

## 2

### Fundamentos de fluxo multifásico em meios porosos.

O objetivo deste capítulo é introduzir os conceitos fundamentais que subjazem a física de fluxo multifásico e transporte através de meios porosos. Este capítulo trata de fluxos multifásicos, ou seja, sistemas em que diferentes fases líquidas, ou fases líquidas e sólidas, estão presentes simultaneamente. Os fluidos podem ser diferentes fases da mesma substância, tais como um líquido e seu vapor, ou de diferentes substâncias, tais como um líquido e um permanente de gás, ou de dois líquidos. Em sistemas fluido-sólido, o líquido pode ser um gás ou um líquido, ou gases, líquidos e sólidos podem coexistir em todo o fluxo domínio.

Sem maior especificação, quase toda a Mecânica dos Fluidos esta incluída no parágrafo anterior. Por exemplo, um líquido que flui em um ducto seria um exemplo de um sistema fluido-sólido. O antigo problema do fluido-dinâmicos que força em um corpo (por exemplo, uma folha ao vento), enquanto a ação do vento sobre ondas do mar seria uma situação envolvendo um gás e um líquido.

Neste sentido o termo é normalmente entendido, no entanto, *fluxo multifásico* denota um subconjunto de uma grande classe de problemas. A definição exata é difícil de formular, dado que, muitas vezes, se uma determinada situação deve ser considerada como um problema de fluxo multifásico depende mais de um ponto de vista - ou mesmo a motivação - do investigador do que sobre a sua natureza intrínseca. Pode haver muitos componentes, tais como a própria física do problema (por exemplo, o avanço de uma linha de contacto sólido-líquido-gás, ou a transição entre diferentes regimes de fluxo de gás-líquido). Esta complexidade limita fortemente a utilidade dos métodos puramente analíticos. Quando dois ou mais organismos interagem, ou o ambiente de fluxo não é simples, o poder de métodos de análise é ainda mais reduzido.

No laboratório, pode até ser difícil criar um experimento de fluxo multifásico com o necessário grau de controle. Além disso, muitas das técnicas

experimentais desenvolvidas para uma única fase de fluxo encontram graves dificuldades na sua extensão a sistemas multifásicos. Nesta situação, a simulação numérica torna-se um instrumento essencial para a investigação de fluxo multifásico. Frequentemente, a computação é a única ferramenta disponível para investigar cruciais aspectos físicos da situação de interesse, por exemplo, o papel da gravidade, ou da tensão superficial, que pode ser ajustado para valores arbitrários inatingíveis com experimentação física. Além disso, a complexidade dos fluxos multifásicos exige muitas vezes reduzidas descrições, por exemplo, através de equações, bem como a formulação de tais modelos reduzidos podem beneficiar muito da visão fornecida pelos resultados computacionais. Na última década, assistimos ao desenvolvimento de poderosas capacidades computacionais que tenham marcado uma viragem na investigação de fluxo multifásico.

A tecnologia fluxo multifásico desempenha um papel importante na indústria química e de processo. Sistemas que envolvam duas ou mais fases é comum em áreas de processamento de combustíveis e produtos químicos para a produção de alimentos para animais, alimentos, medicamentos e materiais especiais. Apesar da ampla utilização de sistemas multifásicos, a metodologia adotada para sua concepção é em grande medida baseada na intuição em vez de primeiros princípios. A principal razão para este estado de coisas é que a estrutura do fluxo local é extremamente complexa e o vínculo entre o micro e macro-escalas, não foi claramente estabelecido. Por conseguinte, a nossa compreensão dos problemas hidrodinâmicos encontrados em numerosos sistemas multifásicos permanece incompleta. A falta de informações detalhadas estruturais e dinâmicas na micro-escala, e as dificuldades matemáticas relacionadas com os métodos utilizados para a manipulação do fluxo multifásicos são as principais razões para a incapacidade de tratar estes fluxos puramente desde uma base teórica. A bem sucedida abordagem para a compreensão desse complexo fluxo exige dados fiáveis, que, por sua vez, dependem da implementação de técnicas sofisticadas capazes de medição não-invasiva inquérito, como de fornecer a informação necessária ao longo de todo o fluxo de campo. Além disso, é desejável que tais técnicas sejam propícias para a automação para reduzir a ampla participação humana no processo de recolha de dados. Os progressos na modelagem dos fenômenos de transporte em reatores multifásicos dependem da disponibilidade de tais ferramentas experimentais que podem fornecer os dados para a verificação do modelo.

