos canais oblíquos são iguais (ver Secção 4.4.3), permitindo simplificar a análise do problema. Como $v_1 = v_2$, obtém-se $\alpha_2 = 0$ e $P_1 = P_2$. Deste modo, as componentes das forças exercidas segundo o eixo dos yy compensam-se e é apenas necessário tomar em conta as componentes das forças segundo o eixo dos xx . Assumindo $v_1 = v_2 = v$, $A_1 = A_2 = A$ e $P_1 = P_2 = P$, as equações de conservação de massa e de quantidade de movimento podem ser escritas na seguinte forma

$$2(P - P_i)A_s \cos \theta = \alpha_1 \quad (\text{B.36})$$

$$2vA = v_s A_s \quad (\text{B.37})$$

$$\alpha_1 = \rho[v_s^2 A_s - 2v^2 A \cos \theta] \quad (\text{B.38})$$

Visto que as velocidades nos canais são iguais, $K_1^E = K_2^E$. Resolvendo o sistema de equações, a seguinte expressão geral para K_1^E é obtida

$$K_1^E = \frac{A_s}{2A} \left[\frac{1}{2} \frac{A_s}{A} - 1 \right] + \frac{1}{\cos \theta} - 1 \quad (\text{B.39})$$

A expressão obtida é função apenas das características geométricas da rede, visto que nesta situação o comportamento dos ramos da rede é independente da sua posição na rede (ver Secção 4.4.3).

B.3.2 Canais oblíquos de saída de fluido pela parte de baixo de uma câmara

Nesta secção segue-se a mesma ordem da Secção B.3.1 para a análise dos três casos considerados, tomando-se agora em conta que os canais de saída da câmara se encontram na parte de baixo da câmara, de acordo com a Figura B.2.

B.3.2.1 Caso geral

Como se conclui anteriormente, o escoamento numa expansão deve ser dividida em duas partes, conforme o fluido se encontra antes ou depois da *Vena Contracta*. A situação após a *Vena Contracta* corresponde ao caso analisado na Secção B.3.1.2, em que $\theta = 0$, sendo K_j^{CE} determinado usando a equação B.8, e independente do número e disposição dos canais associados à câmara.

As expressões para os termos K_j^C são determinados aplicando a mesma estratégia usada para as expansões do escoamento, tendo sido definidos os VC apresentados na Figura B.5.

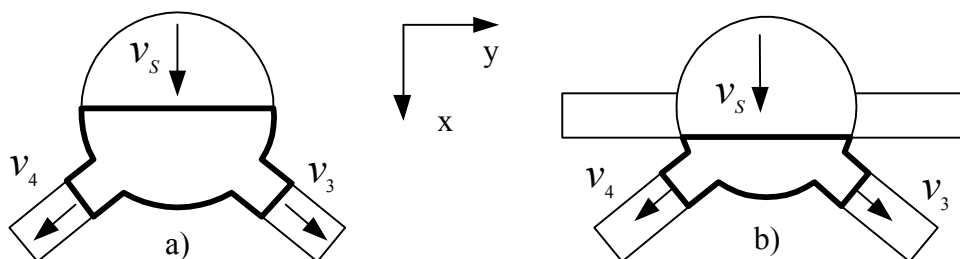


Figura B.5 Volume de Controlo para os canais oblíquos de saída de fluido na câmara: a) sem canais horizontais, b) com canais horizontais.

De notar que a SC associada ao canal não está definida na interface entre a câmara e o canal, mas sim na posição em que a área de escoamento no canal é menor, ou seja, encontra-se na *Vena Contracta*. Deste modo, a velocidade do fluido a utilizar na escrita das equações de balanço é a velocidade do fluido na *Vena Contracta* e não a velocidade observada no canal.

As duas velocidades podem ser relacionadas através do balanço de massa na zona de expansão após a *Vena Contracta*, obtendo-se a seguinte relação

$$v_{Cj} A_{Cj} = v_j A_j \Rightarrow v_{Cj} = \frac{v_j}{C_{Cj}} \quad (\text{B.40})$$

Deste modo, é possível usar v_j na determinação dos valores de K_j^C e não a velocidade do fluido na *Vena Contracta*, simplificando a implementação e a utilização do modelo. Como no caso da entrada do fluido na câmara, coloca-se a questão de se saber qual é a área que deve ser usada para determinar os termos das forças de pressão que se exercem na SC, tendo-se considerado que estas se exerciam na área definida pela *Vena Contracta*. Como o VC é definido também no interior dos canais, a força exercida pela pressão na SC apenas se faz sentir na *Vena Contracta*. De modo a verificar a condição limite de R_j^{ET} tender para zero quando a velocidade do fluido tende para zero, o número de termos associados à pressão associados com a pressão absoluta no interior da câmara é igual ao número de canais de saída de fluido. A SC no interior da câmara toma em conta a existência ou não de canais horizontais associados à câmara do mesmo modo que na secção anterior.

Substituindo a Equação B.40 na expressão que define K_j^C , Equação B.11, é possível definir o valor deste parâmetro em termos das velocidades do fluido na SC definida no centro da câmara e no canal (não na *Vena Contracta*), na forma

$$K_j^C = \frac{2h_{ij}^C}{\rho v_j^2} = \frac{2}{\rho v_j^2} \left[(P_i - P_{Cj}) + \frac{\rho}{2} \left(v_s^2 - \frac{v_j^2}{C_{Cj}^2} \right) \right] \quad (\text{B.41})$$

Tendo em conta estes aspectos, as equações de balanço podem ser escritas na forma

$$-P_{C3} A_3 C_{C3} \cos \theta - P_{C4} A_4 C_{C4} \cos \theta + P_i A_3 C_{C3} \cos \theta + P_i A_4 C_{C4} \cos \theta = \alpha_3 \quad (\text{B.42})$$

$$-P_{C3} A_3 C_{C3} \sin \theta + P_{C4} A_4 C_{C4} \sin \theta = \alpha_4 \quad (\text{B.43})$$

$$\rho v_s A_s = \rho v_3 A_3 + \rho v_4 A_4 \quad (\text{B.44})$$

em que as pressões P_{Cj} são os valores da pressão absoluta observada na *Vena Contracta*, e α_3 e α_4 são constantes definidas pelas seguintes expressões

$$\alpha_3 = \rho \left[\left(\frac{v_3^2}{C_{C3}} A_3 + \frac{v_4^2}{C_{C4}} A_4 \right) \cos \theta - v_s^2 A_s \right] \quad (\text{B.45})$$

$$\alpha_4 = \rho \left(\frac{v_3^2}{C_{C3}} A_3 - \frac{v_4^2}{C_{C4}} A_4 \right) \sin \theta \quad (\text{B.46})$$

A definição de C_{Cj} , Equação B.9), foi usada na escrita das equação de balanço material e de quantidade de movimento, de modo a reduzir o número de variáveis a definir na implementação do modelo.

Resolvendo o sistema de equações lineares formado pelas equações de conservação de quantidade de movimento escritas em função de $(P_i - P_{Cj})$, as soluções do sistema podem ser escritas na forma

$$(P_i - P_{Cj}) = \frac{\rho v_j^2}{C_{Cj}^2} - \frac{\rho v_s^2 A_s}{2 A_j C_{Cj} \cos \theta} \quad (\text{B.47})$$

Colocando em evidência v_j^2 , aplicando a equação de balanço material para obter expressões para o termo da diferença entre os quadrados dos valores da velocidade e tomando em conta que a expressão geral para K_j^{CT} é formada por dois termos (Equação B.11), obtém-se

$$K_j = K_j^C + K_j^{CE} = \left[\frac{1}{C_{Cj}^2} + \left(\frac{v_s}{v_j} \right)^2 \left(1 - \frac{A_s}{A_j C_{Cj} \cos \theta} \right) \right] + \left(\frac{1}{C_{Cj}} - 1 \right)^2 \quad (\text{B.48})$$

Como no caso das entradas do fluido, K_j^{CT} é no caso geral função não apenas das características geométricas dos elementos da rede mas também do escoamento através destes.

B.3.2.2 Caso em que existe apenas um canal de saída de fluido da câmara

Como na Secção B.3.1.2, a análise deste caso requer escrever apenas a equação de conservação de massa e de quantidade de movimento segundo o eixo dos xx , sendo estas escritas na forma

$$-P_{C3} A_3 C_{C3} \cos \theta + P_i A_3 C_{C3} \cos \theta = \alpha_3 \quad (\text{B.49})$$

$$\rho v_s A_s = \rho v_3 A_3 \quad (\text{B.50})$$

em que α_3 é definido pela expressão

$$\alpha_3 = \rho \left[\frac{v_3^2}{C_{C3}} A_3 \cos \theta - v_s^2 A_s \right] \quad (\text{B.51})$$

Assumiui-se que o fluido sai da câmara através do canal de índice 3. No caso do canal com índice 4, as expressões obtidas são equivalentes, bastando apenas mudar o índice associado ao canal de 3 para 4.

Resolvendo a equação de conservação de quantidade de movimento na determinação dos termos da diferença entre as pressões absolutas, e aplicando a equação de balanço material para exprimir v_s em função de v_3 , obtém-se a seguinte expressão para K_3^{CT}

$$K_3^{CT} = K_3^C + K_3^{CE} = \left[\frac{1}{C_{C3}} + \frac{A_3}{A_s} \left(\frac{A_3}{A_s} - \frac{2}{C_{C3} \cos \theta} \right) \right] + \left(\frac{1}{C_{C3}} - 1 \right)^2 \quad (\text{B.52})$$

Como era esperado, a expressão obtida é função apenas das características geométricas das câmaras e canais associados entre si. Ao contrário da expressão para uma expansão simples (ver Secção B.3.1.2), não existe na literatura nenhuma expressão analítica que permita determinar a validade da análise efectuada.

B.3.2.3 Rede uniforme

O outro caso simplificado ocorre quando a rede é uniforme, em que se verificam as seguintes condições: $A_3 = A_4 = A$, $v_3 = v_4 = v$ e $K_3^{CT} = K_4^{CT}$. Deste modo, as equações de balanço simplificam-se, passando a ter a seguinte forma

$$2(P_i - P_c) A C_c \cos(\theta) = \alpha_3 \quad (\text{B.53})$$

$$\rho v_s A_s = 2 \rho v A \quad (\text{B.54})$$

em que α_3 é definido pela expressão

$$\alpha_3 = \rho \left[2 \frac{v^2}{C_c} A \cos \theta - v_s^2 A_s \right] \quad (\text{B.55})$$

Utilizando a mesma estratégia usada na secção, a seguinte expressão para K_3^{CT} é obtida

$$K_j^{CT} = \left[\frac{1}{C_{Cj}^2} + 4 \frac{A_j}{A_s} \left(\frac{A_j}{A_s} - \frac{1}{C_{Cj} \cos \theta} \right) \right] + \left(\frac{1}{C_{Cj}} - 1 \right)^2 \quad (\text{B.56})$$

Como era esperado, as expressões obtidas apenas dependem das características geométricas das câmaras e dos canais associados entre si.

B.3.3 Análise das Expressões Obtidas

Nas secções anteriores foram analisadas as situações mais comuns associadas ao escoamento através dos canais oblíquos. Tomando em conta que são estes canais os únicos em que o sentido de escoamento possui uma componente não nula segundo a direcção em que se impõe o gradiente macroscópico de pressão na rede, o comportamento hidrodinâmico da rede vai depender sobretudo do comportamento destes. Como o comportamento dos ramos da rede é caracterizado pelo termo R_j , é necessário analisar como é que as características geométricas e do escoamento ao nível local influenciam o valor deste parâmetro

Nos modelos ICAM e FRIC os valores de R_j dependem apenas do diâmetros dos canais associados aos ramos da rede. No modelo IQM são também tomados em conta os valores dos diâmetros das câmaras nos extremos dos ramos da rede, o posicionamento relativo entre as câmaras e os canais e os caudais nos canais associados entre si numa câmara da rede. Como toma em conta mais informação geométrica e do escoamento, o modelo IQM deverá ser mais adequado para descrever o escoamento através da rede de câmaras e canais.

Ao contrário dos modelos ICAM, em que os valores de K_j são constantes e maiores que zero, no modelo IQM existe a possibilidade dos valores de K_j previstos puderem ser menores que zero, resultando em valores de R_j^{ET} negativos. Esta possibilidade deve ser tomada em conta pelo simulador hidrodinâmico, como se vai ver na secção seguinte.

Em condições de escoamento laminar, em que os termos R_j^F e R_j^{EL} são dominantes, o facto de R_j^{ET} poder ser menor que zero não é significativo, podendo-se considerar que o escoamento nos ramos da rede pode ser descrito como sendo puramente resistivo. No entanto, do mesmo modo que no modelo ICAM, quando mais elevada for a velocidade de escoamento

através da rede, mais significativos serão os termos associados às ligações entre as câmaras e os canais, sendo dominantes para condições de escoamento não linear perfeitamente desenvolvido. Nestas condições, o facto de R_j^{ET} poder ser menor ou maior que zero pode ser significativa na caracterização do escoamento e na implementação do algoritmo adequado para a resolução do sistema de equações.

No caso geral, os valores de K_j dependem dos valores dos diâmetros das câmaras e dos canais associados entre si e dos valores dos caudais volumétricos nos canais associados à câmara em que os valores deste parâmetro estão a ser calculados. De modo a simplificar a análise do problema, considerou-se o caso limite de uma rede uniforme, em que as distribuições das dimensões características dos elementos da rede são pontuais e as fronteiras são periódicas. Nestas condições, as expressões de K_j são função apenas dos valores de D e d (ver Secções B.3.1.3 e B.3.2.3). Apesar das conclusões obtidas apenas terem um carácter qualitativo, se as distribuições das dimensões características dos elementos da rede não forem muito largas estas mesmo para o caso geral.

B.3.3.1 Análise das expressões obtidas para a entrada de fluido de uma câmara

Como se conclui anteriormente, determinar em que condições $K_j^E \leq 0$ é importante na implementação do modelo IQM. Para uma expansão do fluido na entrada de uma câmara, aplicando a Equação B.39 para o caso $K_j = 0$, obtém-se a seguinte equação geral válida para uma rede uniforme

$$\frac{1}{4} \left(\frac{A_s}{A} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{A_s}{A} \right) + \left(\frac{1}{\cos \theta} - 1 \right) = 0 \quad (\text{B.57})$$

Efectuando a mudança de variável $y = A_s/A$, a equação anterior pode ser expressa como uma equação de segunda ordem, na forma

$$\frac{1}{4} y^2 - \frac{1}{2} y + \left(\frac{1}{\cos \theta} - 1 \right) = 0 \quad (\text{B.58})$$

As soluções da equação anterior correspondem aos zeros de uma parábola com a concavidade virada para cima. Esta função admite zeros se a seguinte condição for verificada

$$\frac{1}{4} - \left(-1 + \frac{1}{\cos \theta} \right) \geq 0 \Rightarrow \cos \theta \leq \frac{4}{5} \quad (\text{B.59})$$

De acordo com as propriedades da função coseno, apenas quando $\theta \leq \arccos(4/5)$ (ou seja $\theta \leq 36.87^\circ$) é que a Equação B.58 possui soluções reais. De acordo com os valores possíveis de θ obtidos com base nas restrições impostas ao gerador da rede (ver Secção 3.4.8) e os valores previstos deste parâmetro com base na analogia entre a estrutura da rede e a tortuosidade de um meio poroso, θ deve tomar um valor entre $\pi/4$ e $\pi/3$ radianos. Deste modo, para uma rede uniforme na gama de valores usual de θ o modelo IQM prevê valores de R_j^{ET} maiores que zero, correspondendo portanto a entrada do fluido de um canal numa câmara a um termo de resistência ao escoamento.

Se o valor de θ for inferior a $\arccos(5/4)$, as raízes da Equação B.58 são expressas na seguinte forma geral

$$y = 2 \left[\frac{1}{4} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \left(\frac{1}{\cos \theta} - 1 \right)} \right] \quad (\text{B.60})$$

No limite em que o termo debaixo da raiz quadrada é igual a zero, a equação anterior prevê $y = 1/2$, encontrando-se a gama de valores em que K_j^E é menor que zero centrada nesse ponto. Para redes sem canais horizontais, y é igual à razão entre o diâmetro da câmara e dos canais oblíquos associados entre si, permitindo desde modo estimar qual é a gama de valores das dimensões características dos elementos da rede em que o termo R_j^{ET} deve ser tomado como uma fonte de tensão e não uma resistência ao escoamento. Para esse tipo de redes, de acordo com as restrições existentes entre as câmaras e os canais da rede, y apenas pode tomar valores maiores que 1. Deste modo, apenas para valores de θ baixos é que os valores de K_j^E devem ser menores que zero. Quando existem canais horizontais associados à câmara, é necessário toma-los em conta na definição de A_s . De acordo com a definição deste parâmetro (ver Secção B.3.1.1), se o diâmetro dos canais horizontais for próximo do valor do diâmetro da câmara, é possível que A_s seja menor que A , implicando que é possível existirem valores de y menores que 1.

Na Figura B.6 são apresentados e comparados entre si os valores previstos de K_j^E em função da razão d/D para dois valores de θ significativos, $\pi/4$, associados às curvas em tracejado, e $\pi/3$, correspondente às curvas a cheio. Os valores previstos para redes com e sem canais horizontais são comparados, com o objectivo de determinar a influência da estrutura da rede no comportamento das ligações entre as câmaras e os canais quando estas se comportam como expansões. Para os valores dos parâmetros geométricos usados na figura observa-se que K_j^E é sempre maior que zero, relevando que nestas condições as expansões se comportam como termos de resistência e não como fontes de tensão. Para valores baixos da razão d/D observa-se que os valores previstos do parâmetro K_j^E são independentes da estrutura da rede, em particular de θ . Quando maior é d/D menor é K_j^E . Como a variação da área de secção recta na entrada do fluido na câmara diminui quando maior for a razão entre os diâmetros da câmara e do canal associados entre si, as variações de velocidade do fluido são menores e a perda de carga também.

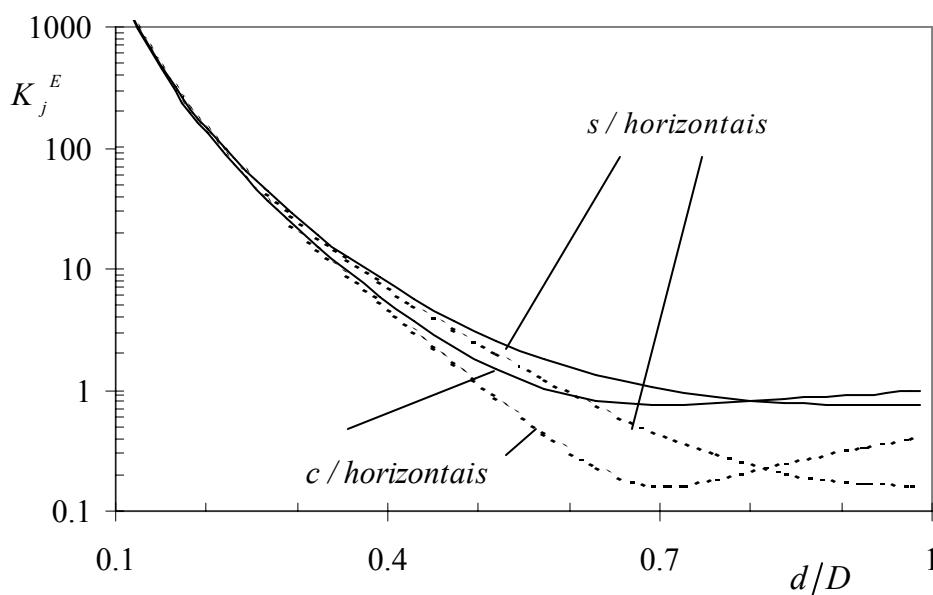


Figura B.6 Valores previstos de K_j^E em função de d/D para uma entrada de fluido numa câmara da rede para uma rede uniforme, para dois valores de θ : $\pi/4$ (curvas a tracejado), e $\pi/3$ (curvas a cheio).

