

3

Modelagem Matemática do Aquecimento de um Solo

A profundidade de penetração do calor dentro de uma massa de solo e a amplitude de variação diárias de temperatura são influenciadas pelas propriedades térmicas do solo. A penetração de calor durante um dia é da ordem de 0,3 a 0,8m.

O fluxo de calor em solos, embora não venha sendo muito estudado na área geotécnica, é extremamente importante com relação: à poluição térmica, à permanente estabilização do meio poroso por aquecimento, à transmissão de eletricidade pelo subsolo e, por fim, à remediação de áreas degradadas utilizando-se do aquecimento do subsolo, que é o objetivo deste trabalho.

Inicialmente será dado um tratamento paralelo para fluxo de água e de calor, para uma melhor visualização dos efeitos térmicos com base no tão difundido e conhecido estudo de fluxo de água através dos solos.

Fluidos e calor fluem através do solo, para cada razão de fluxo, J_i , tendo uma relação linear com o correspondente gradiente, X_i , de acordo com:

$$J_i = L_{ii} \cdot X_i \quad (2)$$

onde: L_{ii} – coeficiente de condutividade para um dado fluxo.

A equação 2 pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\begin{array}{lll} \text{Fluxo de água -} & q_h = k \cdot i_h \cdot A & \text{Lei de Darcy} \\ & & (3) \end{array}$$

$$\begin{array}{lll} \text{Fluxo de calor -} & q_t = \lambda \cdot i_t \cdot A & \text{Lei de Fourier} \end{array}$$

onde: q_h – fluxo de água, q_t – fluxo de calor.

k – condutividade hidráulica, λ – condutividade térmica.

i_h , i_t gradientes hidráulico e térmico respectivamente.

A Tabela 4 mostra as analogias entre fluxo de água e de calor. Como as vazões e os gradientes são correlacionados linearmente, o tratamento matemático para cada tipo de fluxo é o mesmo, e as soluções para o fluxo de água podem ser usadas para fluxo de calor utilizando-se de valores apropriados e condições de contorno representativas.

Tabela 4 – Analogias de Fluxo (Mitchell, 1993).

	Fluído	Calor
Potencial	Carga Total h (m)	Temperatura T ($^{\circ}\text{C}$)
Estocagem	Volume de fluido V (m^3 / m^3)	Energia térmica u (J / m^3)
Condutividade	Condutividade hidráulica k_h (m / s)	Condutividade térmica λ_t (Watt / m / $^{\circ}\text{C}$)
Vazão	q_h (m^3 / s)	q_t (J / s)
Gradiente	$i_h = -\frac{\partial h}{\partial x}$ (m / m)	$i_h = -\frac{\partial T}{\partial x}$ ($^{\circ}\text{C} / \text{m}$)
Continuidade	$\frac{\partial V}{\partial t} + \nabla q = 0$	$\frac{\partial \mu}{\partial T} + \nabla q_t = 0$
Reg. Estacionário	$\nabla^2 q_h = 0$	$\nabla^2 q_t = 0$
Capacitância	Coefficiente de variação de volume $M = \frac{dW}{dh} = \frac{\gamma_w a_v}{1 + e} = \frac{k_h}{c_v}$	Aquecimento volumétrico C ($\text{J} / ^{\circ}\text{C} / \text{m}^3$) $C = \frac{dQ}{dT}$
Difusão	$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{k}{M} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$ $\left(\frac{k}{M} = c_v \right)$	$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{C} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ $\left(\frac{\lambda}{C} = D \right)$

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 9924939/CB

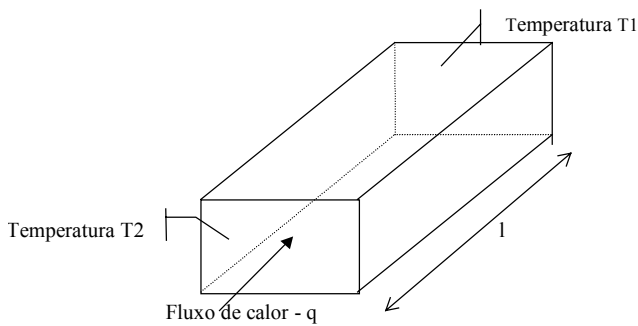
3.1

Condutividade Térmica e Capacidade de Aquecimento Volumétrico

O fluxo de calor através do solo envolve operações simultâneas de vários mecanismos de transporte. A condução é responsável pelo fluxo de calor através dos materiais sólidos, enquanto que através dos poros três mecanismos ocorrem em paralelo: condução, convecção e radiação. Quando a água está presente o calor latente de destilação é um fator adicional envolvido na transferência de calor. (Jackson e Taylor, 1986)

Em vários casos, se certas condições são observadas, mecanismos de transferência de calor que não sejam por condução podem ser negligenciados e a modelagem matemática da condução de calor em solos homogêneos e isotrópicos podem ser aplicadas para descrever o fluxo de calor em solos. O termo transferência de calor irá se referir somente à transferência de calor por condução.