## 2.1. Fases

A fase é um líquido, sólido, ou a gás que é separado do outro sólido, líquido ou gás por uma fronteira identificável. Um exemplo é uma bolha de petróleo ou óleo glóbulo submersa em água, onde o óleo e a água são fases e a demarcação física entre as duas fases líquidas é uma interface. Algumas transferências de material, dinâmica, e de energia podem ocorrer entre as fases, uma fase não precisa ter uma composição homogênea ou temperatura. Assim, embora gradientes de propriedades possam existir dentro de uma fase de acentuadas descontinuidades na composição em uma identificável fronteira são consideradas como as interfaces entre as fases.

A identificação dos componentes de um sistema não é suficiente para determinar a forma de modelá-lo. Modelos multifásicos devem ser formuladas para ter em conta os modos de transferência de constituintes químicos, saturação, e energia dentro de cada fase e em todas as interfaces.

## 2.2. Meio poroso e porosidade

O meio poroso é uma fase sólida composta de vazios distribuídos e conectados que permitem a percolação de fluidos.

*Meios porosos* são considerados aqui para expor um conjunto específico de atributos físicos que os distinguem dos sistemas multifásicos gerais. O mais notável deles são os requisitos que existem em mais de uma fase dentro de um determinado volume de controle, que um destas é um sólido relativamente imóvel, e que pelo menos uma dessas fases é um fluído (um líquido ou um gás). Além disso, a definição de uma mistura de fases, como um meio poroso requer que a fase sólida contenha espaços interligados que são acessíveis ao fluido.

Embora a definição de um meio poroso requeira que o sólido deva ser "relativamente" imóvel, uma especificação precisa do grau de mobilidade dos sólidos ou deformação, que é permitido por esta definição, não é possível. Em um extremo, um sólido imóvel, como a areia bem consolidada ou um bloco de

granito, pode constituir a fase sólida de um meio poroso. No outro extremo, um sólido, como a areia lavada do fundo do oceano carregado nas ondas não é um meio poroso. Para um meio poroso, a velocidade da fase sólida no que diz respeito ao limite do sistema é muito menor do que a velocidade do líquido que pode fluir dentro do sistema poroso.

Apesar do fato de que não é possível definir com precisão um meio poroso, vamos perseverar e identificar atributos adicionais de sistemas porosos em estudo aqui. Para ajudar à modelagem de fluxo em meios porosos, a porosidade no sólido deve, em geral, ser contínua e deve existir a possibilidade de o fluxo de fluido de um local para outro dentro do meio poroso. Assim, a estrutura do espaço poroso no estado sólido deve ser tal que existem caminhos que ligam as regiões do sistema. Para uma única fase de um sistema, a região do fluido será certamente ligada. No entanto, quando há mais de um fluido no espaço poroso conectado, um dos fluidos pode se dividir em um número de elementos distintos desligados. Os sistemas em que uma fase se desliga são muito difíceis de modelar, porque a física de cada região do fluido desligado deve ser contabilizada. O estudo dos meios porosos geralmente assume que a fase sólida está conectada.

No entanto, a definição de "conexão" para o sólido é imprecisa e a discussão pode desintegrar para o que isso significa grãos de areia se "tocando". No entanto, podemos fazer algo que satisfaça a observação de que para os sólidos em um meio poroso possuem o necessário grau de imobilidade, qualquer grão deve estar em contacto com outros grãos onde os pontos de interação mecânicos entre os grãos mudam muito lentamente em relação à taxa de variação das moléculas do fluido que interagem com um ponto específico sobre um grão. Esta observação não exclui a possibilidade de que os grãos vão se reorganizar ou deformar em resposta a várias tensões colocadas no sistema sólido, embora não sugere que o tratamento de consolidação de meios de comunicação, na qual os grãos são essencialmente cimentados em conjunto, podem ser um pouco mais simples.

Casos em que a deformação do sólido ocorre mais rapidamente e caoticamente, como em grãos ou uma avalanche de fluxo, não pode ser modelado como meio poroso.

Embora o volume total de poros dentro de uma amostra pode ser medida, em geral, a geometria e volume dos poros individuais não podem ser medidos.

Algumas informações específicas nesta pequena escala pode ser obtido para amostras de tamanho da ordem de  $1 \text{ cm}^3$  utilizando técnicas avançadas de imagens, mas, na melhor das hipóteses, apenas distribuições estatísticas dos tamanhos de poros de maiores amostras pode ser determinado. Cada um dos poros que ocorrem naturalmente terá uma seção transversal variável, e a granulometria é comumente utilizada como um substituto para o tamanho do poro.