Apenas quando a razão d/D tende para um é que a estrutura influencia o comportamento previsto pelo modelo. Para redes sem canais horizontais os valores de K_j^E tendem para um valor constante. Este depende do número de canais de entrada de fluido na câmara associados

à parte de cima da câmara. Na situação em que existe apenas um canal, situação analisada na Secção B.3.1.2, o valor limite é zero. Para o caso em que existem dois canais, o valor limite é pequeno mas superior a zero, o que pode ser devido à mistura entre as correntes de entrada de fluido na câmara.

Para valores elevados da razão d/D comportamentos diferentes são observados para redes com e sem canais horizontais. No último caso, observa-se que se alcança um valor limite, superior a zero. Apesar de se esperar que na situação limite $d/D = 1$, $K_j^E = 1$, visto que não ocorre variação da velocidade de fluido ao entrar na câmara, de acordo com as Equações B.34 e B.39, o valor limite é função de θ , sendo maior que um e dependente do número de canais de entrada de fluido associados à parte de cima da câmara. As diferenças são devidas à mistura do fluido na câmara e à necessidade deste mudar de direcção na câmara de modo a entrar nos canais de saída da câmara.

B.3.3.2 *Análise das expressões obtidas para a saída do fluido de uma câmara*

Como na secção anterior, a análise do comportamento da saída do fluido de uma câmara para um canal vai ser efectuada para uma rede uniforme. Usando a Equação B.56, $K_j^{CT} = 0$ desde que se verifique a seguinte condição

$$4\left(\frac{A}{A_s}\right)^2 - \frac{4}{C_c \cos \theta} \left(\frac{A}{A_s}\right) + \left[\left(\frac{1}{C_c} - 1\right)^2 + \frac{1}{C_c^2}\right] = 0 \quad (\text{B.61})$$

Como C_c é função dos diâmetros das câmaras e dos canais associados entre si, as soluções apenas podem ser obtidas numericamente. Assumindo que C_c é constante e fazendo a mudança de variável $z = (A/A_s)$, a seguinte equação quadrática é obtida

$$4z^2 - \frac{4}{C_c \cos \theta} z + \left[\left(\frac{1}{C_c} - 1\right)^2 + \frac{1}{C_c^2}\right] = 0 \quad (\text{B.62})$$

Como na situação de uma expansão da área de secção recta do escoamento (analisada na secção anterior) as raízes da equação anterior correspondem aos zeros de uma parábola virada para cima, sendo os valores de K_j^{CT} menores que zero no intervalo definido por estes. As soluções da equação quadrática podem ser expressas na seguinte forma

$$z = \frac{1}{2C_c \cos \theta} \left[1 \pm \sqrt{1 - (2 - 2C_c + C_c^2) \cos^2 \theta} \right] \quad (\text{B.63})$$

A equação anterior admite raízes reais desde que a seguinte condição seja verificada

$$1 - (2 - 2C_c + C_c^2) \cos^2 \theta \geq 0 \quad (\text{B.64})$$

Assumindo ainda que $C_c = 1$, o que significa que não se forma *Vena Contracta* na saída do fluido da câmara, a expressão anterior reduz-se à forma

$$z = \frac{1 \pm \sin \theta}{2 \cos \theta} \quad (\text{B.65})$$

A expressão anterior mostra que para a gama usual de valores de θ , definida pelas restrições impostas ao gerador da rede e pela analogia entre a tortuosidade de um meio poroso e a estrutura da rede, existem raízes reais da Equação B.63. Estas são maiores que zero e definem um intervalo centrado em $z = 1$. Nessa gama de valores de z , proporcional à razão entre os diâmetros da câmara e dos canal associados entre si, os valores de K_j^{CT} são menores que zero, representando os termos R_j^{ET} associados à contracção do escoamento quando o fluido sai da rede fontes de tensão. Mesmo no caso geral em que C_c é menor que um e função dos diâmetros das câmara e dos canais, vai existir uma gama de valores de z em que K_j^{CT} é menor que zero.

Na Figura B.7 são apresentados e comparados entre si os valores previstos de K_j^{CT} em função da razão d/D , para as mesmas condições consideradas na Figura B.6. Comparando os valores previstos para o termo K_j^E , observa-se do mesmo modo que para valores baixos de d/D que a influência da estrutura da rede não é significativa. Ao contrário da Figura B.6, os valores de K_j^{CT} tendem para um valor constante. Nestas condições geométricas, o comportamento das contracções do escoamento dependem apenas do valor do coeficiente de contracção. Como a correlação usada neste trabalho prevê um valor constante para este parâmetro, este comportamento era esperado.

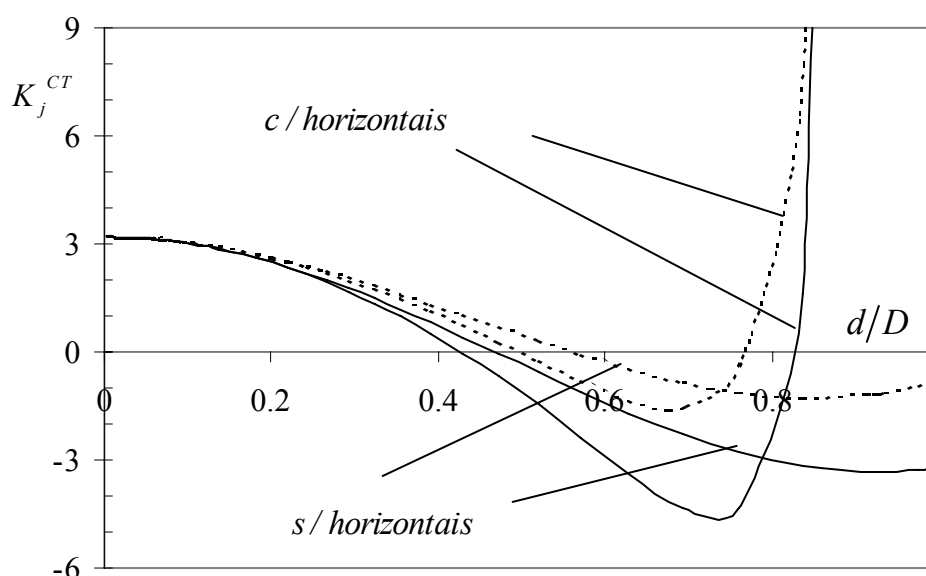


Figura B.7 Valores previstos de K_j^{CT} em função de d/D para uma entrada de fluido numa câmara da rede para uma rede uniforme, para dois valores de θ : $\pi/4$ (curvas a tracejado), e $\pi/3$ (curvas a cheio)

Como na situação das expansões do escoamento (ver Figura B.6), o aumento da razão entre o diâmetro das câmaras e dos canais resulta numa diminuição da resistência associada às contracções do escoamento, resultado esperado pois as variações de velocidade são cada vez menos acentuadas. De acordo com as conclusões anteriores, os valores de K_j^{CT} tornam-se menores que zero para um dado d/D , que é função de θ e das características geométricas da rede. Para valores elevados de d/D , a área de escoamento total associada aos canais de saída de fluido é superior à área interior da câmara. Deste modo, a resistência ao escoamento é menor para os canais de saída do que no interior da câmara, de acordo com os resultados obtidos.

Para redes sem canais horizontais e para valores elevados de d/D K_j^{CT} tende para um valor constante. Nestas condições, as variações da área de secção recta dos canais de saída é pouco significativa, resultando em variações pouco significativas da resistência ao escoamento associada às ligações entre as câmaras e os canais de saída. No entanto, para redes com canais horizontais, K_j^{CT} passa por um mínimo. Este comportamento é fisicamente incorrecto pois prevê que a resistência ao escoamento aumente quando a área de saída aumenta. Como no caso limite estudado na secção anterior a variação de velocidade do fluido ao entrar no canal é menor, devendo então a resistência ao escoamento diminuir. Em conjunto com as conclusões

da secção anterior, é possível concluir que o modelo completo, no estado actual de desenvolvimento, não é válido para redes com canais horizontais.

B.3.3.3 *Análise do comportamento de um ramo contendo um canal oblíquo*

Qualquer ramo da rede possui um canal, sendo possível definir neste uma entrada e uma saída de fluido. Com excepção dos ramos nas linhas de entrada e saída de fluido da rede, e alguns ramos nos lados da rede quando as fronteiras são não periódicas, todos os ramos da rede possuem uma expansão, associada à saída do fluido do canal, e uma contracção, associada à entrada de fluido no canal, da área de secção recta do escoamento. Como para redes possuindo dimensões estatisticamente significativas, o número de ramos da rede com apenas uma câmara associada é pouco significativo, vamos analisar o caso mais comum. Por outro lado, apenas se analisa o comportamento dos ramos associados aos canais oblíquo, visto serem estes os elementos controlantes do escoamento através da rede.

De acordo com este modelo, $\sum K_j$ pode ser previsto a partir das características geométricas e do escoamento ao nível local. Na forma geral, o valor desse parâmetro é igual à soma de K_j^E e K_j^{CT} . Como as condições geométricas nos dois extremos do ramo são diferentes, em particular dos valores do diâmetro das câmaras e da existência ou não de canais horizontais associados a estas. Como nas secções anteriores, a análise do comportamento de um ramo da rede é efectuada para uma rede uniforme. Nestas condições, $\sum K_j$ é dado pela expressão

$$\sum K_j = \left[\frac{1}{C_c^2} - 4 \frac{A}{A_s} \left(\frac{A}{A_s} - \frac{1}{C_c \cos \theta} \right) \right] + \left(\frac{1}{C_c} - 1 \right)^2 + \frac{A_s}{2A} \left[\frac{1}{2} \frac{A_s}{A} - 1 \right] + \frac{1}{\cos \theta} - 1 \quad (\text{B.66})$$

Na Figura B.8 são comparados os valores de $\sum K_j$ previstos pelo modelo IQM em função de d/D para dois valores de θ , $\pi/3$ e $\pi/4$. Como nas secções anteriores, são comparados os valores previstos para redes com e sem canais horizontais. O valor de C_{Cj} é determinado usando-se a Equação (B.10). Os resultados mostram que para valores baixos de d/D são as expansões do escoamento que controlam $\sum K_j$, e consequentemente o valor da resistência associada às ligações entre as câmaras e dos canais. As diferenças de comportamento entre redes com e sem canais horizontais foram também observadas na Secção B.3.3.1, mostrando

que de facto são as ligações associadas às entradas de fluido na câmara que controlam o escoamento para esta gama de valores do valor do diâmetro das câmaras e dos canais. Aumentando d/D , observa-se que o valor calculado de $\sum K_j$ diminui, de acordo com as conclusões das secções anteriores em que se observa que o aumento do diâmetro das câmaras e dos canais reduz a resistência associada à entrada ou saída de fluido das câmaras da rede. No entanto, para valores de $d/D > 0.5$, observa-se que $\sum K_j$ passa a ser menor que zero, mostrando que passam a ser as contracções a controlar o comportamento das ligações entre as câmaras e os canais da rede. Para valores de d/D próximos de um, o comportamento é idêntico ao observado na Figura B.7. Deste modo as conclusões da secção anterior são válidas para esta gama de valores de d/D .

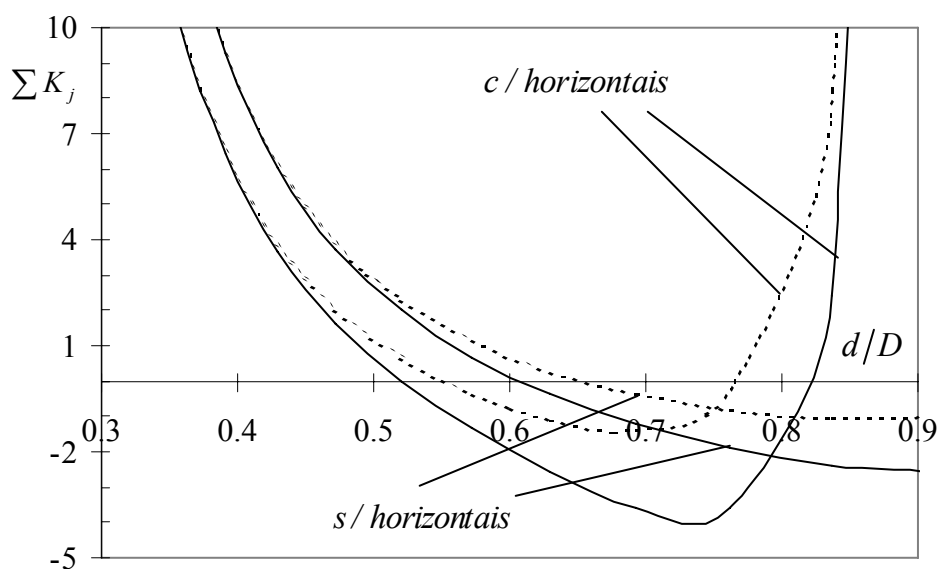


Figura B.8 Valores de $\sum K_j$ previstos pelo modelo completo em função de d/D para uma rede uniforme e considerando dois valores de θ : $\pi/4$ (curvas a traçado), e $\pi/3$ (curvas a cheio).

Como o modelo geométrico prevê valores de $d/D > 0.5$ para a gama de valores de porosidade em que este se está definido, os valores previstos pelo modelo IQM (completo) vão representar termos de fonte de tensão. Este aspecto pode limitar a aplicabilidade do modelo em particular quando os valores das fontes de tensão associadas a um ramo da rede superam o valor da resistência, como se vai ver na secção seguinte.

B.3.4 Implicações na modelização do escoamento

Na secção anterior conclui-se que o modelo completo proposto resulta em valores dos termos R_j^{ET} negativos, correspondentes a fontes de tensão e não termos de resistência ao escoamento. Deste modo, várias situações devem ser tomadas em conta na implementação do modelo completo.

A mais simples corresponde ao caso em que R_j^{ET} é maior que zero. Nesta situação, a ligação entre a câmara e o canal representa uma resistência ao escoamento, basta apenas somar o valor deste com a resistência ao escoamento por acção das forças viscosas, sendo a descrição do escoamento em tudo idêntica à efectuada quando se usam os modelos FRIC ou ICAM.

Quando o valor de R_j^{ET} é menor, representando uma fonte de tensão, a resistência ao escoamento do ramo da rede é dado pela soma dos termos R_j^F e R_j^{EL} , passando os elementos da matriz $\mathbf{Y}$ a serem determinados com base nesses termos de resistência ao escoamento. De acordo com as regras normalmente consideradas na análise de um circuito eléctrico (Desoer e Kuhn, 1969), uma resistência é equivalente a uma fonte de tensão com o mesmo sentido da corrente através do ramo da rede. Quando a fonte de tensão não se “opõem” ao escoamento, como por exemplo quando se toma em conta a acção da gravidade, o sentido da fonte de tensão é contrário ao sentido de escoamento. Deste modo, é indiferente usar resistências nos ramos ou fontes de tensão para a modelização do escoamento, embora para a primeira situação os termos de resistência tenham de ser maior que zero. Do ponto de vista de implementação do algoritmo, é necessário calcular também os elementos de $\mathbf{q}^s$ associados às câmaras que não se encontram na entrada de fluido na câmara (notar que os elementos do vector $\mathbf{q}^s$ associados às câmaras de entrada de fluido na câmara são sempre diferentes de zero, visto serem nestes que se aplica o gradientes macroscópico de pressão imposto à rede.

O comportamento da rede nesta última situação vai depender da importância relativa dos valores dos termos de resistência e de fonte de tensão associados aos ramos. Quando o escoamento se encontra em regime laminar, em que as forças viscosas são dominantes, o valor da resistência ao escoamento vai ser superior ao valor dos termos de fonte de tensão. Nestas condições, apenas os elementos de $\mathbf{q}^s$ associados às câmaras na linha de entrada de fluido são diferentes de zero, não diferindo dos casos dos modelos FRIC e ICAM. No entanto,

a resistência dos ramos da rede ao escoamento. Assumindo que os termos de fonte de tensão podem ser considerados como resistências negativas, a resistência real de um ramo da rede vai ser menor que a prevista pelo modelo FRIC. De acordo com os resultados da Secção 4.5.1, apenas quando as ligações entre as câmaras e os canais são tomadas em conta de forma é que a descrição da zona de transição e não linear é descrita adequadamente. Nestas condições, o modelo apenas é capaz de descrever o comportamento hidrodinâmico na zona linear o que limita a sua aplicabilidade.

Quanto maior for o valor da velocidade do fluido nos ramos da rede, maior vai ser o valor da fonte de tensão quando comparada com a resistência. Este aspecto é importante sobretudo na zona de escoamento não linear, em que, como se conclui na Secção 4.3.3.3, os valores dos termos R_j^{ET} são superiores aos termos de resistência devido à acção das forças viscosas no escoamento. Apesar de experimentalmente se ter observado ao nível local o aumento da pressão absoluta no interior do meio poroso, este efeito é visível apenas na zona de entrada do fluido (McWhirter *et al.*, 1998). Após a zona de entrada do fluido, o perfil de pressões no interior de um meio poroso é uma função monótona decrescente da distância percorrida pelo fluido, indicando que o meio poroso exerce de facto resistência ao escoamento. Como o valor de R_j envolve a soma de dois valores de R_j^{ET} , dependendo das características geométricas e de escoamento ao nível local pode ocorrer a situação em que R_j represente de facto uma fonte de tensão e não uma resistência.

Se um ramo da rede se comporta como uma fonte de tensão, o valor desta é proporcional a v_j^2 . Se o escoamento é não linear, quando se calcula o novo valor do caudal associado a esse ramo, este vai aumentar, de modo a tomar em conta a fonte de tensão. Como não existe nenhum termo de resistência que se oponha ao aumento dos valores da fonte de tensão e consequentemente do caudal no ramo, o algoritmo vai divergir. Deste modo, na forma actual o modelo completo não pode ser usado na descrição do escoamento num meio poroso, estando o problema associado às saídas do fluido das câmaras, onde podem ocorrer as fontes de tensão.

De acordo com as conclusões anteriores, qualquer modelo que pretenda descrever o escoamento através de um meio poroso com base num modelo de redes deve prever que os ramos da rede possuem sempre um comportamento resistivo. No modelo completo que foi descrito neste apêndice, dependendo das condições dos elementos da rede e do escoamento

nestes, é possível que o comportamento de um ramo da rede seja equivalente a uma fonte de tensão e não de resistência, podendo originar a divergência do método iterativo, ou prever um comportamento qualitativamente incorrecto.

Os problemas identificados limitam a aplicabilidade do modelo completo a certas gamas da razão d_j/D_i . Deste modo, como este não pode ser aplicado independentemente das características geométricas da rede e dos seus elementos, um modelo mais simples foi utilizado neste trabalho. Este assume que os termos de resistência associados aos ramos da rede são sempre positivos, sendo os parâmetros associados às ligações entre as câmaras e dos canais determinados com base em dados experimentais do escoamento através de meios porosos.