Os grãos de um mesmo tipo de solo podem ter diferentes valores de porosidade dependendo do tipo de empacotamento como se mostra nas figuras 1, 2 e 3.

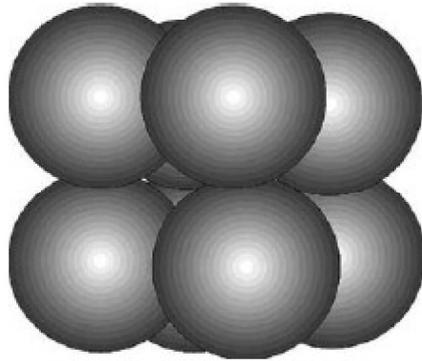


Figura 1 - Empacotamento cúbico de esferas gera uma porosidade de 0.48.

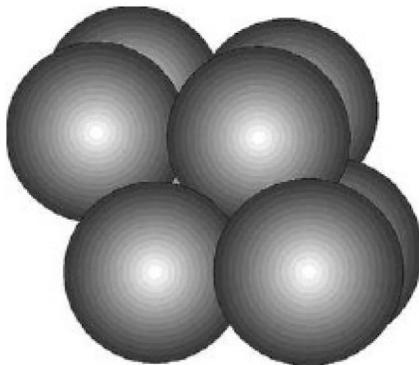


Figura 2 - Empacotamento rombóide de esferas gera uma porosidade de 0.26.

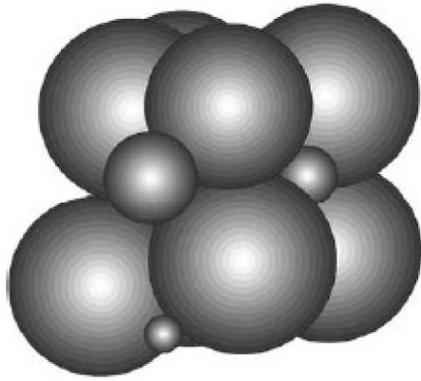


Figura 3 - Pequenos grãos tendem a ocupar espaços deixados entre os maiores gerando menores porosidades.

### 2.3. Tensões superficiais e interfaciais

Enquanto os efeitos físicos da pressão sobre o fluxo de um fluido em um meio poroso são bastante simples de descrever, a relação entre as pressões nas fases adjacentes ao fluido separadas por uma interface é mais complexa. Esta situação ocorre quando mais de um fluido está presente. Antes de falar sobre o impacto desta situação dentro de um meio poroso. De interesse é a explicação dos fatores que influenciam a interação entre as superfícies dos fluidos.

A interface é definida como o contorno entre duas fases não miscíveis como, por exemplo: líquido-gás; líquido-líquido; líquido-sólido e gás-sólido.

No caso do contato de um fluido com o seu vapor saturante, a tensão na interface entre estes fluidos é denominada tensão superficial (Shaw, 1998 *apud* Borges, 2002).. Esta tensão é a energia potencial armazenada na superfície de um líquido quando este está se espalhando e pode ser descrita como o trabalho realizado por unidade de área para criar uma interface em contato com o ar. Também, pode ser pensada como uma força por unidade de comprimento ao longo do contato molhante entre o líquido e o sólido ao qual está aderido. De forma geral, altos valores de tensão superficial resultam em maior pressão capilar fazendo com que os fluidos requeiram uma maior força para se espalharem, resultando eventualmente em uma saturação residual mais elevada. A tensão superficial é uma característica do fluido a uma temperatura determinada, enquanto que a tensão interfacial depende também da outra fase

com a qual o fluido está em contato. Se uma das fases é um gás, a interface é chamada de superfície e a tensão é superficial, embora não haja diferença fundamental entre superfície e interface. A tensão interfacial é definida como a energia potencial associada às áreas de contato ou interfaces do tipo líquido-líquido ou líquido-sólido. A formação da interface entre duas fases e o fenômeno da tensão interfacial são explicados pelas forças de curto alcance entre moléculas.

No caso do contato ar - água, as moléculas que se encontram na interface ficam submetidas a forças de atração não equilibradas em decorrência das forças de atração do ar serem menores do que as forças de atração na água, resultando em uma força direcionada para o interior do líquido, como apresentado na Figura 4.

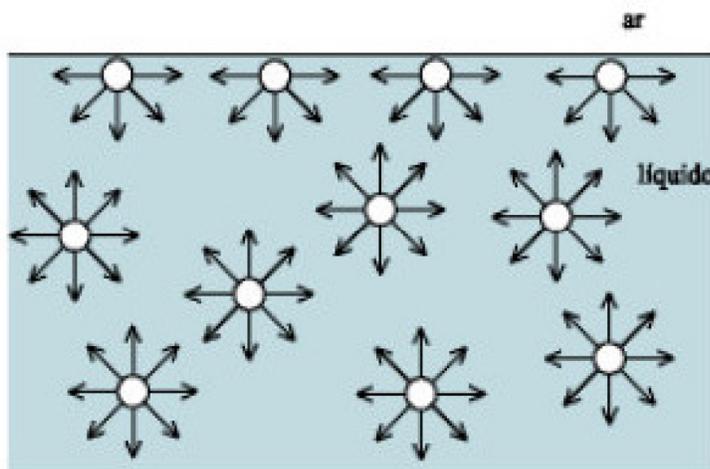


Figura 4 - Forças de atração entre moléculas no interior e na superfície de um líquido (Shaw, 1998 *apud* Borges, 2002 ).

Como consequência das forças entre as moléculas estarem em desequilíbrio, forma-se uma membrana contráctil na interface. Quando a superfície de contato aumenta, se efetua um trabalho para manter uma superfície unitária na água, a mesma que possui uma quantidade determinada de moléculas por unidade de superfície. Isto é realizado, passando as moléculas do interior da massa de água à superfície. Este trabalho é frequentemente referido como a energia de superfície livre do líquido, sendo a tensão interfacial

uma força por unidade de comprimento requerida para formar uma nova superfície.

#### **2.4. Molhabilidade**

Quando tratamos de sistemas que envolvem a presença de fluidos imiscíveis, é necessário considerar não só a interface entre um gás e um líquido, mas também as forças que estão atuando na interface de duas fases líquidas imiscíveis, e entre os líquidos e a superfície sólida. A combinação de todas estas forças determina tanto a molhabilidade como a pressão capilar do meio poroso. A tensão de adesão, a qual é função da tensão interfacial, determina qual fluido molhará de forma preferencial à superfície sólida.

#### **2.5. Fluxo e Distribuição de NAPL no Solo**

Os NAPLs ou fases líquidas não aquosas englobam os solventes líquidos ou os hidrocarbonetos líquidos derivados de petróleo, que são imiscíveis quando em contato com a água e/ou com o ar. Estes se dividem em líquidos menos densos do que a água, chamados de LNAPLs (gasolina, óleo diesel, etc.) e líquidos mais densos do que a água, denominados DNAPLs (solventes clorados: tricloroetano, tricloroetileno (TCE), cloro fenóis, tetracloroetileno (PCE), entre outros).

A infiltração de NAPLs no subsolo, como consequência de acidentes (vazamentos e derramamentos) com caminhões, dutos, tanques de armazenamento, etc., constitui um grave problema ambiental. Apesar de serem considerados imiscíveis com a água, os NAPLs eventualmente apresentam constituintes com solubilidades que podem exceder aos padrões de qualidade da água, contribuir para contaminação dos aquíferos e, conseqüentemente, tornar inapropriada a água coletada em poços para abastecimento. Com a presença destes contaminantes no solo, pode ocorrer fluxo bifásico na zona saturada do solo (fases água e NAPL) ou fluxo trifásico na zona não saturada (fases água, NAPL e ar). Entre os fatores que afetam o fluxo de dois fluidos imiscíveis em um meio poroso, podem-se mencionar as forças capilares, viscosas e gravitacionais;

propriedades dos fluidos (massa específica, viscosidade dinâmica, tensão interfacial); propriedades químicas e físicas das superfícies (rugosidade, molhabilidade, se são ou não surfactantes) e morfologia do espaço poroso, (Sahimi, 1994, Charbeneau, 2000, Simmons *et al.*, 2003), bem como, volume de NAPL derramado, área de infiltração, duração do vazamento, condições de fluxo no subsolo, entre outros (Feenstra e Cherry, 1988).