Os problemas observados como o modelo completo para o cálculo de R_j^{ET} descrito neste apêndice estão associados às contracções da área de secção recta do escoamento originadas pela saída de fluido das câmaras para os canais. Apenas para este tipo de ligações entre as câmaras e os canais é que os termos R_j^{ET} representam fontes de tensão, sendo estes dominantes quando a razão entre o diâmetro das câmaras e dos canais é elevada. Várias soluções podem ser consideradas para evitar este problema.

Uma das mais simples é escrever as equações de balanço material e de quantidade de movimento para as contracções de fluido baseadas em VC diferentes dos considerados na Secção B.3.2.1. Também as hipóteses consideradas na escrita das equações de balanço podem ser modificadas de modo a melhor tomar em conta a estrutura do escoamento associada às contracções do escoamento. Para o caso em que apenas existe um canal de saída da câmara e $\theta = 0$, assume-se que a mudança de velocidade do fluido ao entrar no canal é um processo muito eficiente, sendo a perda de carga dominada pela expansão do fluido a seguir à *Vena Contracta*. Aplicando esta hipótese no problema em estudo, o valor de R_j^{ET} associado às contracções passa a ser sempre maior que zero, representando portanto uma resistência ao escoamento. No entanto, os resultados obtidos para $\sum K_j$ com base em dados experimentais do escoamento através de um meio poroso são superiores aos valores obtidos de acordo com esta hipótese. Por outro lado, os efeitos da mistura do fluido e a influência das diferentes áreas de secção recta associadas aos canais de saída de câmara não são tomados em conta deste modo. Simulações de *CFD* (Computational Fluid Dynamics) podem ser usadas para esclarecer quais são as hipóteses e adequadas ou mesma para determinar correlações que

permitam a determinação de $\sum K_j$ para diferentes combinações de canais associados a uma câmara e diferentes razões de valores entre os diâmetros das câmaras e dos canais.

B.4 Estrutura do Sistema de Equações

Na Secção 3.7.1 conclui-se que para $N_x \geq 100$ e $N_y \geq 100$, as redes obtidas pelo gerador da rede podem ser consideradas como representativas de meios porosos. Se os mesmos critérios forem válidos também para a descrição do escoamento através de uma rede, os sistemas de equações que descrevem o escoamento através da rede terão pelo menos 22500 equações. De modo a resolver com eficiência um sistema de equações com estas dimensões, é essencial tomar em conta a sua estrutura na determinação da solução deste.

Como se referiu na Secção 4.4.1, o sistema de equações é esparso, possuindo a matriz $\mathbf{Y}$ no máximo sete elementos por linha. O método numérico escolhido toma em conta este aspecto, realizando operações apenas com os elementos não nulos da matriz de coeficientes. No entanto, o método requer que a posição e o valor dos elementos não nulos da matriz de coeficientes seja definida como uma entrada da rotina. A determinação das matrizes $\mathbf{Y}$ e $\mathbf{q}_s$ toma em conta estes aspectos, como se vai ver de seguida.

As incógnitas no sistema de equações são as pressões absolutas no interior das câmaras, sendo a sua numeração feita sequencialmente, a partir do topo até ao fundo da rede e da esquerda para a direita. Um exemplo da forma implementada no simulador hidrodinâmico é apresentado na Figura B.9, para uma rede com 3 linhas e 4 colunas de câmaras. A numeração das equações é independente da estrutura da rede, o que facilita a definição da matriz $\mathbf{Y}$ e do vector $\mathbf{q}_s$, assim como a passagem das características locais do campo de escoamento, necessárias para a modelização de outros fenómenos de transporte com base no modelo de redes proposto.

A estrutura do sistema de equações depende da estrutura da rede, em particular da existência ou não de canais horizontais e se ocorre ou não remoção de canais ou câmaras na rede. Para uma rede com $N_x = N_y = 8$, são apresentadas na Figura B.10 as estruturas do sistema de equações para os quatro tipos básicos de redes que o gerador permite criar, sem remoção de canais e/ou câmaras. As dimensões da rede foram seleccionadas de modo a permitir a observação simultânea das estrutura finas e global da matriz de coeficientes, sendo as conclusões independentes das dimensões consideradas para a rede.

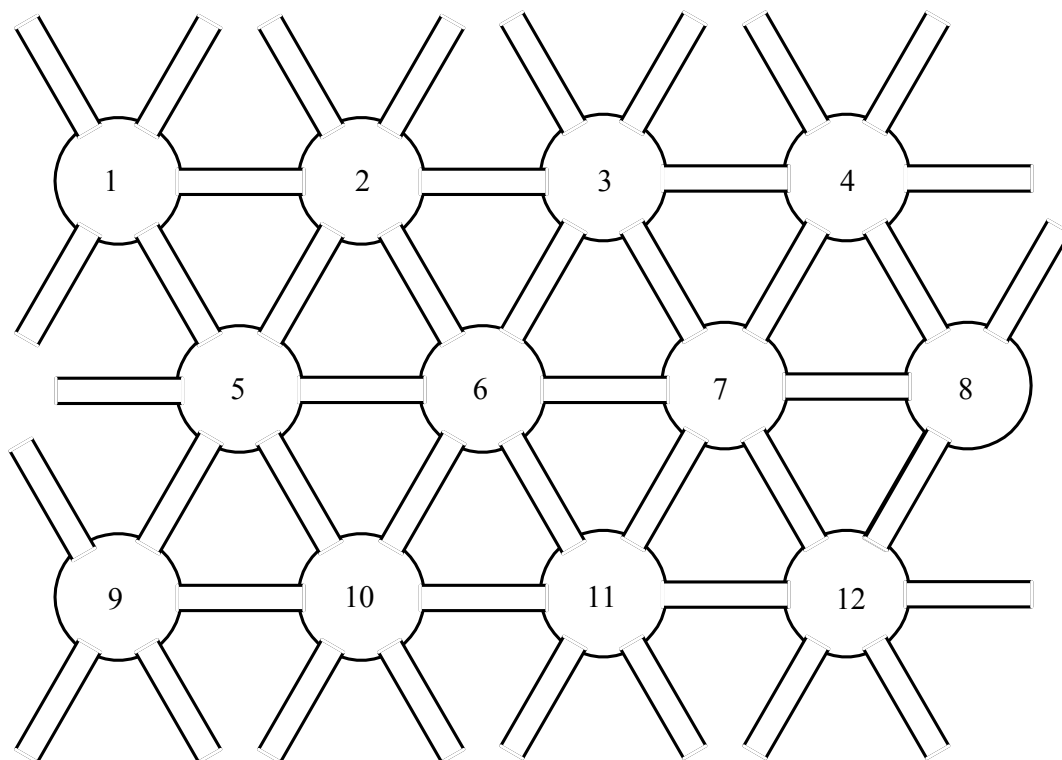


Figura B.9 Esquema de numeração das equações do sistema de equações que permite determinar as características do escoamento através da rede.

Independentemente das condições impostas para a estrutura geométrica da rede, a matriz de coeficientes possui três bandas. A banda central, com uma largura igual a três ou a um conforme a rede possui ou não canais horizontais, encontra-se associada à diagonal da matriz de coeficientes. Os elementos da diagonal representam a admitância própria associada a um nó da rede. Os restantes elementos da banda central, que existem apenas quando existem canais horizontais na rede, representam a admitância própria dos ramos associados aos canais horizontais e que ligam nós que se encontram na mesma linha da rede.

As bandas não associadas à diagonal têm largura igual a dois, não dependendo da existência de canais horizontais na rede. Os coeficientes destas bandas são as admitâncias mútuas correspondentes aos ramos da rede associados ao nó. As bandas por cima e por baixo da diagonal correspondem aos ramos de ligação com a linha de nós imediatamente por baixo e por cima da linha em que se encontra a câmara correspondente ao elemento diagonal da matriz de coeficientes. A estrutura destas bandas varia de forma regular, conforme o posicionamento relativo do canal e da câmara em relação às fronteiras da rede e o carácter periódico ou não destas. Cada uma destas bandas encontra-se distanciada N_y da banda central.

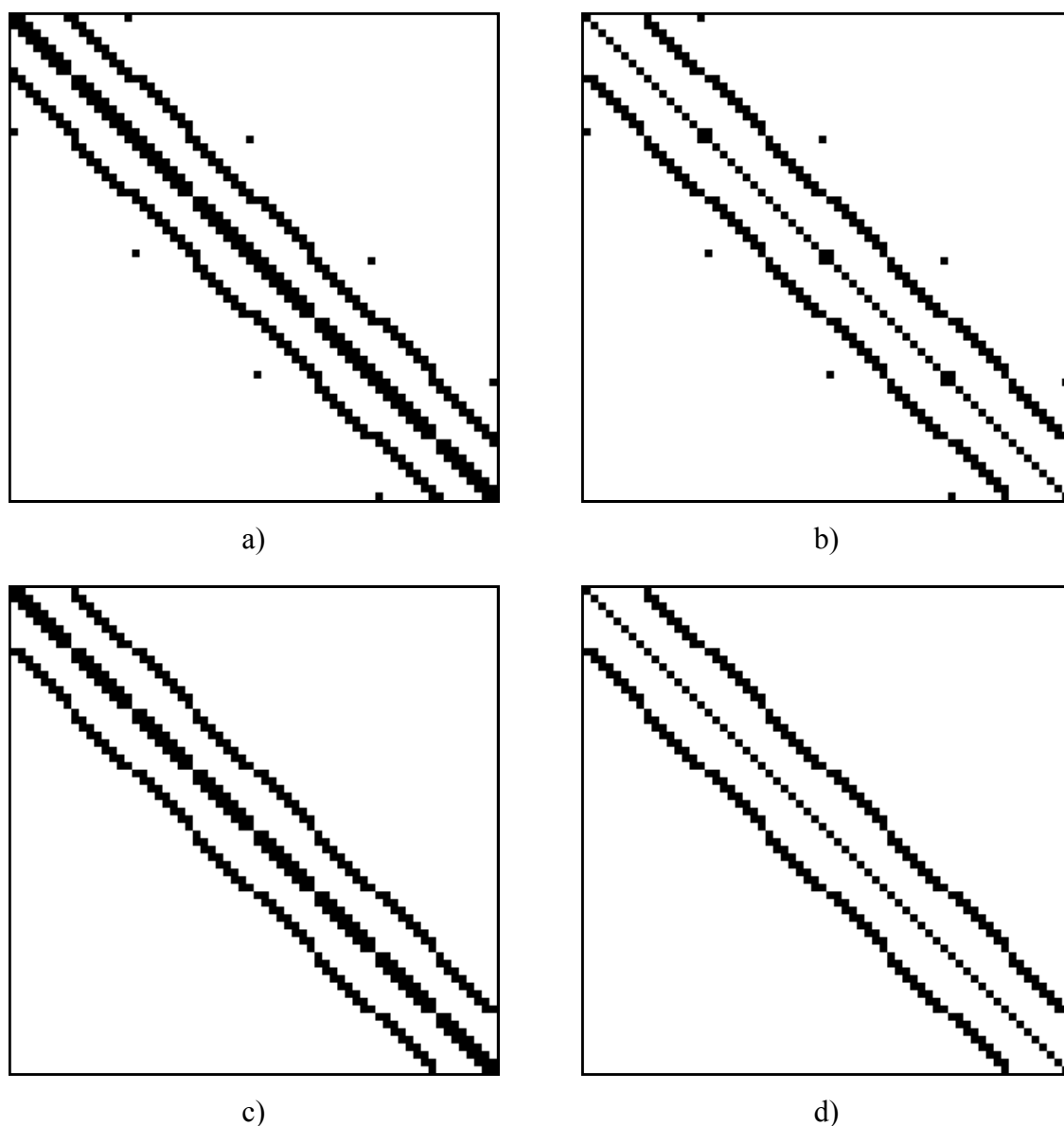


Figura B.10 Estrutura dos sistemas de equações para os quatro tipos fundamentais de redes: a) tipo 11; b) tipo 10; c) tipo 01; d) tipo 00.

Algumas variações locais podem ocorrer conforme a estrutura geométrica local da rede, em particular devido à natureza das fronteiras da rede. A influência da imposição ou não de fronteiras periódicas pode ser observada pela ocorrência de elementos exteriores às três bandas principais.

Se ocorrer remoção de canais e/ou câmaras da rede, a estrutura do sistema de equações vai sofrer alterações. De acordo com o algoritmo de geração da rede (ver Secção 3.4.4), o procedimento de remoção de câmaras e/ou câmaras é efectuado após se ter concluído a geração de um dos quatro tipos de redes regulares de redes apresentados na Figura 3.5. Como as características das distribuições espaciais dos valores de C_i destas são distintas, a

comparação da influência da remoção de canais e/ou câmaras deve ser efectuada com base na mesma rede regular, tendo-se seleccionado a rede regular com fronteiras periódicas e possuindo um valor de C superior ao valor médio pretendido após o processo de remoção. Deste modo, para valores de C entre 6 e 4 utiliza-se uma rede com canais horizontais e abaixo desse valor sem canais horizontais.

Na Figura B.11 são apresentadas as estruturas da matriz $\mathbf{Y}$ para redes em que se efectuou apenas remoção de canais, para quatro valores de C . Em qualquer dos casos, a estrutura em bandas ainda pode ser observada, possuindo estas no entanto uma estrutura irregular, resultado da remoção aleatória de canais. Na Figura B.11d observa-se que, apesar da rede original possuir fronteiras periódicas, não se observam os termos adicionais provocados pela definição deste tipo de fronteiras. Devido ao baixo valor de C e da rede original já possuir poucos canais disponíveis para remoção, o procedimento de remoção pode remover os canais de ligação entre lados opostos da rede, deixando estes de ser visíveis na estrutura do sistema de equações.

Nas Figura B.11a, b e c, o número de equações é igual a $N_x \times N_y$, enquanto que na Figura B.11d, o número de equações é inferior a este valor limite. Nesse caso, em que $C = 3$, parte-se de uma rede com $C = 4$, sendo necessário remover pelo menos 25% do número total de canais da rede. Desta forma, algumas das câmaras da rede podem deixar de possuir canais associados, e deixam de interferir no comportamento hidrodinâmico da rede. Estas câmaras sem contacto com o resto da rede podem representar câmaras cujos canais foram bloqueados pela deposição de partículas ou pela formação de depósitos nas suas paredes. Comparando o número dos termos exteriores às bandas nas Figura B.11 a, b e c, observa-se que diminuindo C , o número dos termos associados às fronteiras periódicas também baixa, de acordo com a conclusão anterior.

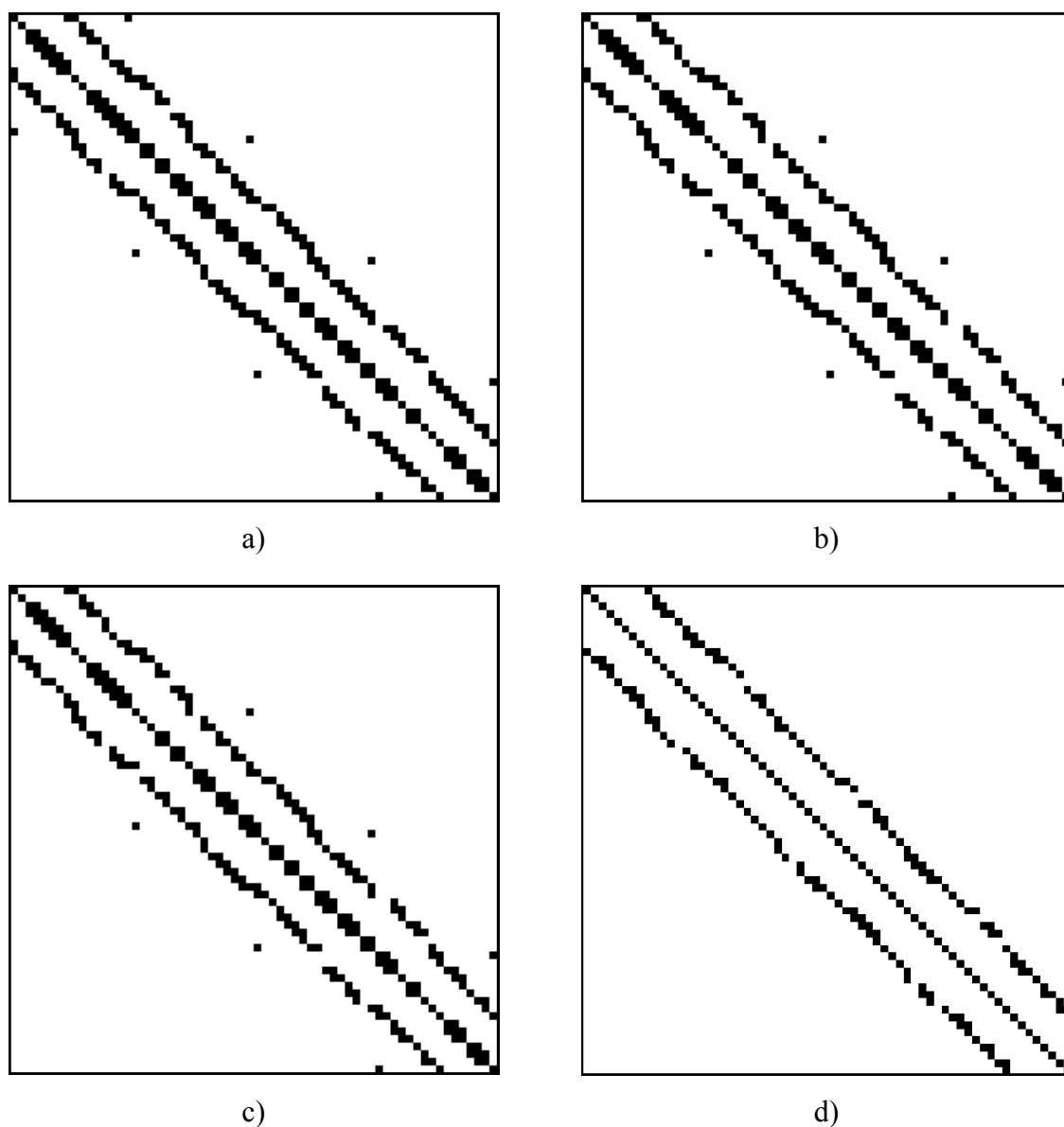


Figura B.11 Estrutura dos sistemas de equações com remoção de canais, para quatro valores de N_{Cord} : a) $C = 5$; b) $C = 4.5$; c) $C = 3.5$; d) $C = 3.0$.

Na Figura B.12 são apresentadas as estruturas de $\mathbf{Y}$ para os mesmos casos da Figura B.11 mas agora com remoção de câmaras em vez de canais. Observa-se o mesmo comportamento qualitativo entre as duas figuras. No entanto, nota-se que para iguais valores do número de coordenação, a estrutura do sistema de equações para igual C é mais compacta no caso de remoção de câmaras do que de canais, possuindo também um menor número de equações. As diferenças podem ser atribuídas ao algoritmo de remoção implementado, em que, no caso de remoção de câmaras, ocorre a remoção de todos os canais associados a uma câmara. Desta forma, basta remover um número muito menor de câmaras para que o valor de C pretendido seja obtido.