Durante o transporte multifásico, a distribuição do fluxo através do solo é influenciada pelas heterogeneidades do meio poroso. Ainda, os constituintes do NAPL podem se particionar para o solo (adsorção), para a água (passando a ser transportados como um soluto), ou para o ar presente no meio poroso, sendo transportados pela fase gasosa. Tipicamente, um constituinte tem a tendência para todas as partições. Ambos, o NAPL e os seus constituintes, também podem ter a capacidade para biodegradação. Os diversos componentes químicos, com propriedades diferentes, poderão sofrer advecção, dispersão, sorção, degradação química e/ou biológica, volatilização e dissolução.

Se um NAPL for derramado na superfície do solo em quantidade suficiente, este vai se mover pela zona vadosa sob o efeito da gravidade até o lençol freático. Ainda, eventualmente vai ocorrer o espraiamento lateral e difusão desta fase em função do gradiente de pressão capilar.

Segundo Schwille (1981,1984), o avanço da frente de saturação do NAPL na zona vadosa vai ocorrer enquanto a saturação dessa fase no meio for maior do que a residual. Caso contrário, o fluxo do contaminante vai cessar e a fase ficará imóvel sob a forma de glóbulos isolados nos poros. Isto pode acontecer em função das forças capilares ou da adsorção de constituintes no solo. A saturação residual é um importante parâmetro para a remediação de água subterrânea e é usualmente maior na zona saturada do que na zona vadosa (Borden e Kao, 1992 *apud* Bicalho, 1997). Segundo Mercer e Cohen (1990), na zona vadosa, a saturação residual está entre 0,10 e 0,20, enquanto na zona saturada, varia entre 0,15 e 0,50.

A compreensão dos mecanismos que controlam o fluxo multifásico e a distribuição de fases dos contaminantes é fundamental para se poder prever o avanço de uma contaminação no solo e ter êxito nos esforços de remediação,

uma vez que ocorra um vazamento ou derramamento de NAPL (Huling e Weaver, 1991).

### 2.5.1. Fluxo de LNAPL

O movimento de LNAPLs no subsolo é controlado por diversos processos como ilustrado no simplificado cenário da Figura 5 e explicado a seguir.

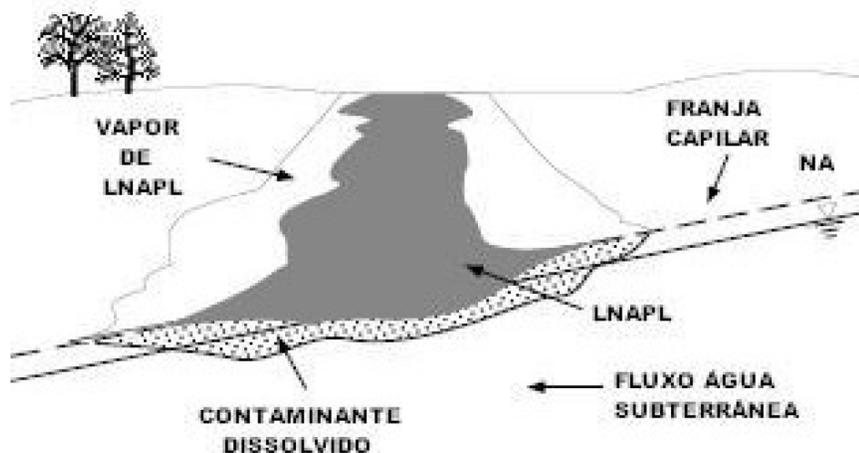


Figura 5 - Modelo conceitual do comportamento do LNAPL no meio poroso.

Uma vez na superfície do solo, o LNAPL vai infiltrar-se na zona não saturada devido às forças capilares e da gravidade. Se um volume pequeno de contaminante for derramado, eventualmente não alcança o lençol freático, podendo ficar retido nos poros ou nas fraturas do meio. Com a infiltração da água da chuva, a percolação do NAPL pode ser acelerada ou mobilizar a fase, que eventualmente ficou retida na zona vadosa, ou ainda, dissolver os constituintes orgânicos solúveis e transportá-los para o lençol freático formando uma pluma de contaminantes dissolvidos (Mendoza e McAlary, 1990 *apud* Bedient *et al.*, 1994). Esse contaminante retido constitui uma fonte de contaminação prolongada da água subterrânea, uma vez que lentamente vai sendo dissolvido pela água que se infiltra na superfície do solo. Portanto, é extremamente importante o entendimento do comportamento dos NAPLs na zona não saturada.

Durante a infiltração até o lençol freático, pode ocorrer o desvio ou retenção de todo ou parte do fluxo pelas heterogeneidades geológicas, volatilização, solubilização da fase na água presente no solo, assim como a retenção do contaminante por forças capilares. Deste modo, o LNAPL pode existir na região não saturada como uma fase contínua, livre, retida ou gasosa.