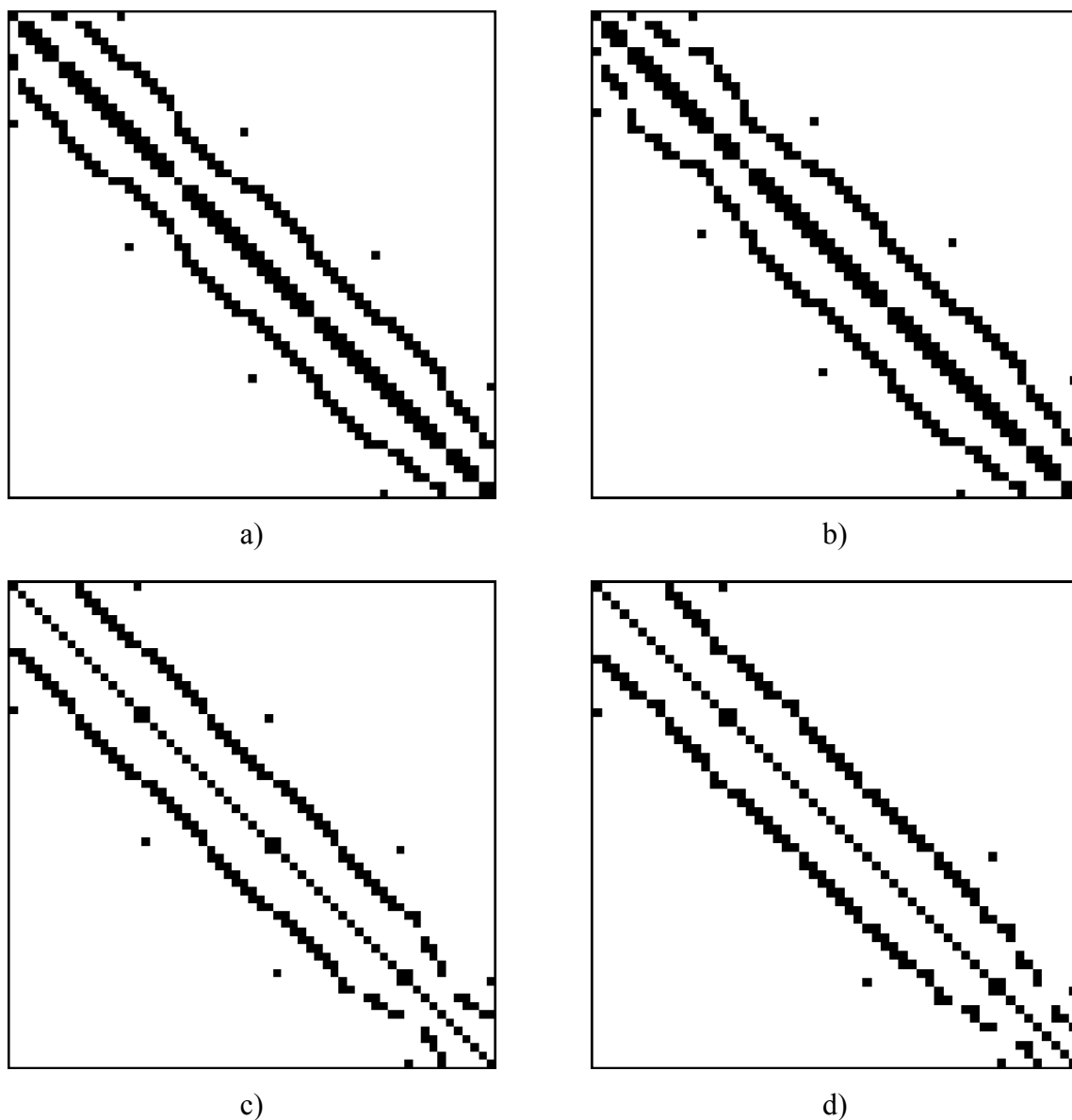


Figura B.12 Estrutura dos sistemas de equações com remoção de câmaras, para quatro valores de N_{Cord} : a) $C = 5$; b) $C = 4.5$; c) $C = 3.5$; d) $C = 3.0$.

Em relação ao vector $\mathbf{q}^s$, é necessário diferenciar as situações em que a influência da gravidade é tomada em conta ou não. Independentemente, os termos do vector correspondentes aos nós na linha do topo por onde o fluido entra na rede incluem sempre as fontes de tensão originadas pela imposição do gradiente de pressões macroscópico na rede. No caso em que não se considera a influência da gravidade, são estes os únicos elementos não nulos de $\mathbf{q}^s$. Os restantes elementos são nulos apenas quando se tomam em conta as fontes de tensão devido à acção da gravidade ou das ligações entre as câmaras e os canais.

B.5 Expressões teóricas para os parâmetros macroscópicos do escoamento

A análise do comportamento de uma rede uniforme permite obter fórmulas para os parâmetros macroscópicos que caracterizam o escoamento através de um meio poroso. Nas subsecções seguintes são deduzidas as expressões analíticas para a permeabilidade, para as constantes da Equação de MacDonald, para a razão F^* , e para a variação da permeabilidade em função de F^* quando apenas canais horizontais são removidos pelo gerador da rede. Em todos os casos mostrou-se que as expressões obtidas dependem apenas das características geométricas dos elementos da rede e que são independentes das dimensões da rede, em particular na direcção principal do escoamento.

B.5.1 Permeabilidade

A permeabilidade da rede é obtida a partir das características geométricas e do escoamento na rede de elementos usando a seguinte expressão

$$k = \frac{q_T \mu L_X}{L_Y E_R \Delta P_T} \quad (\text{B.67})$$

Com excepção da viscosidade do fluido, que se assume como sendo constante, é possível mostrara que os restantes termos são função apenas dos valores médios das dimensões características dos elementos da rede.

Assumindo que a resistência ao escoamento de um ramo da rede é a soma dos termos R_j^F e R_j^{EL} , sendo R_j^{EL} desprezável, a queda de pressão total através da rede, ΔP_T , pode ser calculada usando a expressão (ver Secção 4.4.3)

$$\Delta P_T = 64 \frac{N_x + 1}{N_y} \frac{\mu}{\pi^2 d^4} (\pi l + 4d) q_T \quad (\text{B.68})$$

Substituindo a expressão anterior na Equação B.67, simplificando resulta

$$k = \frac{L_X N_y \pi^2 d^4}{64 (N_x + 1) L_Y E_R (\pi l + 4d)} \quad (\text{B.69})$$

A espessura equivalente da rede, E_R , é expressa na forma

$$E_R = \frac{V_V}{L_X L_Y \varepsilon} \quad (\text{B.70})$$

o que permite escrever a Equação B.69 na forma

$$k = \frac{L_X^2 N_y \pi^2 d^4 \varepsilon}{64(N_x + 1)V_V(\pi d + 4d)} \quad (\text{B.71})$$

As expressões de L_X e V_V adequadas dependem se o volume das calotes esféricas associado às ligações entre as câmaras e os canais da rede são tomadas em conta ou não. Para o caso geral L_X é dado pela seguinte expressão

$$L_X = (N_x + 1)(l + D - 2h)\cos\theta \quad (\text{B.72})$$

em que h é o comprimento maior da calote. Substituindo na Equação B.71, a permeabilidade pode ser calculada usando a expressão

$$k = \frac{[(l + D - 2h)\cos\theta]^2 (N_x + 1)N_y \pi^2 d^4 \varepsilon}{64V_V(\pi d + 4d)} \quad (\text{B.73})$$

O volume de vazios da rede é calculado usando a seguinte expressão geral

$$V_V = N_{Cam} \frac{\pi}{6} D^3 + N_{canob} \frac{\pi}{4} d^2 l + N_{canhor} \frac{\pi}{4} d^2 l_h - N_{cal} \frac{\pi}{3} h^2 \left(\frac{3D}{2} - h \right) \quad (\text{B.74})$$

em que N_{Cam} é o número de câmaras na rede, igual a $N_x N_y$, N_{Canob} é o número de canais oblíquos da rede, igual a $2N_y(N_x + 1)$, N_{Canhor} é o número de canais horizontais, e N_{Cal} é o número de calotes existentes na rede. N_{Canhor} e N_{Cal} são função de C . Para uma rede uniforme se $C = 4$ tem-se $N_{Canhor} = 0$ e $N_{Cal} = 4N_x N_y - N_x + 1$, e para $N_{Canhor} = N_x N_y$ e $N_{Cal} = 6N_x N_y - 2N_x + 1$.

Para o caso $C = 6$, a substituição da expressão obtida de V_V na Equação B.73, após simplificar a seguinte expressão para a permeabilidade de uma rede pode ser obtida função apenas das características geométricas da rede e dos seus elementos

$$k = \frac{[(l + D - 2h)\cos\theta]^2 (N_x + 1)\pi d^2 \varepsilon}{16N_x \left[\frac{2}{3} \frac{D^3}{d^2} + 2 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) l + l_h - \left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) \frac{4h^2}{3} \left(\frac{3D}{2} - h \right) \right] (\pi l + 4d)} \quad (\text{B.75})$$

Para redes de grandes dimensões, em particular na direcção principal de escoamento, a expressão anterior simplifica e pode ser escrita na forma

$$k \approx \frac{[(l + D - 2h)\cos\theta]^2 \pi d^2 \varepsilon}{16 \left[\frac{2}{3} \frac{D^3}{d^2} + 2l + l_h - 8h^2 \left(\frac{3D}{2} - h \right) \right] (\pi l + 4d)} \quad (\text{B.76})$$

Usando a relação existente entre canais oblíquos e normais da rede (ver Secção 3.4.5), que pode ser expressa na forma $l_h = 2l \sin \theta + (2 \sin \theta - 1)(D - 2h)$, obtém-se

$$k \approx \frac{\pi}{16} \frac{[(l + D)\cos\theta]^2 d^2 \varepsilon}{\left[\frac{2}{3} \frac{D^3}{d^2} + 2l(\sin \theta + 1) + (2 \sin \theta - 1)(D - 2h) - 8h^2 \left(\frac{3D}{2} - h \right) \right] (\pi l + 4d)} \quad (\text{B.77})$$

Para uma rede com $C = 4$ a dedução da expressão é em todo idêntica. Apenas se altera a expressão para o volume de vazios da rede, expressa agora na forma

$$V_v = N_x N_y \frac{\pi}{6} D^3 + 2N_y (N_x + 1) \frac{\pi}{4} d^2 l - (4N_x N_y - N_x + 1) \frac{\pi}{3} h^2 \left(\frac{3D}{2} - h \right) \quad (\text{B.78})$$

Substituindo a expressão de V_v na Equação B.73, simplificando obtém-se

$$k = \frac{[(l + D - 2h)\cos\theta]^2 (N_x + 1)\pi d^2 \varepsilon}{16N_x \left[\frac{2}{3} \frac{D^3}{d^2} + 2 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) l + - \left(4 - \frac{1}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) \frac{4h^2}{3} \left(\frac{3D}{2} - h \right) \right] (\pi l + 4d)} \quad (\text{B.79})$$

Como no caso anterior, para redes grandes no sentido principal de escoamento na rede a expressão anterior simplifica-se, resultando em

$$k \approx \frac{[(l + D - 2h)\cos\theta]^2 \pi d^2 \varepsilon}{16N_x \left[\frac{2}{3} \frac{D^3}{d^2} + 2l - \frac{16h^2}{3} \left(\frac{3D}{2} - h \right) \right] (\pi l + 4d)} \quad (\text{B.80})$$

O volume das calotes é significativo apenas quando $d/D \approx 1$. Se $h \approx 0$, as Equações B.77 e B.80 podem ser simplificadas, obtendo-se as seguintes expressões gerais

$$k \approx \frac{\pi}{16} \frac{[(l+D)\cos\theta]^2 d^2 \varepsilon}{\left[\frac{2}{3} \frac{D^3}{d^2} + 2l(\sin\theta + 1) + (2\sin\theta - 1)D \right] (\pi d + 4d)}, \quad C = 6 \quad (\text{B.81})$$

$$k \approx \frac{\pi}{16} \frac{[(l+D)\cos\theta]^2 d^2 \varepsilon}{\left(\frac{2}{3} \frac{D^3}{d^2} + 2l \right) (\pi d + 4d)} = \frac{\pi}{32} \frac{[(l+D)\cos\theta]^2 d^2 \varepsilon}{\left(\frac{1}{3} \frac{D^3}{d^2} + l \right) (\pi d + 4d)}, \quad C = 4 \quad (\text{B.82})$$

B.5.2 Expressões para as constantes A e B da Equação de MacDonald

As expressões teóricas para as constantes A e B da Equação de MacDonald pode ser efectuada a partir das formas de representação de F_V em função de Re^* para A , e de F^* em função de Re^* para B . Os dois casos são analisados separadamente nas duas subsecções seguintes.

B.5.2.1 Expressão para A

Quando os resultados experimentais ou previstos são representados na forma F_V em função de Re^* para escoamento laminar observa-se que os valores tendem para um valor constante e igual a A . De acordo com a definição de F_V , podemos escrever a seguinte relação

$$F_V \approx A = \frac{\Delta P_T D_P^2 \varepsilon^3 A_N}{L_X \mu q_T (1 - \varepsilon)^2} \quad (\text{B.83})$$

A área equivalente da rede para o escoamento, A_N , é igual a $L_Y E_R$. Substituindo esta relação na Equação B.83, e tomando em conta a definição da permeabilidade da rede, a seguinte expressão pode ser escrita

$$A = \frac{\Delta P_T D_P^2 \varepsilon^3 L_Y E_R}{L_X \mu q_T (1 - \varepsilon)^2} = \frac{L_Y E_R \Delta P_T}{q_T \mu L_X} \frac{D_P^2 \varepsilon^3}{(1 - \varepsilon)^2} = \frac{1}{k} \frac{D_P^2 \varepsilon^3}{(1 - \varepsilon)^2} \quad (\text{B.84})$$

A expressão anterior mostra que A é inversamente proporcional a k e depende do valor do diâmetro médio das partículas, D_P , e da porosidade do meio poroso. Substituindo as expressões obtidas na Secção B.5.1 para a permeabilidade na Equação B.84 obtém-se as

relações teóricas pretendidas para A . Por exemplo, para redes grandes e sem tomar em conta o volume das calotes tem-se

$$A = \frac{16}{\pi} \frac{\left[\frac{2}{3} \frac{D^3}{d^2} + 2l(\sin \theta + 1) + (2 \sin \theta - 1)D \right] (\pi l + 4d)}{[(l + D) \cos \theta]^2 d^2} \frac{D_p^2 \varepsilon^2}{(1 - \varepsilon)^2} \quad (\text{B.85})$$

$$A = \frac{32}{\pi} \frac{\left[\frac{1}{3} \frac{D^3}{d^2} + 2l \right] (\pi l + 4d)}{[(l + D) \cos \theta]^2 d^2} \frac{D_p^2 \varepsilon^2}{(1 - \varepsilon)^2} \quad (\text{B.86})$$

B.5.2.2 Expressão para B

A dedução da expressão teórica para a constante B baseia-se no comportamento limite da forma de representação de F^* em função de Re^* para valores elevados de Re^* . Nessas condições, F^* tende para um valor constante e igual a B . Usando a definição de F^* é possível então determinar as expressões analíticas pretendidas.

De acordo com a definição de F^* , este parâmetro adimensional pode ser escrito na forma

$$B = \frac{\Delta P_T L_y^2 E_R^2 D_p \varepsilon^3}{L_X \rho q_T^2 (1 - \varepsilon)} \quad (\text{B.87})$$

Na expressão geral alguns dos factores são independentes das características geométricas da rede e dos seus elementos, em particular ρ , ε e D_p . Os restantes termos podem ser determinados usando informação fornecida ao gerador da rede e ao simulador hidrodinâmico, como se vai ver de seguida.

O termo ΔP_T deve tomar em conta que para valores elevados de Re^* os termos R_j^{ET} são os factores dominantes da resistência dos ramos da rede ao escoamento. Assim, de acordo com os resultados da Secção 4.4.3, ΔP_T pode ser expresso na forma

$$\Delta P_T = 2 \frac{N_x + 1}{N_y^2} \frac{\rho \sum K_j}{\pi^2 d^4} q_T^2 \quad (\text{B.88})$$

Substituindo a expressão anterior na Equação B.87, após simplificação resulta na seguinte relação

$$B = 2 \frac{N_x + 1}{N_y^2} \frac{\sum K_j}{\pi^2 d^4} \frac{L_y^2 E_R^2}{L_X} \frac{D_P \varepsilon^3}{(1 - \varepsilon)} \quad (\text{B.89})$$

A espessura equivalente da rede, E_R , é definida pela seguinte expressão

$$E_R = \frac{V_V}{L_X L_Y \varepsilon} \quad (\text{B.90})$$

Substituindo na Equação B.89, após simplificação obtém-se

$$B = 2 \frac{N_x + 1}{N_y^2} \frac{\sum K_j}{\pi^2 d^4} \frac{V_V^2}{L_X^3} \frac{D_P \varepsilon}{(1 - \varepsilon)} \quad (\text{B.91})$$

O comprimento da rede segundo a direcção principal de escoamento, L_X , pode ser expresso na forma $L_X = (N_x + 1)(l + D - 2h)\cos\theta$, que substituindo na expressão anterior resulta em

$$B = \frac{2}{N_y^2 (N_x + 1)^2} \frac{\sum K_j}{\pi^2 d^4} \frac{V_V^2}{[(l + D - 2h)\cos\theta]^3} \frac{D_P \varepsilon}{(1 - \varepsilon)} \quad (\text{B.92})$$

O volume de vazios, V_V , é função de C , sendo o caso mais geral o de uma rede uniforme com $C = 6$. Para essa rede V_V pode ser expresso na forma

$$V_V = 12 N_x N_y \pi \left[2D^3 + 6 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) d^2 l + 3d^2 l_h - 4 \left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) h^2 \left(\frac{3D}{2} - h \right) \right] \quad (\text{B.93})$$

Substituindo a expressão anterior na Equação B.92, após simplificação tem-se

$$B = 288 \left(\frac{N_x}{N_x + 1} \right)^2 \frac{\sum K_j}{d^4} \frac{\left[2D^3 + 6 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) d^2 l + 3d^2 l_h - 4 \left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) h^2 \left(\frac{3D}{2} - h \right) \right]^2}{[(l + D - 2h)\cos\theta]^3} \frac{D_P \varepsilon}{(1 - \varepsilon)} \quad (\text{B.94})$$

Para redes grandes a expressão simplifica-se para a forma

$$B \approx 288 \frac{\sum K_j}{d^4} \frac{\left[2D^3 + 6d^2l + 3d^2l_h - 24h^2 \left(\frac{3D}{2} - h \right) \right]^2}{[(l + D - 2h)\cos\theta]^3} \frac{D_p \varepsilon}{(1 - \varepsilon)} \quad (\text{B.95})$$

Para uma rede uniforme com $C = 4$ obtém-se a seguinte expressão geral

$$B = 288 \left(\frac{N_x}{N_x + 1} \right)^2 \frac{\sum K_j}{d^4} \frac{\left[2D^3 + 6 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) d^2l - 4 \left(4 - \frac{1}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) h^2 \left(\frac{3D}{2} - h \right) \right]^2}{[(l + D - 2h)\cos\theta]^3} \frac{D_p \varepsilon}{(1 - \varepsilon)} \quad (\text{B.96})$$

que para redes grandes se reduz à forma

$$B \approx 288 \frac{\sum K_j}{d^4} \frac{\left[2D^3 + 6d^2l - 16h^2 \left(\frac{3D}{2} - h \right) \right]^2}{[(l + D - 2h)\cos\theta]^3} \frac{D_p \varepsilon}{(1 - \varepsilon)} \quad (\text{B.97})$$

Desprezando o volume das calotes, situação válida desde que não ocorra a situação de $d/D \approx 1$, as seguintes expressões

$$B \approx 288 \frac{\sum K_j}{d^4} \frac{(2D^3 + 6d^2l + 3d^2l_h)^2}{[(l + D - 2h)\cos\theta]^3} \frac{D_p \varepsilon}{(1 - \varepsilon)}, \quad C = 6 \quad (\text{B.98})$$

$$B \approx 288 \frac{\sum K_j}{d^4} \frac{(2D^3 + 6d^2l)^2}{[(l + D - 2h)\cos\theta]^3} \frac{D_p \varepsilon}{(1 - \varepsilon)}, \quad C = 4 \quad (\text{B.99})$$

B.5.3 Razão de permeabilidades em função de C quando se removem apenas canais horizontais

Tomando em conta a fórmula de cálculo usada pelo simulador hidrodinâmico para calcular k , a razão entre os valores de permeabilidade para dois valores do número de coordenação médio pode ser escrita na forma

$$\frac{k_6}{k_C} = \frac{\frac{q_T^6 \mu L_X^6}{L_Y^6 E_R^6 \Delta P_T^6}}{\frac{q_T^C \mu L_X^C}{L_Y^C E_R^C \Delta P_T^C}} \quad (\text{B.100})$$

Como apenas se está a analisar a situação em que se removem apenas canais horizontais, que C é um valor entre 4 e 6. Como se estão a considerar redes uniformes, L_X e L_Y não dependem de C , e é possível assumir que $\Delta P_T^6 = \Delta P_T^C$. Rigorosamente, a remoção de canais horizontais introduz irregularidades na estrutura geométrica da rede que vão-se sentir nas características do campo de escoamento. No entanto, os resultados da Secção 4.5.4.2 mostram que os desvios são pouco significativos e podem ser desprezados. Esta hipótese implica também que q_T também não depende de C .

De acordo com as considerações, para uma rede uniforme em que se removem apenas canais horizontais a razão entre os valores de permeabilidade é equivalente a uma razão entre as espessuras equivalentes da rede, na forma

$$\frac{k_6}{k_C} = \frac{E_R^C}{E_R^6} \quad (\text{B.101})$$

De acordo com a definição de E_R , a expressão pode ser expressa como sendo uma razão entre os volumes de vazios da rede na forma

$$\frac{k_6}{k_C} = \frac{V_V^C}{V_V^6} \quad (\text{B.102})$$

Desprezando o volume de vazios das calotes da rede, V_V^C , em que C se encontra entre 4 e 6, pode ser escrito na forma

$$V_V^C = N_x N_y \frac{\pi}{6} D^3 + (2N_x N_y + 2N_y) \frac{\pi}{4} l d^2 + N_{Canhor} \frac{\pi}{4} l_h d^2 \quad (\text{B.103})$$

Na expressão anterior apenas N_{Canhor} é função de C , tendo-se assumido que o seu valor é proporcional ao valor de C . Apesar de C ser definido como sendo a média pesada da distribuição de valores de C_i , visto depender do processo de remoção de canais, quando as dimensões da rede são elevadas o número de canais removido varia de forma aproximadamente linear com C . Por exemplo, para passar de uma rede com $C = 6$ para uma rede $C = 5$, deve-se remover um número de canais horizontais aproximadamente igual a $0.5N_x N_y$, ou seja, removeram-se cerca de metade dos canais horizontais.

Usando os valores limites de N_{Canhor} para $C = 4$ e $C = 4$, respectivamente 0 e $N_x N_y$, a seguinte expressão pode ser obtida para N_{Canhor} em função de C , na forma

$$N_{Canhor} = N_x N_y \left(\frac{C}{2} - 2 \right) \quad (\text{B.104})$$

Substituindo a Equação B.104 nas Equações B.102 e B.103 resulta na expressão

$$\frac{k_6}{k_c} = \frac{N_x N_y \frac{\pi}{6} D^3 + (2N_x N_y + 2N_y) \frac{\pi}{4} l d^2 + N_x N_y \left(\frac{C}{2} - 2 \right) \frac{\pi}{4} l_h d^2}{N_x N_y \frac{\pi}{6} D^3 + (2N_x N_y + 2N_y) \frac{\pi}{4} l d^2 + N_x N_y \frac{\pi}{4} l_h d^2} \quad (\text{B.105})$$

A expressão anterior pode ser simplificada obtendo-se a seguinte expressão geral

$$\frac{k_6}{k_c} = 1 - \frac{\frac{l_h d^2}{4} \left(3 - \frac{C}{2} \right)}{\frac{D^3}{6} + 2 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) \frac{l d^2}{4} + \frac{l_h d^2}{4}} = 1 - \alpha \left(3 - \frac{C}{2} \right) \quad (\text{B.106})$$

em que α é uma constante função apenas das características geométricas da rede e dos seus elementos, na forma

$$\alpha = \frac{l_h d^2}{\frac{4D^3}{6} + 2 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) l d^2 + l_h d^2} = \frac{l_h}{\left[\frac{2}{3} \frac{D^3}{d^2} + 2 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) l + l_h \right]} \quad (\text{B.107})$$

Usando a relação $l_h = 2l \sin \theta + (2 \sin \theta - 1)(D - 2h)$, a expressão anterior pode ser escrita na forma

$$\alpha = \frac{2l \sin \theta + (2 \sin \theta - 1)(D - 2h)}{\left[\frac{2}{3} \frac{D^3}{d^2} + 2 \left(1 + \frac{1}{N_x} + \sin \theta \right) l + (2 \sin \theta - 1)(D - 2h) \right]} \quad (\text{B.108})$$

Para redes grandes no sentido principal do escoamento o termo $1/N_x$ pode ser desprezado e a expressão anterior reduz-se à forma

$$\alpha \approx \frac{2l \sin \theta + (2 \sin \theta - 1)(D - 2h)}{\left[\frac{2}{3} \frac{D^3}{d^2} + 2(1 + \sin \theta)l + (2 \sin \theta - 1)(D - 2h) \right]} \quad (\text{B.109})$$

A Equação B.106 mostra que k é um função linear de C quando apenas são removidos canais horizontais pelo gerador da rede. Em particular, a expressão geral mostra que a permeabilidade é inversamente proporcional ao valor do número de coordenação médio da rede, quando o volume das calotes não é tomado em conta.

Para o caso geral em que o volume das calotes é tomado em conta, como a remoção de canais horizontais apenas pode ser efectuado a partir de redes com $C = 6$ e com redes uniformes, neste caso de acordo com a hipótese de utilização de redes uniformes. Como podem existir canais horizontais nos lados da rede, o número de calotes que é removido pode ser igual a 1 ou a 2, conforme a localização do canal horizontal removido. Assim, não é claro se existe também uma relação linear entre o número de calotes a rede em função de C , como se assumiu para o caso em que não se toma em conta o volume das calotes. Como apenas quando $d/D \approx 1$ é que a influência das calotes é significativa, na maior dos casos as expressões anteriores são adequadas.

Assumindo no entanto que a variação do número de calotes pode ser representada aproximadamente por uma relação linear em função de C , e que N_{Cal} é igual a $N_{Cal} = 4N_x N_y - N_x + 1$ e $N_{Cal} = 6N_x N_y - 2N_x + 1$ para rede com $C = 4$ e $C = 6$ respectivamente, a seguinte relação entre N_{Cal} pode ser escrita

$$N_{Cal} = \left(N_x N_y - \frac{N_y}{2} \right) C + (N_x + 1) \quad (\text{B.110})$$

Substituindo na expressão geral da razão entre valores de permeabilidade, obtém-se a seguinte expressão geral

$$\frac{k_6}{k_C} = \frac{N_x N_y \pi \left[\frac{D^3}{6} + 2 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) \frac{ld^2}{4} + \left(\frac{C}{2} - 2 \right) \frac{l_h d^2}{4} - \left(1 - \frac{1}{2N_x} \right) C - \left(\frac{1}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) \frac{V_{Cal}}{\pi} \right]}{N_x N_y \pi \left[\frac{D^3}{6} + 2 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) \frac{ld^2}{4} + \frac{l_h d^2}{4} - \left(1 - \frac{1}{2N_x} \right) C - \left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) \frac{V_{Cal}}{\pi} \right]} \quad (\text{B.111})$$

em que V_{Cal} é dado pela expressão

$$V_{Cal} = \frac{\pi}{3} h^2 \left(\frac{3}{2} D - h \right) \quad (B.112)$$

A expressão pode ser escrita na seguinte forma

$$\frac{k_6}{k_C} = 1 - T_{SC} + T_{CC} \quad (B.113)$$

em que T_{SC} é o termo correctivo para a situação em que as calotes não são tomadas em conta, e T_{CC} é o termo correctivo adicional quando as calotes são tomadas em conta. Os dois parâmetros são função apenas das características geométricas da rede e dos seus elementos e podem expressos na forma

$$T_{SC} = \frac{\frac{l_h d^2}{4} \left(3 - \frac{C}{2} \right)}{\frac{D^3}{6} + 2 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) \frac{l d^2}{4} + \frac{l_h d^2}{4} - \left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) \frac{V_{Cal}}{\pi}} \quad (B.114)$$

$$T_{CC} = \frac{\left(6 - \frac{2}{N_x} + \frac{1}{N_x N_y} \right) \frac{V_{Cal}}{\pi} - \left[\left(1 - \frac{1}{2N_x} \right) C + \left(\frac{1}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) \right] \frac{V_{Cal}}{\pi}}{\frac{D^3}{6} + 2 \left(2 + \frac{1}{N_x} \right) l d^2 + l_h d^2 - \left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) \frac{V_{Cal}}{\pi}} \quad (B.115)$$

Substituindo as expressões das constantes T_{SC} e T_{CC} na Equação B.113 mostra-se facilmente que se obtém também uma relação linear em função de C , na forma

$$\frac{k_6}{k_C} = \frac{\left[\left(6 - \frac{2}{N_x} + \frac{1}{N_x N_y} \right) \frac{V_{Cal}}{\pi} - \frac{3l_h d^2}{4} - \left(\frac{1}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) \frac{V_{Cal}}{\pi} \right] + \left[\frac{l_h d^2}{8} - \left(1 - \frac{1}{2N_x} \right) \right] C}{\frac{D^3}{6} + 2 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) l d^2 + l_h d^2 - \left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) \frac{V_{Cal}}{\pi}} \quad (B.116)$$

Para redes grandes os termos envolvendo razões ente os valores de N_x e N_x podem ser desprezados e a seguinte expressão geral é obtida

$$\frac{k_6}{k_C} \approx \frac{\left[6 \frac{V_{Cal}}{\pi} - \frac{3l_h d^2}{4} - \frac{V_{Cal}}{\pi} \right] + \left[\frac{l_h d^2}{8} - 1 \right] C}{\frac{D^3}{6} + 2l d^2 + l_h d^2 - 6 \frac{V_{Cal}}{\pi}} \quad (B.117)$$

em que $l_h = 2l \sin \theta + (2 \sin \theta - 1)(D - 2h)$. Assumindo também que o volume das calotes é desprezável, a expressão anterior reduz-se às expressões obtidas anteriormente.

Na Secção 4.5.4.3 foi usada não a razão k_6/k_c mas sim a razão inversa k_c/k_6 . A dedução da expressão é em tudo idêntica à efectuada atrás, partindo-se sempre da definição de permeabilidade dada pela Equação B.67. Para a expressão apresentada na Secção 4.5.4.4 assumiu-se que o volume das calotes é desprezável, sendo então a razão de permeabilidades é igual à razão entre os volumes de vazios da rede e pode ser expressa na forma

$$\frac{k_6}{k_c} = \frac{V_v^c}{V_v^6} = \frac{N_x N_y \frac{\pi}{6} D^3 + (2N_x N_y + 2N_y) \frac{\pi}{4} l d^2 + N_x N_y \frac{\pi}{4} l_h d^2}{N_x N_y \frac{\pi}{6} D^3 + (2N_x N_y + 2N_y) \frac{\pi}{4} l d^2 + N_x N_y \left(\frac{C}{2} - 2 \right) \frac{\pi}{4} l_h d^2} \quad (\text{B.118})$$

Colocando em evidência e reduzindo ao mesmo denominador comum as fracções no numerador e denominador da expressão anterior, obtém-se as seguintes expressões

$$\frac{k_6}{k_c} = \frac{N_x N_y \pi 12 \left[2D^3 + 6 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) l d^2 + 3l_h d^2 \right]}{N_x N_y \pi 12 \left[2D^3 + 6 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) l d^2 + 3 \left(\frac{C}{2} - 2 \right) l_h d^2 \right]} \quad (\text{B.119})$$

$$\frac{k_6}{k_c} = \frac{2D^3 + 6 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) l d^2 + 3l_h d^2}{2D^3 + 6 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) l d^2 + 3 \left(\frac{C}{2} - 2 \right) l_h d^2} \quad (\text{B.120})$$

Assumindo que a rede é grande, após simplificação a expressão apresentada na Secção 4.5.4.4, na forma

$$\frac{k_6}{k_c} \approx \frac{2D^3 + 6l d^2 + 3l_h d^2}{2D^3 + 6l d^2 + 3 \left(\frac{C}{2} - 2 \right) l_h d^2} \quad (\text{B.121})$$

B.5.4 Razão entre os valores F^* para redes uniformes

A razão entre os valores de F^* é uma forma possível de determinar se a mudança entre regimes de escoamento altera as características do escoamento ao nível macroscópico. De

seguida são deduzidas as expressões para dois casos: valor de Re^* constante ou valor constante de q_T . Os grupos adimensionais significativos são definidos pelas seguintes expressões

$$F^* = \frac{L_Y^2 E_R^2}{L_X} \frac{\Delta P_T}{\rho q_T^2} \frac{D_P^2 \varepsilon^3}{(1 - \varepsilon)} \quad (\text{B.122})$$

$$Re^* = \frac{\rho}{\mu} \frac{q_T}{L_Y E_R} \frac{D_P}{(1 - \varepsilon)} \quad (\text{B.123})$$

Nas subsecções a dedução das expressões teóricas será feita separadamente. Em qualquer dos casos as expressões são determinadas apenas para a situação em que são os valores médios das dimensões características os factores variáveis, mantendo-se os restantes parâmetros fixados, como por exemplo as dimensões da rede.

B.5.4.1 Valor de Re^* constante

Na forma geral, a razão entre os valores de F^* entre duas redes uniformes pode ser traduzida pela seguinte forma geral

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{L_{y1}^2 E_{R1}^2}{L_{x1}} \frac{\Delta P_{T1}}{\rho q_T^2} \frac{D_P^2 \varepsilon^3}{(1 - \varepsilon)} \frac{L_{x2}}{L_{y2}^2 E_{R2}^2} \frac{\rho q_T^2 (1 - \varepsilon)}{\Delta P_{T2} D_P^2 \varepsilon^3} \quad (\text{B.124})$$

que, de acordo com as hipóteses assumidas, pode ser simplificada para a expressão

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{(\Delta P_{T1}/q_{T1}) L_{x2}}{(\Delta P_{T2}/q_{T2}) L_{x1}} \frac{L_{y1}^2 E_{R1}^2 q_{T2}}{L_{y2}^2 E_{R2}^2 q_{T1}} \quad (1)$$

Assumindo que Re^* é constante, a razão entre os valores dos números de Reynolds pode ser escrita na forma

$$\frac{Re_{1}^*}{Re_{2}^*} = 1 = \frac{q_{T1}}{q_{T2}} \frac{L_{y2}}{L_{y1}} \frac{\delta_2}{\delta_1} \quad (\text{B.125})$$

Aplicando a relação anterior na Equação B.124, simplificando obtém-se a seguinte expressão

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{(\Delta P_{T1}/q_{T1}) L_{x2}}{(\Delta P_{T2}/q_{T2}) L_{x1}} \frac{L_{y1}}{L_{y2}} \frac{E_{R1}}{E_{R2}} \quad (\text{B.126})$$

É necessário determinar agora as expressões para os quatro termos da expressão. Para os termos envolvendo as razões entre os comprimentos da rede segundo a direcção principal e normal do escoamento, usando as expressões apresentadas na Secção 3.4.5 as seguintes expressões são obtidas

$$\frac{L_{x2}}{L_{x1}} = \frac{(l + D_2 - 2h_2)}{(l + D_1 - 2h_1)} \quad (\text{B.127})$$

$$\frac{L_{y1}}{L_{y2}} = \frac{(l + D_1 - 2h_1)}{(l + D_2 - 2h_2)} \quad (\text{B.128})$$

As expressões obtidas são precisamente o inverso uma da outra, o que permite simplificar a Equação B.126 para a forma

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{(\Delta P_{T1}/q_{T1}) E_{R1}}{(\Delta P_{T2}/q_{T2}) E_{R2}} \quad (\text{B.129})$$

Para uma rede uniforme $\Delta P_T/q_T = R(q_T)$, sendo a $R(q_T)$ função apenas das características geométrica da rede e dos seus elementos e do regime de escoamento, como se mostrou na Secção 4.4.3. Para escoamento laminar $\Delta P_T/q_T$ é dado pela seguinte expressão

$$\frac{\Delta P_T}{q_T} = 64 \frac{N_x + 1}{N_y} \frac{\mu}{\pi^2 d^4} (\pi d + 4d) \quad (\text{B.130})$$

sendo a razão entre as quedas de pressão dada pela expressão

$$\frac{(\Delta P_T/q_T)_1}{(\Delta P_T/q_T)_2} = \left(\frac{d_2}{d_1} \right)^4 \left(\frac{\pi d_1 + 4d_1}{\pi d_2 + 4d_2} \right) \quad (\text{B.131})$$

Para regime de escoamento linear perfeitamente desenvolvido os termos R_j^{ET} são dominantes e a expressão anterior deve ser escrita na forma

$$\frac{(\Delta P_T/q_T)_1}{(\Delta P_T/q_T)_2} = \frac{2 \frac{N_x + 1}{N_y^2} \frac{\rho}{\pi^2 d_1^4} \sum K_j q_{T1}}{2 \frac{N_x + 1}{N_y^2} \frac{\rho}{\pi^2 d_2^4} \sum K_j q_{T2}} \quad (\text{B.132})$$

que se reduz à forma

$$\frac{(\Delta P_T / q_T)_1}{(\Delta P_T / q_T)_2} = \left(\frac{d_2}{d_1} \right)^4 \frac{q_{T1}}{q_{T2}} \quad (\text{B.133})$$

A mesma dependência dos valores de d é observada para regimes de escoamento linear e não linear perfeitamente desenvolvido. A razão entre os valores da espessura equivalente da rede pode ser obtida a partir da definição, e é expressa na forma

$$\frac{E_{R1}}{E_{R2}} = \frac{V_{V1}}{V_{V2}} \frac{L_{x2}}{L_{x1}} \frac{L_{y2}}{L_{y1}} \quad (\text{B.134})$$

Usando as Equações B.127 e B.128 a expressão anterior pode ser escrita na forma

$$\frac{E_{R1}}{E_{R2}} = \frac{V_{V1}}{V_{V2}} \left(\frac{l + D_2 - 2h_2}{l + D_1 - 2h_1} \right)^2 \quad (\text{B.135})$$

O volume de vazios da rede é calculado usando-se a seguinte forma geral

$$V_V = N_{Cam} \frac{\pi}{6} D^3 + N_{canob} \frac{\pi}{4} d^2 l + N_{canhor} \frac{\pi}{4} d^2 l_h - N_{Cal} \frac{\pi}{3} h^2 \left(\frac{3}{2} D - h \right) \quad (\text{B.136})$$

Na expressão anterior os parâmetros N_{canhor} e N_{Cal} são função de C . Como se considerou que a rede é uniforme, C apenas pode tomar dois valores: 6 e 4. Como o caso de $C = 6$ é o caso geral, é esse que vai ser analisado primeiro, sendo depois as expressões para $C = 4$ obtidas facilmente.