Embora, geralmente em menor quantidade, a migração da fase gasosa também pode espalhar a contaminação. A partição dos constituintes, para o solo, água, ar e NAPL, exerce uma grande influência no seu destino no meio ambiente.

Ao atingir o lençol freático, o LNAPL, por ser um fluido não molhante e menos denso do que a água fica suspensa sobre o nível d'água (Weaver *et al.*, 1994, Newell *et al.*, 1995) podendo se mover lateralmente como uma fase livre contínua sob forças capilares e da gravidade. A migração lateral é controlada pela distribuição de carga de LNAPL acumulado sobre a franja capilar e, em geral, espera-se que seja maior na direção do fluxo da água subterrânea (Weaver *et al.*, 1994, Newell *et al.*, 1995, Fetter, 1993). Um acúmulo relativamente grande de NAPL sobre o lençol freático pode ter como conseqüência, a compressão ou colapso da franja capilar e, potencialmente, diminuição do nível d'água subterrâneo (Newell *et al.*, 1995).

A variação sazonal do nível freático também ocorre e ao baixar faz com que a fase móvel se desloque junto. À medida que o nível baixa, o NAPL se move deixando uma fase residual. Então, quando o nível freático volta a se elevar, o LNAPL acompanha, mas parte fica retida na zona saturada com saturação residual, representando uma fonte de contaminação nessa região (Fetter, 1993).

## **2.6. Concentração**

A *concentração* de espécies químicas em um fluido será introduzida aqui para concluir este capítulo. A relativamente curta abordagem deste ponto não implica que o estudo das concentrações de espécies é simples ou sem importância. De fato, o estudo do transporte de produtos químicos, suas reações

dentro de uma fase e sua transferência entre as fases é um estimulante e oportuno problema que não é fácil. Tal como acontece com saturação, porosidade e pressão, a concentração é uma das variáveis primitivas em simulação matemática. A sua evolução é descrita por uma equação de conservação e propriedades do fluido que dependem da concentração de seus constituintes químicos. Além disso, a concentração de um material é o reflexo da quantidade total da solução. Assim, as questões de escala que envolvem o tamanho da amostra na qual a concentração é medida são importantes. Nesta seção são exploradas medidas da concentração de constituintes dissolvida em um líquido. Se os produtos químicos são dissolvidos em uma fase da água, eles são referidos como os solutos na água solvente, bem como a fase é referida como uma solução aquosa.

A concentração é geralmente expressada em termos de massa de soluto por unidade de volume de solução.

Em situações de campo, normalmente se trabalha com uma concentração em termos de partes por milhão (ppm) adimensional definida com a relação:

$$ppm = \frac{\text{massa do soluto}}{\text{massa da solução}} \times 10^6 \quad \dots\dots\dots (2.1)$$

Alternativamente, a concentração é às vezes expressa em partes por bilhão (ppb), quando:

$$ppb = \frac{\text{massa do soluto}}{\text{massa da solução}} \times 10^9 \quad \dots\dots\dots (2.2)$$

Concentrações em termos de partes por bilhão são freqüentemente utilizadas em estudos de contaminação orgânica da água. Alguns produtos químicos são considerados perigosos para a saúde em concentrações da ordem de 1 ppb. Em tão baixa concentração, a dissolução química pode ter um impacto mínimo sobre as propriedades do fluxo da fase. No entanto, a circulação do produto químico em relação à fase é importante para o estudo.

As concentrações também são expressas em termos de moles de um componente por volume. Quando um contaminante adere a uma fase sólida, a sua concentração em relação ao sólido também pode ser expressa como massa por massa de sólido. O material anexado a sólidos subsuperficiais é imóvel, salvo que se dissolva nos fluídos em contato com o sólido.

### **2.6.1. Partição de Solutos**

Os solutos são substâncias químicas dissolvidas em uma solução. Diferentes soluções podem coexistir em um meio poroso, como água, ar e fases imiscíveis (óleo, gasolina, etc.), cada uma constituindo uma fase separada. Quando se deseja investigar o fluxo e o transporte de contaminantes em meios porosos não saturados ou saturados, inevitavelmente, tem-se que lidar com sistemas multifásicos consistindo de água, ar e solo. Além disso, em alguns casos, como por exemplo, derramamentos de hidrocarbonetos derivados de petróleo existem mais uma fase, que é líquida e imiscível com a água.