Para $C = 6$ o volume de vazios é dada pela expressão

$$V_V = N_x N_y \pi \left[\frac{D^3}{6} + 2 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) \frac{d^2 l}{4} + \frac{d^2 l_h}{4} - \left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) \frac{h^2}{3} \left(\frac{3}{2} D - h \right) \right] \quad (\text{B.137})$$

Substituindo a expressão geral de V_V na Equação B.135, após simplificação obtém-se a relação

$$\frac{E_{R1}}{E_{R2}} = \frac{2D_1^3 + 6\left(1 + \frac{1}{N_x}\right)d_1^2l + 6d_1^2l_h - 4\left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_xN_y}\right)h_1^2\left(\frac{3}{2}D_1 - h_1\right)}{2D_2^3 + 6\left(1 + \frac{1}{N_x}\right)d_2^2l + 6d_2^2l_h - 4\left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_xN_y}\right)h_2^2\left(\frac{3}{2}D_2 - h_2\right)} \quad (\text{B.138})$$

$$\left(\frac{l + D_2 - 2h_2}{l + D_1 - 2h_1}\right)^2$$

Substituindo as expressões finais da razão entre as quedas de pressão total e a espessura equivalente da rede na Equação B.129 obtém-se para regime laminar

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{2D_1^3 + 6\left(1 + \frac{1}{N_x}\right)d_1^2l + 6d_1^2l_h - 4\left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_xN_y}\right)h_1^2\left(\frac{3}{2}D_1 - h_1\right)}{2D_2^3 + 6\left(1 + \frac{1}{N_x}\right)d_2^2l + 6d_2^2l_h - 4\left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_xN_y}\right)h_2^2\left(\frac{3}{2}D_2 - h_2\right)} \quad (\text{B.139})$$

$$\left(\frac{l + D_2 - 2h_2}{l + D_1 - 2h_1}\right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^4 \left(\frac{\pi d_1 + 4d_2}{\pi d_2 + 4d_1}\right)$$

e para escoamento em regime de escoamento não linear perfeitamente desenvolvido

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{2D_1^3 + 6\left(1 + \frac{1}{N_x}\right)d_1^2l + 6d_1^2l_h - 4\left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_xN_y}\right)h_1^2\left(\frac{3}{2}D_1 - h_1\right)}{2D_2^3 + 6\left(1 + \frac{1}{N_x}\right)d_2^2l + 6d_2^2l_h - 4\left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_xN_y}\right)h_2^2\left(\frac{3}{2}D_2 - h_2\right)} \quad (\text{B.140})$$

$$\left(\frac{l + D_2 - 2h_2}{l + D_1 - 2h_1}\right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^4 \frac{q_{T1}}{q_{T2}}$$

em que l_h e l estão relacionados pela expressão $l_h = 2l \sin \theta + (2 \sin \theta - 1)(D - 2h)$.

Para redes com $C = 4$ a expressão anterior pode ser escrita na forma para regime laminar

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{2D_1^3 + 6\left(1 + \frac{1}{N_x}\right)d_1^2l - 4\left(4 - \frac{1}{N_y} + \frac{1}{N_xN_y}\right)h_1^2\left(\frac{3}{2}D_1 - h_1\right)}{2D_2^3 + 6\left(1 + \frac{1}{N_x}\right)d_2^2l - 4\left(4 - \frac{1}{N_y} + \frac{1}{N_xN_y}\right)h_2^2\left(\frac{3}{2}D_2 - h_2\right)} \quad (\text{B.141})$$

$$\left(\frac{l + D_2 - 2h_2}{l + D_1 - 2h_1}\right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^4 \left(\frac{\pi d_1 + 4d_2}{\pi d_2 + 4d_1}\right)$$

e para regime não linear

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{2D_1^3 + 6\left(1 + \frac{1}{N_x}\right)d_1^2l - 4\left(4 - \frac{1}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y}\right)h_1^2\left(\frac{3}{2}D_1 - h_1\right)}{2D_2^3 + 6\left(1 + \frac{1}{N_x}\right)d_2^2l - 4\left(4 - \frac{1}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y}\right)h_2^2\left(\frac{3}{2}D_2 - h_2\right)} \quad (\text{B.142})$$

$$\left(\frac{l + D_1 - 2h_1}{l + D_1 - 2h_1}\right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^4 \frac{q_{T1}}{q_{T2}}$$

Em ambas as expressões a expressão adequada para N_{cal} foi usada. Para redes grandes os termos envolvendo razões em que N_x e N_y podem ser desprezados. Para $C = 6$ e regime laminar obtém-se

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{2D_1^3 + 6d_1^2l + 6d_1^2l_h - 4h_1^2\left(\frac{3}{2}D_1 - h_1\right)}{2D_2^3 + 6d_2^2l + 6d_2^2l_h - 4h_2^2\left(\frac{3}{2}D_2 - h_2\right)} \left(\frac{l + D_2 - 2h_2}{l + D_1 - 2h_1}\right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^4 \left(\frac{\pi l + 4d_1}{\pi l + 4d_2}\right) \quad (\text{B.143})$$

e para escoamento não linear

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{2D_1^3 + 6d_1^2l + 6d_1^2l_h - 4h_1^2\left(\frac{3}{2}D_1 - h_1\right)}{2D_2^3 + 6d_2^2l + 6d_2^2l_h - 4h_2^2\left(\frac{3}{2}D_2 - h_2\right)} \left(\frac{l + D_2 - 2h_2}{l + D_1 - 2h_1}\right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^4 \frac{q_{T1}}{q_{T2}} \quad (\text{B.144})$$

Para $C = 4$, para regime linear obtém-se para regime laminar

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{2D_1^3 + 6d_1^2l - 4h_1^2\left(\frac{3}{2}D_1 - h_1\right)}{2D_2^3 + 6d_2^2l - 4h_2^2\left(\frac{3}{2}D_2 - h_2\right)} \left(\frac{l + D_2 - 2h_2}{l + D_1 - 2h_1}\right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^4 \left(\frac{\pi l + 4d_1}{\pi l + 4d_2}\right) \quad (\text{B.145})$$

e para regime turbulento

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{2D_1^3 + 6d_1^2l - 4h_1^2\left(\frac{3}{2}D_1 - h_1\right)}{2D_2^3 + 6d_2^2l - 4h_2^2\left(\frac{3}{2}D_2 - h_2\right)} \left(\frac{l + D_2 - 2h_2}{l + D_1 - 2h_1}\right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^4 \frac{q_{T1}}{q_{T2}} \quad (\text{B.146})$$

Quando o volume das calotes também é desprezado são obtidas as expressões apresentadas na Tabela B.1, que representam também as expressões aplicáveis na maior das situações.

Tabela B.1 Expressões de F_1^*/F_2^* para redes uniformes grandes quando o volume das calotes não é tomado em conta.

Caso	Expressão Teórica
$C = 4$, linear	$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{2D_1^3 + 6d_1^2 l \left(\frac{l + D_2}{l + D_1} \right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1} \right)^4 \left(\frac{\pi l + 4d_1}{\pi l + 4d_2} \right)}{2D_2^3 + 6d_2^2 l \left(\frac{l + D_2}{l + D_1} \right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1} \right)^4 \left(\frac{\pi l + 4d_1}{\pi l + 4d_2} \right)}$
$C = 4$, não linear	$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{2D_1^3 + 6d_1^2 l \left(\frac{l + D_2}{l + D_1} \right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1} \right)^4 \frac{q_{T1}}{q_{T2}}}{2D_2^3 + 6d_2^2 l \left(\frac{l + D_2}{l + D_1} \right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1} \right)^4 \frac{q_{T1}}{q_{T2}}}$
$C = 6$, linear	$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{2D_1^3 + 6d_1^2 l + 6d_1^2 l_h \left(\frac{l + D_2}{l + D_1} \right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1} \right)^4 \left(\frac{\pi l + 4d_1}{\pi l + 4d_2} \right)}{2D_2^3 + 6d_2^2 l + 6d_2^2 l_h \left(\frac{l + D_2}{l + D_1} \right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1} \right)^4 \left(\frac{\pi l + 4d_1}{\pi l + 4d_2} \right)}$
$C = 6$, não linear	$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{2D_1^3 + 6d_1^2 l + 6d_1^2 l_h \left(\frac{l + D_2}{l + D_1} \right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1} \right)^4 \frac{q_{T1}}{q_{T2}}}{2D_2^3 + 6d_2^2 l + 6d_2^2 l_h \left(\frac{l + D_2}{l + D_1} \right)^2 \left(\frac{d_2}{d_1} \right)^4 \frac{q_{T1}}{q_{T2}}}$

B.5.4.2 Valor de q_T constante

A dedução das expressões é similar à efectuada na secção anterior, mas, assumindo agora que q_T é constante. Deste modo, a razão entre os valores F^* pode ser escrita na forma

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \frac{\Delta P_{T1} \left(\frac{E_{R1}}{E_{R2}} \right)^2 \frac{L_{x2}}{L_{x1}} \left(\frac{L_{y1}}{L_{y2}} \right)^2}{\Delta P_{T2}} \quad (\text{B.147})$$

As expressões para três termos da expressão anterior já foram obtidas na secção, pelo que a sua dedução não vai ser repetida aqui. Mesmo o termo correspondente à razão entre as quedas de pressão total através da rede pode ser obtido facilmente usando Equações B.131 e B.132, obtendo-se as seguintes expressões

$$\frac{(\Delta P_T/q_T)_1}{(\Delta P_T/q_T)_2} = \left(\frac{d_2}{d_1} \right)^4 \left(\frac{\pi l + 4d_1}{\pi l + 4d_2} \right), \text{ linear} \quad (\text{B.148})$$

$$\frac{(\Delta P_T/q_T)_1}{(\Delta P_T/q_T)_2} = \left(\frac{d_2}{d_1} \right)^4, \text{ não linear} \quad (\text{B.149})$$

Novamente vai ser analisado o caso de uma rede uniforme com $C = 6$ incluindo o volume das calotes. Usando as expressões deduzidas atrás para os diferentes termos da Equação B.147, após simplificação obtém-se a seguinte expressão para regime laminar

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \left(\frac{d_2}{d_1} \right)^4 \left(\frac{\pi l + 4d_1}{\pi l + 4d_2} \right) \left(\frac{l + D_2 - 2h_2}{l + D_1 - 2h_1} \right) \left(\frac{2D_1^3 + 6 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) d_1^2 l + 3d_1^2 l_h - 4 \left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) h^2 \left(\frac{3}{2} D - h \right)}{2D_2^3 + 6 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) d_2^2 l + 3d_2^2 l_h - 4 \left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) h^2 \left(\frac{3}{2} D - h \right)} \right)^2 \quad (\text{B.150})$$

e para regime não linear a seguinte expressão

$$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \left(\frac{d_2}{d_1} \right)^4 \left(\frac{l + D_2 - 2h_2}{l + D_1 - 2h_1} \right) \left(\frac{2D_1^3 + 6 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) d_1^2 l + 3d_1^2 l_h - 4 \left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) h^2 \left(\frac{3}{2} D - h \right)}{2D_2^3 + 6 \left(1 + \frac{1}{N_x} \right) d_2^2 l + 3d_2^2 l_h - 4 \left(6 - \frac{2}{N_y} + \frac{1}{N_x N_y} \right) h^2 \left(\frac{3}{2} D - h \right)} \right)^2 \quad (\text{B.151})$$

em que l_h e l estão relacionados pela expressão $l_h = 2l \sin \theta + (2 \sin \theta - 1)(D - 2h)$.

Como na secção anterior é possível também obter expressões para redes grandes e quando o volume das calotes é desprezado. Na Tabela B.2 apresentam-se as expressões para redes grandes sem tomar em conta o volume das calotes, que são as menos complexas e mesmo assim aplicáveis na maior parte das situações com em erro desprezável quando comparadas com as expressões completas.

Tabela B.2 Expressões de F_1^*/F_2^* para redes uniformes grandes quando o volume das calotes não é tomado em conta.

Caso	Expressão Teórica
$C = 4$, linear	$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^4 \left(\frac{\pi l + 4d_1}{\pi l + 4d_2}\right) \left(\frac{l + D_2}{l + D_1}\right) \left(\frac{2D_1^3 + 6d_1^2 l}{2D_2^3 + 6d_2^2 l}\right)^2$
$C = 4$, não linear	$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^4 \left(\frac{l + D_2}{l + D_1}\right) \left(\frac{2D_1^3 + 6d_1^2 l}{2D_2^3 + 6d_2^2 l}\right)^2$
$C = 6$, linear	$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^4 \left(\frac{\pi l + 4d_1}{\pi l + 4d_2}\right) \left(\frac{l + D_2}{l + D_1}\right) \left(\frac{2D_1^3 + 6d_1^2 l + 3d_1^2 l_h}{2D_2^3 + 6d_2^2 l + 3d_2^2 l_h}\right)^2$
$C = 6$, não linear	$\frac{F_1^*}{F_2^*} = \left(\frac{d_2}{d_1}\right)^4 \left(\frac{l + D_2}{l + D_1}\right) \left(\frac{2D_1^3 + 6d_1^2 l + 3d_1^2 l_h}{2D_2^3 + 6d_2^2 l + 3d_2^2 l_h}\right)^2$

C. Apêndices do Capítulo 5

C.1 Introdução

Aqui são apresentados os apêndices associados ao Capítulo 5. Os objectivos de cada secção são descritos de seguida.

- Na Secção C.2 é descrita a estratégia implementada na representação dos perfis de concentração ao nível local. Esta baseia-se na representação dos valores de concentração de traçador nas câmaras, tomando em atenção a estrutura da grelha definida pelos centros das câmaras. Descrevem-se também as estratégias implementadas para reduzir as dimensões dos ficheiros de resultados e criar filmes mostrando a evolução do campo de concentração no tempo e no espaço.
- Na Secção C.3 são deduzidas as expressões dos momentos que caracterizam o transporte de massa numa rede uniforme. A análise efectuada serve de base à definição de um parâmetro adimensional, γ , que permite determinar a importância relativa do transporte de massa por convecção e dispersão numa rede uniforme (ver Secção 5.3.8).
- Na Secção C.6 são listadas e caracterizadas as perturbações implementadas no gerador de transporte de massa. Nestas incluem-se as perturbações mais usuais, como por exemplo degraus e impulsos.

- Na Secção C.7 são apresentadas e analisadas as condições em que é possível definir sem ambiguidades C_0 , valor de concentração necessário para adimensionalizar as equações de balanço material escritas para os elementos da rede. A relação com as características da perturbação imposta na entrada de fluido na rede é analisada em detalhe.
- Na Secção C.8 são deduzidas as expressões analíticas que caracterizam o comportamento transiente das câmaras associadas aos canais de entrada de fluido na rede para as perturbações apresentadas na Secção C.6. As condições de aplicabilidade das expressões obtidas são também analisadas.

C.2 Visualização das características do transporte de massa ao nível dos elementos da rede

A forma mais simples de caracterizar a influência das características geométricas da rede e das condições de escoamento no transporte de massa é a observação visual da evolução no tempo e no espaço do perfil de concentração de traçador nas câmaras e nos canais. O algoritmo implementado baseia-se na resolução das equações de balanço material nas câmaras, em que os atrasos dos canais foram incluídos explicitamente. Assim, no simulador de transporte de massa apenas se considerou a representação dos valores de concentração nas câmaras. Alguns aspectos importantes tiveram de ser tomados em conta, sendo estes descritos nas subsecções seguintes.

C.2.1 Formato dos ficheiros de resultados

De modo a reduzir o tamanho dos ficheiros de dados contendo os perfis de concentração local de traçador nos elementos da rede foi usado o formato HDF, *Hierarchical Data Format*. Trata-se de um formato binário desenvolvido pela NCSA para o armazenamento de dados científicos, sendo a sua utilização livre. No endereço www.uiuc.ncsa.edu/hdf é possível obter as bibliotecas para diferentes sistemas operativos e compiladores, manuais e exemplos de aplicação. Nas condições em que este trabalho foi realizado, a utilização deste formato é vantajoso em comparação com outros, sendo as razões principais apontadas de seguida.

- A utilização de ficheiros de resultados em formato texto é desvantajosa. Quando a rede possui um número elevado de elementos, ou quando se pretende criar um filme da evolução espacial e temporal do perfil de concentração, as necessidades de espaço em disco seriam excessivamente para o seu armazenamento. O formato HDF permite reduzir

as dimensões dos ficheiros obtidos, simplificando a sua transferência e a sua manipulação posterior.

- A possibilidade de utilização dos ficheiros de resultados em diferentes sistemas operativos sem ter de os modificar, e a existência de software público para o seu tratamento e visualização. Neste trabalho foi usado o programa Spyglass TransformTM para Apple Macintosh para tratamento e visualização dos resultados.
- A simplicidade de implementação no simulador de transporte de massa. Um dos aspectos mais importantes é a possibilidade de verificar os dados escritos e de definir escalas nos resultados.

C.2.1.1 Estrutura geométrica da rede

A representação dos valores de concentração de traçador nas câmaras deve tomar em conta a estrutura geométrica da rede. A imposição de valores constantes para os parâmetros l_0 e θ (ver Secção 3.4.5) no gerador da rede resulta numa grelha rectangular regular. Os seus nós são definidos pelas intersecções entre as linhas e as colunas de câmaras, como se observa na Figura C.1. No entanto, as câmaras dispõem-se segundo uma geometria quadrado centrado, o que complica a representação dos valores de f_i ou C_i . Para que a representação gráfica do perfil de concentrações seja correcta, os valores de f_i ou C_i foram estimados por interpolação para os nós não associados ao centro de uma câmara. Foram utilizadas as rotinas E01SAF e E01SBF da biblioteca científica NAGTM, a partir dos valores de concentração de traçador observados nas câmaras.

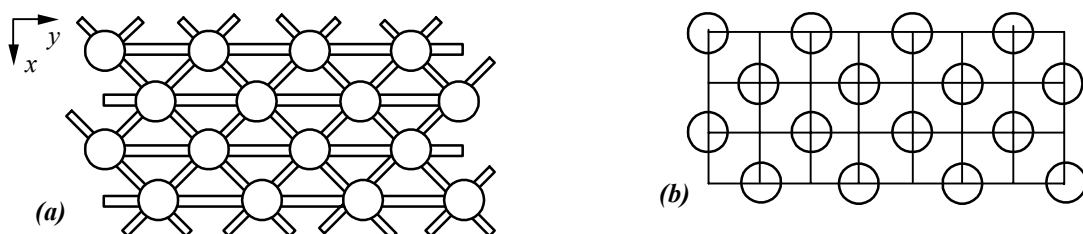


Figura C.1 Exemplo de uma rede com 4 linhas e 4 colunas tipo II (a) e respectiva rede regular (b), sendo indicada nesta última a posição das câmaras.

Na Figura C.2 são comparados dois *snapshots* do perfil de concentração obtidos no mesmo instante de tempo para as situações em que não se efectua a interpolação, Figura C.2a, e se efectua a interpolação, Figura C.2b. As condições geométricas de escoamento e de

perturbação impostas à entrada da rede são iguais nos dois casos. Quando não se efectua a interpolação, observa-se na Figura C.2a que o perfil de concentração é irregular, em particular na zona limite da pluma de traçador. Estas características devem-se à modificação da geometria da grelha associada às câmaras, que passa de uma geometria quadrado centrado para uma geometria quadrado simples, denunciada pelo carácter ondulatório da pluma.

Estas características não são visíveis na Figura C.2b, em que é apresentado o perfil de concentrações quando a interpolação dos valores de concentração é efectuada. Ao determinar por interpolação os valores de concentração de traçador nos nós não associados a uma câmara, as posições dos nós são fixadas e representadas na sua posição real na rede, não ocorrendo alterações na geometria da grelha derivados da sua representação gráfica.

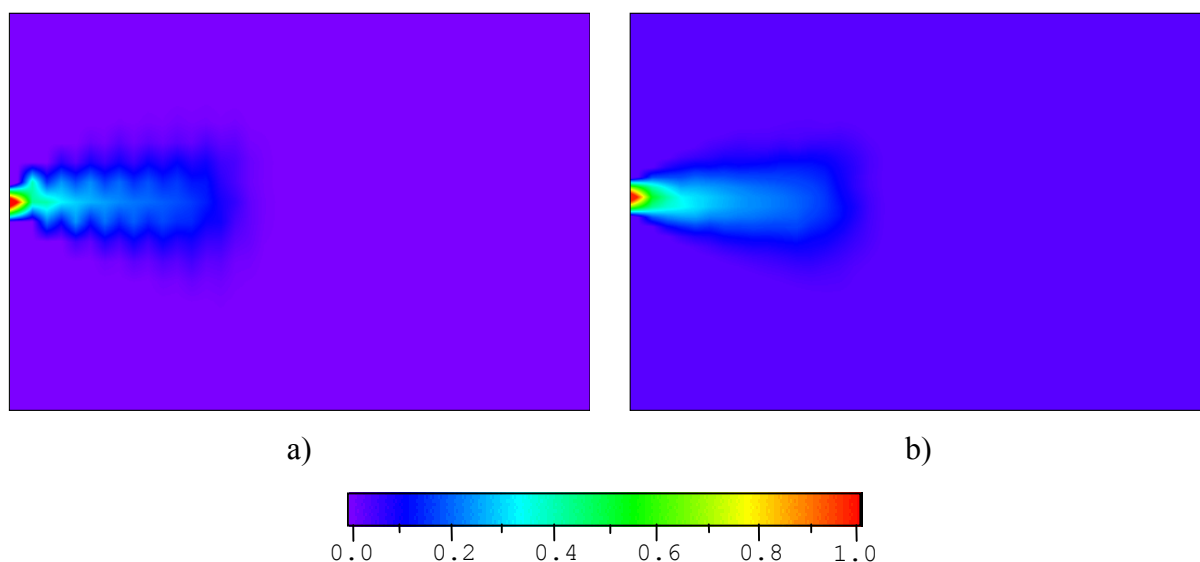


Figura C.2 Comparação dos perfis de concentração de traçador instantâneo no mesmo instante para uma perturbação pontual para: a) sem correcção; b) com correcção.

O procedimento de interpolação aumenta o esforço necessário na simulação da resposta da rede a uma perturbação de traçador. No entanto, a sobrecarga é pouco significativa quando comparada com o tempo necessário para resolver o sistema de equações de balanço material das câmaras. Deste modo a opção de interpolação foi considerada por defeito no simulador de massa.

C.2.1.2 Criação de filmes da evolução espacial e temporal do perfil de concentração

No simulador de transporte de massa foi implementada a possibilidade de criar ficheiros dos perfis de concentração de traçador para instantes previamente definidos. Após obter os

ficheiros de resultados em formato HDF, estes são tratados no programa Spyglass TransformTM para se obter as imagens do campo de concentração. De seguida, as imagens são lidas pelo programa QuicktimeTM para criar o filme. O processo foi automatizado, sendo possível alterar parâmetros como a tabela de cores e a número de fotogramas por segundo, para uma melhor visualização da evolução do campo de concentração.

Neste trabalho o número total de fotogramas pode ser variado mas o tempo entre estes é fixo e dependente de t_{Max} . Esta restrição pode ser significativa para os instantes iniciais da simulação, em que a influência das características da rede é mais significativa e poderia ser interessante usar tempos entre imagens mais pequenos. No entanto, o filme deixaria de ser representativo do comportamento real da rede de elementos visto que a escala temporal deixaria de ser a real.

C.3 Determinação das expressões dos momentos para uma rede uniforme

Na Secção 5.3.8 caracteriza-se o transporte de massa numa rede uniforme tendo em conta as suas características geométricas e de escoamento. Deste modo obteve-se uma expressão simples para a sua função de transferência, Equação 5.47. De acordo com o teorema de Van der Laan (Nauman e Buffham, 1983), os momentos centrados na origem da $E(t)$ podem ser obtidos usando a seguinte relação

$$\mu_n = (-1)^n \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial^n G(s)}{\partial s^n} \quad (C.1)$$

A equação anterior pode ser usada para determinar os momentos da função $E(\Theta)$, e a partir destas obter o valor do número de Peclet. Como este parâmetro é determinado a partir da comparação entre os segundos momentos estatísticos da resposta da rede e do modelo de Dispersão Axial (ver Secção 5.3.7.1), torna-se necessário determinar também o primeiro momento da $E(\Theta)$, M_1 . Este pode ser obtido a partir de μ_1 , de acordo com a seguinte relação

$$M_1 = \frac{\mu_1}{\tau_G} \quad (C.2)$$

De acordo com a Equação C.1, e usando a Equação 5.47, μ_1 é dado pela expressão

$$\mu_1 = (N_x + 1)\tau_j + N_x \tau_i^* \quad (C.3)$$

Substituindo as expressões de τ_j e τ_i^* na Equação C.3, obtém-se a seguinte expressão

$$\mu_1 = (N_x + 1) \frac{V_j}{q_j} + N_x \frac{V_i}{2q_j} \quad (\text{C.4})$$

Na expressão anterior tomou-se em conta as diferenças de estrutura entre a rede uniforme e a rede análoga de reactores perfeitamente agitados em série (ver Secção 5.3.8). Assumindo que as câmaras da rede possuem metade do volume das câmaras da rede uniforme, é possível escrever a Equação C.4 na forma

$$\mu_1 = (N_x + 1) \frac{V_j}{q_j} + N_x \frac{V_i^*}{q_j} = \frac{(N_x + 1)V_j + N_x V_i^*}{q_j} \quad (\text{C.5})$$

em que V_i^* é o volume equivalente das câmaras da rede análoga a uma rede uniforme. Comparando as Equações C.4 e C.5, $V_i^* = 0.5V_i$, sendo possível definir um diâmetro equivalente para as câmaras análoga, D^* . A relação entre dois parâmetros é definida pela seguinte relação

$$D^* = 0.5\sqrt[3]{4}D \approx 0.794D \quad (\text{C.6})$$

O tempo de passagem global na rede análoga pode ser calculado pela expressão

$$\tau_G = \frac{(N_x + 1)V_j + N_x V_i^*}{q_j} \quad (\text{C.7})$$

Usando as Equações C.5 e C.7 na Equação C.2, obtém-se $M_1 = 1$. Este resultado é igual ao obtido para o modelo de tanques agitados em série sem atrasos (Fogler, 1992).

O segundo momento centrado no valor médio da $E(\Theta)$, M_2 , pode ser obtido a partir do segundo momento centrado na origem da $E(t)$, μ_2' , usando a seguinte expressão

$$M_2 = \frac{\mu_2'}{\tau_G^2} \quad (\text{C.8})$$

O momento μ_2' pode ser obtido a partir da Equação C.1 usando a relação

$$\mu_2' = \mu_2 - \mu_1^2 \quad (\text{C.9})$$

em que μ_2 é obtido substituindo n por 2 na Equação C.1. Após simplificação, a seguinte expressão para μ_2' é obtida

$$\mu_2' = N_x \tau_i^{*2} \quad (\text{C.10})$$

Substituindo as Equações C.7 e C.10 na Equação C.8, obtém-se a seguinte expressão para M_2

$$M_2 = \frac{N_x \tau_i^{*2}}{\left[(N_x + 1) \tau_j + N_x \tau_i^* \right]^2} \quad (\text{C.11})$$

A expressão anterior pode ser simplificada de modo a isolar a influência dos canais, resultando na expressão

$$M_2 = \frac{1}{N_x} \frac{1}{\left[1 + \frac{N_x + 1}{N_x} \frac{\tau_j}{\tau_i^*} \right]^2} \quad (\text{C.12})$$

Comparando a Equação C.12 com a expressão de M_2 obtida no modelo de tanques em série em que não existem atrasos nas ligações entre estes, $M_2 = 1/N_x$ (Fogler, 1992), observa-se a existência de um termo adicional, função das razões entre o número de elementos da rede análoga e os tempos de passagem nas câmaras e canais. No limite em que $\tau_i \gg \tau_j$, as duas expressões são equivalentes. O termo adicional representa a influência dos canais na resposta da rede uniforme.

C.4 Determinação do factor de correcção das calotes para uma rede uniforme

Na Secção 5.3.8 foi estudado o comportamento previsto para uma rede uniforme, tendo-se mostrado que era possível obter expressões analíticas para Pe e Θ_B em função das dimensões segundo o sentido principal de escoamento e dos elementos da rede. O volume associado às calotes é tomado em conta corrigindo o volume de vazios associado aos canais da rede equivalente.

De acordo com a analogia entre uma rede uniforme e a rede equivalente de câmaras e canais em série (ver Secção 5.3.8), é necessário tomar em conta que nem todos os canais possuem o

mesmo número de calotes associadas. Em particular, observa-se que dos $(N_x + 1)$ canais da rede equivalente, $(N_x - 1)$ possuem duas calotes esféricas associadas aos seus extremos e 2 possuem apenas 1 calote. Estes canais correspondem aos canais de entrada e saída de fluido na rede. Para redes em que N_x é elevado, a influência do número de calotes nos extremos da rede equivalente será pouco significativa, mas deve ser tomada em conta em redes pequenas.

Quando existem calotes, a razão entre os tempos de passagem entre os canais e as câmaras da rede equivalente, τ_j / τ_i^* , é dada na forma

$$\frac{\tau_j}{\tau_i^*} = \frac{2V_j}{V_i} = \frac{2[V_{cam} - K_{N_x} V_{cal}]}{V_{cam}} \quad (C.13)$$

em que o factor correctivo K_{N_x} toma em conta o diferente número de calotes associados aos canais da rede, que toma as diferenças do número de calotes associados aos canais da rede equivalente. A expressão anterior considera apenas o volume de uma câmara e canal da rede equivalente. Assim, K_{N_x} representa o valor médio do número de calotes associadas aos canais da rede.

Para uma rede com N_x câmaras, o volume equivalente das calotes associadas a uma câmara é dada pela expressão

$$(V_{cal})_R = 2 \frac{N_x - 1}{N_x + 1} V_{cal} + \frac{2}{N_x + 1} V_{cal} \quad (C.14)$$

em que $(V_{cal})_R$ representa o volume de uma calote independentemente da posição do canal na rede equivalente em relação à entrada e à saída do fluido. Os termos do lado direito representam a percentagem de canais com duas e uma calotes associadas respectivamente. Simplificando a expressão anterior obtém-se

$$(V_{cal})_R = 2V_{cal} \frac{N_x}{N_x + 1} \quad (C.15)$$

Comparando as Equações C.13 e C.15, o factor correctivo é definido pela seguinte expressão

$$K_{N_x} = \frac{N_x}{N_x + 1} \quad (C.16)$$

fórmula usada na Secção 5.3.8.2 para deduzir as expressões analíticas que caracterizam o transporte de massa numa rede uniforme.

C.5 Dedução das relações entre as diferentes formas dos números de Peclet

Na determinação do número de Peclet, Pe , através da imposição da igualdade entre os segundos momentos estatísticos da resposta prevista pelo simulador a uma perturbação de traçador imposta na entrada da rede e a expressão analítica prevista pelo modelo de dispersão, é necessário usar L_x na definição deste grupo adimensional. No entanto, observa-se na literatura que os dados experimentais são muitas vezes representados na forma D_L/D_M em função de Pe_M (Bear, 1972; Dullien, 1992; Sahimi, 1995). Na Secção 5.4.2.1 mostrou-se que os valores previstos pelo simulador podiam ser expressos na forma $D_L/D_M = A_L Pe_M^n$, em que as constantes A_L e n são sobretudo função das características geométricas da rede e dos seus elementos.

De acordo com os resultados obtidos na análise do comportamento de uma rede uniforme, a constante A_L poderá ser expressa em função das dimensões das rede e das valores médios das dimensões características dos elementos da rede. O grupo adimensional Pe_M é obtido a partir de Pe usando a seguinte expressão

$$Pe_M = Pe \frac{D_L}{D_M} \quad (C.17)$$

Para uma rede uniforme, depende apenas de N_x e γ , pelo que é válido passa-lo para o lado direito, obtendo-se a expressão

$$Pe_M \frac{1}{Pe} = \frac{D_L}{D_M} \quad (C.18)$$

A expressão anterior é equivalente à relação de proporcionalidade definida atrás entre D_L/D_M e Pe_M , em que $A_L = 1/Pe$. Como $Pe = 2N_x(1+\gamma)^2$ para uma rede uniforme, a seguinte expressão geral é obtida para A_L

$$A_L = \frac{1}{2N_x(1+\gamma)^2} \quad (\text{C.19})$$

A expressão anterior é função das características geométricas dos elementos da rede e das dimensões desta no sentido principal de escoamento. Assim, na comparação com dados experimentais era necessário conhecer o número de linhas de câmaras equivalente de um dado meio poroso, o que poderia ser efectuado usando o modelo geométrico desenvolvido no Capítulo 3.

De acordo com a forma de representação dos dados experimentais que se encontra na literatura, foi considerada neste trabalho outra definição distinta para o número de Peclet, Pe_p , baseado no diâmetro das partículas D_G e na difusividade molecular D_M . Rigorosamente Pe_p apenas pode ser usado em conjunto com o modelo geométrico, visto a única situação em que D_p é tomado em conta explicitamente pelo modelo de redes.

Tomando em conta a definição de Pe_p , Equação 5.66, a seguinte relação é obtida para a relação de proporcionalidade entre D_L/D_M e Pe_M

$$Pe_p = Pe \frac{D_L}{D_M} \frac{D_p}{L_x} \Rightarrow \frac{D_L}{D_M} = \frac{1}{Pe} \frac{L_x}{D_p} Pe_p \quad (\text{C.20})$$

Usando a expressão analítica de Pe válida para uma rede uniforme obtém-se a seguinte expressão para a constante de proporcionalidade A_p

$$A_p = \frac{L_x}{2N_x(1+\gamma)^2 D_p} \quad (\text{C.21})$$

De acordo com as hipóteses consideradas na geração da rede (ver Secção 3.4.6), L_x pode ser obtido usando a seguinte expressão

$$L_x \approx (N_x + 1)(D + l_0 - 2h) \quad (\text{C.22})$$

Substituindo a Equação C.22 na Equação C.21 e simplificando, obtém-se

$$A_p \approx \frac{N_x + 1}{N_x} \frac{D + l_0 - 2h}{2N_x(1+\gamma)^2 D_p} \quad (\text{C.23})$$

Ao contrário da expressão obtida para A_p , Equação C.19, A_p depende sobretudo das características geométricas da rede e dos seus elementos. Para redes com valores elevados de N_x , A_p tende para um valor constante, permitindo assim a comparação dos resultados obtidos em redes com dimensões diferentes e dados experimentais. Nesta última situação deixa de ser necessário determinar o valor equivalente de N_x a partir das características do meio poroso.

No entanto, como A_p depende também de D_p , influenciando este parâmetro também as dimensões características dos elementos da rede, Pe_p foi usado apenas juntamente com o modelo geométrico (ver Secções 5.4.2.1 e 5.4.4).

C.6 Perturbações definidas explicitamente no simulador de transporte de massa

Na análise experimental do transporte de massa num meio poroso é comum usar apenas alguns tipos particulares de perturbações sobretudo para simplificar o tratamento dos resultados. A escolha depende do equipamento disponível e da maior ou menor facilidade no tratamento dos resultados obtidos. A última situação ocorre também no simulador de transporte de massa, em que se usaram preferencialmente perturbações em degrau espacialmente uniformes.

De modo a simplificar a entrada de dados no simulador de transporte de massa, algumas perturbações foram implementadas directamente no simulador. Estas são apresentadas na Tabela C.1 e a seguir descritas. As características espaciais das perturbações não foram tomadas em conta, sendo estas definidas no simulador de forma independente.

Para perturbações em degrau, impulso e degrau invertido, apenas é necessário definir o valor da concentração de entrada na rede, C_p . A função $H(t)$ representa a função de Heaviside, definida pela seguinte forma geral

$$H(t - t_d) = \begin{cases} 0 & t \leq t_d \\ 1 & t > t_d \end{cases} \quad (\text{C.24})$$

em que t_d representa o valor de tempo a partir do qual a função passa a ter um valor não nulo. O valor de t_d pode ser variável, sendo igual a zero para uma perturbação em degrau. Uma

perturbação em impulso foi sempre definida para $t = 0$. Para uma perturbação em pulso, além do valor de concentração de entrada, são definidos também os tempos entre os quais o pulso é definido, t_{p1} e t_{p2} .

Tabela C.1 Perturbações definidas explicitamente no simulador de transporte de massa.

Perturbação	Expressão analítica da perturbação
Degrau	$C_p H(t)$
Impulso	$C_p \delta(t)$
Pulso	$C_p [H(t - t_{p1}) - H(t - t_{p2})]$, $t_{p1} \geq 0, t_{p2} > t_{p1}$
Rampa	$A_R + B_R t$
Função sinusoidal	$A_{se} + B_{se} \sin(C_{se} t)$
Degrau Invertido	$C_p [1 - H(t)]$

A perturbação em rampa requer duas constantes, A_R e B_R , ambas com unidades de concentração. A utilização de duas constantes permite simular situações em que a rede se encontra inicialmente saturada de traçador e a concentração diminui linearmente, uma extensão à perturbação em degrau invertido. A perturbação sinusoidal requer a definição de três constantes, A_{se} , B_{se} e C_{se} . A utilização de três constantes permite definir perturbações em degrau em que o valor limite C_p varia de uma forma sinusoidal. Na definição das perturbações em rampa e sinusoidal, deve-se tomar em conta que valores de concentração de traçador têm de ser sempre maiores ou iguais a zero, de modo a serem fisicamente possíveis. Na versão actual do simulador de transporte de massa os parâmetros das perturbações deverão ser definidos de modo a que esta situação não ocorra, não existindo nenhuma protecção integrada no código desenvolvido.

C.7 Definição da concentração de adimensionalização

Na Secção 5.2.2 referiu-se que nem sempre é possível definir sem ambiguidade C_0 , parâmetro necessário para adimensionalizar as equações de balanço material escritas para os

elementos da rede. As condições que limitam a definição de C_0 dependem em particular das características da perturbação de traçador imposta na entrada da rede.

A restrição mais importante é a sua uniformidade espacial. Esta condição é válida independentemente do tipo de condições fronteira utilizada. Os dois tipos de condições fronteira implementados no simulador baseiam-se na definição da perturbação em termos de concentração de entrada. Esta deverá ser independente da posição de entrada de fluido, podendo no entanto variar no tempo. Para a condição de fluxo uniforme, o perfil de concentração é corrigido de acordo com a distribuição dos caudais nos canais de entrada na rede para o caso de fluxo uniforme de traçador. No entanto, os resultados da Secção 5.4.1.3 mostram que para redes com um número elevado de elementos, as diferenças das respostas para os dois tipos de condições fronteira são pouco significativas. No simulador a definição das características espaciais da perturbação e as condições fronteira é feita separadamente, pelo que a verificação desta condição é simples.

As características temporais da perturbação também influenciam a selecção de C_0 . Se para tempos elevados (pelo menos $t > \tau_G$) o valor de concentração definido pela perturbação tender para um valor constante, C_0 deverá ser igual ao maior valor de concentração definido pela perturbação. Notar que o valor limite e o valor máximo podem ser diferentes, como por exemplo para uma perturbação em pulso em que o valor limite para tempos elevados é igual a zero mas com um valor máximo igual a C_p (ver Tabela C.1). As perturbações em degrau, impulso, pulso e degrau invertido possuem estas características, devendo-se usar em qualquer delas $C_0 = C_p$.

Quando a perturbação pode ser definida como sendo a soma de duas partes, uma constante e a outra função do tempo, C_0 é igual ao valor constante. As perturbações sinusoidal e em rampa apresentadas na Tabela C.1 possuem estas características, sendo possível definir $C_0 = A_{se}$ e $C_0 = A_R$, desde que $A_{se} \neq 0$ e $A_R \neq 0$ respectivamente.

Na situação em que a perturbação é espacialmente não uniforme ou temporalmente irregular, não existe uma solução única para a definição C_0 . Diferentes possibilidades podem ser consideradas, tomando em conta ou não as características da perturbação de traçador. Em muitos casos, a perturbação possui algumas das características consideradas anteriormente, podendo esta informação ser usada na definição de C_0 . Um exemplo é uma perturbação em

degrau pontual de traçador, em que é válido fazer-se $C_0 = C_p$. Uma solução poderá passar pela definição de um valor médio de concentração, $\bar{C}_0$, de acordo com a expressão

$$\bar{C}_0 = \frac{1}{L_Y} \int_0^{L_Y} C_0(y) dy \quad (\text{C.25})$$

em que y é a coordenada na direcção normal ao escoamento. Quando a perturbação é espacialmente uniforme, $\bar{C}_0 = C_0$.

C.8 Expressões analíticas para caracterizar o comportamento das câmaras no topo da rede

Uma das estratégias descritas na Secção 5.3.4 para reduzir o erro cometido na resolução do sistema de equações passa pela utilização de expressões analíticas para determinar a resposta das câmaras na linha de entrada da perturbação na rede. Independentemente do tipo de perturbação, são as câmaras no topo da rede em que se observam as maiores variações na resposta a uma perturbação de traçador, em particular logo após a sua chegada. Assim, a utilização de expressões analíticas permite eliminar o erro associado com a chegada de traçador, permitindo usar valores mais elevados de Δt . Por outro lado, o número de equações a resolver simultaneamente em cada incremento temporal é reduzido, embora para redes com um número elevado de elementos a redução do esforço total seja pouco significativo.

Para as câmaras a seguir à linha de entrada de fluido na rede esta situação também se verifica. No entanto, as variações na concentração de traçador são amortecidas pelas câmaras no trajecto da entrada de fluido na rede, e a complexidade das expressões analíticas impedem a utilização da mesma estratégia em linhas de câmaras a seguir à do topo.

As expressões analíticas para caracterizar o comportamento de câmaras na linha de topo da rede apenas podem ser utilizadas no intervalo de tempo entre a chegada do traçador pelos canais oblíquos de entrada de fluido na câmara, e a chegada por qualquer outro tipo de canais associados a outra câmara, como por exemplo um canal horizontal. Para tempos superiores, a influência da resposta das câmaras nos extremos dos outros canais não associados à entrada de fluido na rede deve ser tomada em conta. A determinação de uma expressão analítica nestas condições é bastante complexa, sendo $F_i(t)$ determinado numericamente. Caso o traçador alcance primeiro a câmara por um canal qualquer que não seja um canal oblíquo de

entrada de fluido na rede ou após o traçador a resposta da câmara é sempre determinada numericamente.

A utilização de expressões analíticas deve tomar em conta a utilização de eventuais critérios de saturação (ver Secção 5.3.5.2). A sua verificação implica que o valor de concentração no interior da câmara passa a estar fixado, deixando de ser necessário calculá-lo.

A estratégia descrita é aplicável independentemente das características espaciais da perturbação. Apenas é necessário conhecer a forma da perturbação e ser capaz de resolver a equação de balanço material escrita para as câmaras no topo da câmara. No simulador foram implementados apenas as expressões analíticas correspondentes às perturbações listadas na Tabela C.1, correspondentes às perturbações cujo tratamento dos resultados é mais simples.

A determinação das expressões analíticas pode ser efectuada usando uma câmara com dois canais oblíquos de entrada, como se pode ver na Figura C.3. A câmara poderá ter outros canais de entrada de traçador, sendo o valor de concentração calculado numericamente a partir do momento em que o traçador alcança a câmara por outro canal diferentes dos apresentados na Figura C.3.

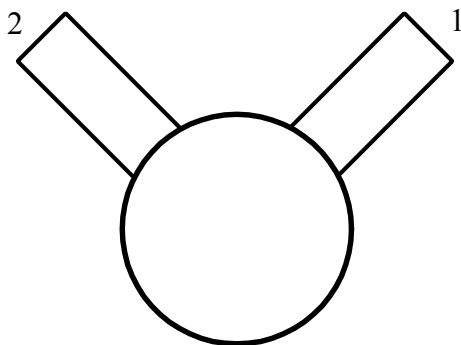


Figura C.3 Representação de câmara e dois canais associados usada para a determinação das expressões analíticas para descrever o comportamento transiente de uma câmara na linha de entrada de traçador na rede.

As expressões analíticas podem ser usadas mesmo quando a perturbação é espacialmente não uniforme, bastando apenas conhecer a forma da perturbação no tempo. Assim, vão ser obtidas as expressões analíticas para o caso em que não é possível adimensionalizar a equação de balanço material. Nestas condições, é possível escrever a seguinte equação de balanço material para a câmara apresentada na Figura C.3, na forma

$$\tau_c \frac{dC_c(t)}{dt} + C_c(t) = \alpha_1 C_1(t - \tau_1) + \alpha_2 C_2(t - \tau_2) \quad (C.26)$$

em que $C_c(t)$ e τ_c são a concentração e o tempo de passagem na câmara respectivamente. As funções $C_1(t - \tau_1)$ e $C_2(t - \tau_1)$ representam as perturbação de traçador definida em cada um dos canais de entrada na câmara. Estas são iguais quando a perturbação é espacialmente uniforme e se impõe a condição fronteira de concentração de entrada de traçador constante. A equação diferencial deve ser resolvida para a condição inicial $C_c(0) = 0$, com a excepção do degrau invertido, em que se deve usar $C_c(0) = C_p$. Notar que, caso existam outros canais de entrada de fluido na câmara, $\alpha_1 + \alpha_2 < 1$.

Notar que, mesmo quando a perturbação é espacialmente uniforme, a imposição de fluxo uniforme de entrada de traçador na rede para o caso em que existe uma distribuição não uniforme de velocidades nos canais de entrada de fluido resulta numa distribuição espacialmente não uniforme na concentração de traçador que entra na rede. Apesar de nestas condições ser válido adimensionalizar as equações de balanço material escritas para os elementos da rede (ver Secção C.7), a utilização das expressões analíticas requer o conhecimento da concentração real de entrada de traçador em cada um dos canais. Este aspecto foi tido em conta na implementação das expressões analíticas.

A equação C.26 é linear, permitindo a utilização da Transformada de Laplace na sua resolução. A transformada da concentração na câmara, $\bar{C}_c$, é dada pela expressão

$$\bar{C}_c(s) = \frac{\alpha_1 \bar{C}_1(s) e^{-\tau_1 s} + \alpha_2 \bar{C}_2(s) e^{-\tau_2 s}}{\tau_c s + 1} \quad (\text{C.27})$$

em que $\bar{C}_1(s)$ e $\bar{C}_2(s)$ são as transformadas das perturbações de traçador impostas em cada um dos canais de entrada de fluido definidos na Figura C.3. Para cada uma das perturbações listadas na Tabela C.1, as expressões analíticas de $C_c(t)$ obtidas por inversão de $\bar{C}_c$ são apresentadas na Tabela C.2.

Tabela C.2 Expressões analíticas obtidas para as perturbações listadas na Tabela C.1.

Perturbação	Expressão Analítica para $C_c(t)$
Degrau	$\alpha_1 C_1 [1 - e^{-(t-\tau_1)/\tau_c}] H(t - \tau_1) + \alpha C_2 [1 - e^{-(t-\tau_2)/\tau_c}] H(t - \tau_2)$

Impulso	$\alpha_1 C_1 e^{-(t-\tau_1)/\tau_c} H(t-\tau_1) + \alpha_2 C_2 e^{-(t-\tau_2)/\tau_c} H(t-\tau_2)$
Pulso	$\alpha_1 C_1 \{1 - e^{[t-(t_{p1}+\tau_1)]/\tau_c}\} H[t-(t_{p1}+\tau_1)] - \alpha_1 C_2 \{1 - e^{[t-(t_{p2}+\tau_1)]/\tau_c}\} H[t-(t_{p2}+\tau_1)] +$ $\alpha_2 C_1 \{1 - e^{[t-(t_{p1}+\tau_2)]/\tau_c}\} H[t-(t_{p1}+\tau_2)] - \alpha_2 C_2 \{1 - e^{[t-(t_{p2}+\tau_2)]/\tau_c}\} H[t-(t_{p2}+\tau_2)]$
Degrau Invertido	$C_1 \alpha_1 e^{-(t-\tau_1)/\tau_c} H(t-\tau_1) + C_2 \alpha_2 e^{-(t-\tau_2)/\tau_c} H(t-\tau_2)$
Rampa	$C_i(t) = \alpha_1 C_1 [1 - e^{-(t-\tau_1)/\tau_c}] H(t-\tau_1) + \alpha_2 C_2 [1 - e^{-(t-\tau_2)/\tau_c}] H(t-\tau_2) +$ $\alpha_1 B_R [(t-\tau_1) - \tau_c + \tau_i e^{-(t-\tau_1)/\tau_c}] H(t-\tau_1) +$ $\alpha_2 B_R [(t-\tau_2) - \tau_c + \tau_i e^{-(t-\tau_2)/\tau_c}] H(t-\tau_2)$
Sinusoidal	$C_i(t) = \alpha_1 C_1 [1 - e^{-(t-\tau_1)/\tau_c}] H(t-\tau_1) + \alpha_2 C_2 [1 - e^{-(t-\tau_2)/\tau_c}] H(t-\tau_2) +$ $\frac{\alpha_1}{1 + C_{se}^2 \tau_c^2} \left[\frac{\text{sen}[C_{se}(t-\tau_1)]}{C_{se}} - \tau_c \cos[C_s(t-\tau_1)] + \tau_i e^{-(t-\tau_1)/\tau_c} \right] H(t-\tau_1) +$ $\frac{\alpha_2}{1 + C_{se}^2 \tau_c^2} \left[\frac{\text{sen}[C_{se}(t-\tau_2)]}{C_s} - \tau_c \cos[C_s(t-\tau_2)] + \tau_i e^{-(t-\tau_2)/\tau_c} \right] H(t-\tau_2)$

A resposta da câmara a uma perturbação em degrau invertido pode ser obtida directamente da resposta a um degrau usando a seguinte expressão (Nauman e Bufham, 1983)

$$[C_c(t)]_{Pulso} = 1 - [C_c(t)]_{Degrau} \quad (C.28)$$

A expressão anterior permite simplificar a determinação da expressão analítica para a situação em que a perturbação é um pulso. Perturbações deste tipo são equivalentes à aplicação sucessiva de uma perturbação em degrau, aplicada em $t = t_{p1}$, e uma perturbação em degrau invertido, aplicado em $t = t_{p2}$. A resposta da câmara nestas situações pode obter-se facilmente tomando em conta as propriedades da transformada de Laplace, em particular a propriedade da translação (Kreysig, 1988).

As respostas da câmaras a perturbações em rampa ou sinusoidais são formadas por duas partes. A primeira parte corresponde à resposta a um degrau. A segunda parte corresponde à resposta a uma perturbação sinusoidal com $A_R = 0$ e uma perturbação em rampa com

$A_{se} = 0$. Como a equação de balanço material é linear, a resposta da câmara é igual à soma das respostas às duas perturbações, consideradas separadamente.

Quando se usa a condição fronteira de concentração de entrada espacialmente uniforme na rede, os valores de C_1 e C_2 são iguais a C_p para as perturbações em degrau, impulso, pulso ou degrau invertido, A_R para a perturbação em rampa e A_{se} para a perturbação sinusoidal. Nesta situação, deixa de ser necessário considerar variações locais de concentração originadas pela aplicação da condição fronteira de fluxo uniforme, sendo possível usar sempre concentrações adimensionais.

C.9 Análise do comportamento de uma câmara com diferenças apreciáveis dos caudais nos canais associados

Na Secção 5.4.3.4 foi referido que, quando as distribuições das velocidades nos canais são largas ou mesmo bimodais (rede com canais horizontais), o comportamento das câmaras e consequentemente da rede era controlado pelos canais com valores mais elevados de α_j^E . Esta situação foi usada para reduzir o tempo de simulação e de recursos computacionais necessários para descrever o transporte de massa na rede de elementos nestas condições.

Com o objectivo de analisar a validade ou não desta aproximação, considere-se a câmara apresentada na Figura C.4 com dois canais horizontais. As entradas e as saídas de traçador da câmara são indicadas pelas setas.

De acordo com as condições de escoamento típicas numa rede não uniforme, os valores dos caudais volumétricos nos canais horizontais são pelo menos duas ordens de grandeza menores que os caudais observados nos canais oblíquos. Deste modo, assumindo $q_j = 10^{-6}$ e $q_j = 10^{-8}$ para os dois tipos de canais, obtém-se $\alpha_j^E = 0.495$ e $\alpha_j^E = 0.005$ para canais oblíquos e horizontais respectivamente. Assumindo ainda que os tempos de passagem nos canais oblíquos são iguais a 1 e nos canais horizontais de entrada são iguais a 10 (diferença de valores típica de uma rede não uniforme), uma perturbação em degrau é imposta nos extremos dos canais de entrada de fluido na câmara, e que $\tau_i = 1$. Substituindo estes valores na equação geral de balanço material, obtém-se a seguinte expressão geral para o balanço material na câmara apresentada na Figura C.4

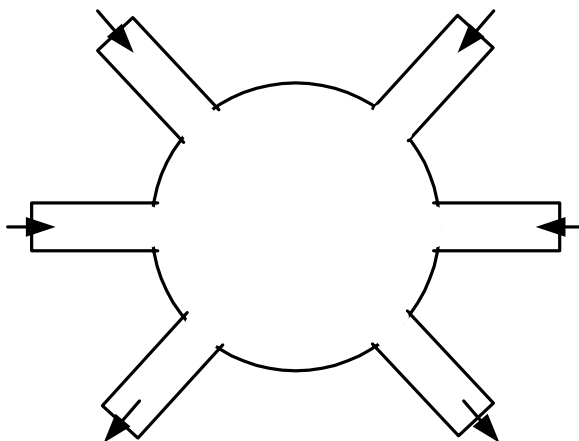


Figura C.4 Câmara considerada no exemplo com duas câmaras horizontais associadas.

$$\tau_i \frac{dF_i(t)}{dt} + F_i(t) = 0.995H(t-1) + 0.01H(t-10) \quad (\text{C.29})$$

para a seguinte condição inicial $F_i(t) = 1, t \leq 0$. Resolvendo a equação diferencial usando a Transformada de Laplace, obtém-se a seguinte expressão geral para $F_i(t)$

$$\begin{cases} F_i(t) = 0, & t < 1 \\ F_i(t) = 0.99 * [1 - e^{-(t-1)}] & 1 \leq t < 10 \\ F_i(t) = 0.99 * [1 - e^{-(t-1)}] + 0.01 * [1 - e^{-(t-10)}] & t \geq 10 \end{cases} \quad (\text{C.30})$$

Caso as câmaras horizontais não forem tomadas em conta, $\alpha_j^E = 00.5$ e a resposta da câmara é dada pela seguinte expressão

$$\begin{cases} F_i(t) = 0, & t < 1 \\ F_i(t) = [1 - e^{-(t-1)}] & t \geq 1 \end{cases} \quad (\text{C.31})$$

Na Figura C.5 são comparadas as respostas da câmara para os casos em que os canais horizontais são tomados em conta ou não. Observa-se que as diferenças são pouco significativas, em particular após a chegada do traçador à câmaras, período em que as variações são mais significativas.

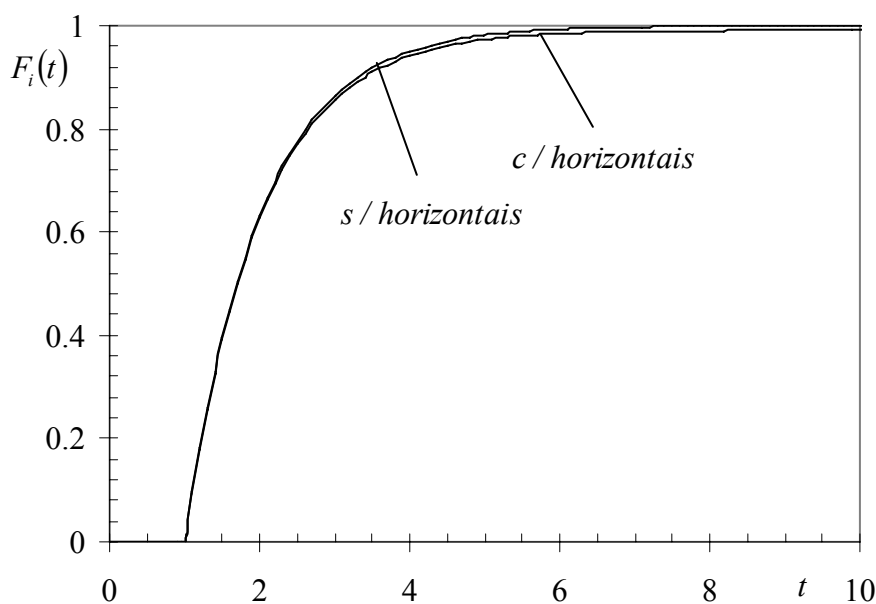


Figura C.5 Comparação das respostas da câmara exemplo a uma perturbação em degrau de traçador com e sem canais horizontais.

As diferenças no valor limite para tempos elevados entre redes com e sem canais horizontais deve-se ao facto do somatório dos valores de α_j^E , ser diferente nas duas situações. Apenas quando $t \geq 10$ é que a resposta do caso com canais horizontais tende para 1, não sendo essa situação representada na Figura C.5.

Tomando em conta que a influência dos canais horizontais no escoamento através da rede é pouco significativa, os resultados obtidos no exemplo permitem concluir que o transporte de massa é descrito adequadamente descrevendo o comportamento das câmaras e dos canais oblíquos. Deste modo, os valores de Θ_B e Pe vão ser insensíveis à presença ou não de canais horizontais, sendo influenciados apenas os valores dos parâmetros dependentes das características geométricas macroscópicas da rede, como por exemplo o coeficiente de dispersão axial D_L .

As conclusões são válidas também no caso em que não existem canais horizontais na rede mas a distribuição de valores de v_j é larga. No entanto, neste caso a influência do valor da razão d/D deve ser tomada em conta, visto que quando este parâmetro toma valores próximos de um, são os valores de τ_i que controlam o passo de integração que o é usado para resolver o sistema de equações de balanço material.