O fluxo de calor por condução pode ser comparado ao fluxo de um fluido. A permeabilidade hidráulica é análoga a condutividade térmica. A condutividade térmica (λ) é definida como a quantidade de calor que passa numa unidade de tempo através de uma unidade transversal, devido a um gradiente de temperatura aplicado na direção do fluxo, conforme equação 4.



$$T_2 > T_1$$

$$\lambda = \frac{q}{A \cdot (T_2 - T_1) / l} \quad (4)$$

onde:

λ – condutividade térmica

A – área da seção transversal

q – fluxo de calor

A condutividade térmica é a propriedade essencial que controla o fluxo de calor. O uso do termo condutividade térmica é bem empregado pois a condução de calor em condições normais ocorre essencialmente por condução. Valores de condutividade térmica para vários materiais estão listados na Tabela 5. A faixa de valores de condutividade térmica para solos finos, tais como: siltes, argilas siltsosas, siltes argilosos e argilas é de 0,25 a 2,5 W/m.^oK de acordo com Mitchell (1993). Esta faixa de variação é para solos saturados. Em se tratando de solos não saturados estes valores podem ser bem mais baixos. Na Tabela 5 também estão listados os valores de capacidade de aquecimento, calor de fusão e calor de vaporização da água. O calor de fusão é usado para análise de congelamento do meio poroso e o calor de vaporização é aplicado em situações onde existe transições fase líquido-vapor.

Como a condutividade térmica da parte mineral do solo é em média aproximadamente $1,7 \text{ W / (m } ^\circ\text{K)}$ e as condutividades térmicas da fase de água e ar são $0,6$ e $0,026 \text{ W / (m } ^\circ\text{K)}$ respectivamente, o calor se transfere principalmente através das partículas sólidas. Devido à condutividade térmica da água ser maior do que a do ar, um solo úmido tem uma condutividade térmica maior do que um solo seco.

Tabela 5 – Propriedades Térmicas de Materiais Distintos (modificado de Mitchell, 1993).

Condutividade Térmica	Material	W / m / °K
	Ar	0,024
	Água	0,60
	Gelo	2,25
	Granito	2,76
	Folhelho	1,56
	Cobre	389
	Valores médios de solos	0,25 – 2,9 (~1,7)
	Quartzo	8,4
	Matéria Orgânica	0,25
Calor específico	Material	cal / g °C
	Quartzo	0,175
	Valores médios de solos	0,175
	Matéria orgânica	0,46
	Água	1,00
	Ar	0,24
Capacidade de Aquecimento Volumétrico	Material	cal / cm³ °C
	Água	1,0
	Valores médios de solos	0,46
	Quartzo	0,46
	Matéria Orgânica	0,60
	Ar	0,00029
Calor de Fusão	Água	333 kJ / kg
	Solo	$3,40 \times 10^4 \left(\frac{w}{100} \right) \cdot \gamma_d \text{ kJ/m}^3$
Calor de Vaporização	Água	2,26 MJ / kg
	Solo	$230 \left(\frac{w}{100} \right) \cdot \gamma_d \text{ MJ / m}^3$

Onde γ_d – peso específico seco e w – umidade

A capacidade de aquecimento volumétrico (C) por unidade de volume de um dado solo é a energia de calor necessária para mudar a temperatura de seu volume unitário de $1 \text{ } ^\circ\text{C}$. Este coeficiente é definido como o produto do calor específico - c ($\text{cal / g } ^\circ\text{C}$) e da massa específica seca - ρ (g / cm^3).

$$C = \rho_d \cdot c \quad (5)$$

O calor específico é função da temperatura, crescendo linearmente quando a temperatura cresce, principalmente para solos de granulometria grossa. A terceira lei da termodinâmica diz que o calor específico de qualquer material deve se aproximar de zero quando a temperatura se aproxima do zero absoluto.

O volume total de um dado solo é composto pelas fases sólidas, líquidas e gasosas. Esses componentes se apresentam como, $X_s(V_s/V)$, $X_w(V_w/V)$ e $X_a(V_a/V)$ respectivamente, então:

$$C = X_s C_s + X_w C_w + X_a C_a \quad (6)$$

onde:

C_s , C_w e C_a são as capacidades de aquecimento volumétrico por unidade de volume dos sólidos, água e ar respectivamente.

A capacidade de aquecimento volumétrico de solos pode ser estimada de acordo com Sangre (1968):

$$C = \frac{\gamma_d}{\gamma_w} \cdot \left(0,18 + 1,0 \cdot \frac{w}{100} \right) \cdot C_w \quad (7)$$

onde:

γ_d – peso específico seco

w – umidade gravimétrica em percentagem

γ_w – peso específico da água.

Quando existir fluxo transiente, o comportamento térmico de um solo é governado não somente pela condutividade térmica mas também pela sua capacidade de aquecimento volumétrico.

Outro coeficiente útil na transferência de calor é a difusividade térmica (D). Matematicamente a difusividade térmica é a razão da condutividade pelo produto do calor específico e densidade ($D = \lambda / c \cdot \rho_d$).

Altos valores de difusividade térmica implica na capacidade de mudanças rápidas e consideráveis na temperatura. Um solo deve ter uma difusividade

térmica muito maior quando está congelado do que quando estiver descongelado, devido a dois fatores: os altos valores de condutividade térmica de solos congelados e os baixos valores de calor específico do gelo quando comparado à água líquida.

A resistividade térmica (inverso da condutividade) é tida como a resistência ao calor que está fluindo, e segundo Brandon e Mitchell (1989) esta é influenciada pelos seguintes fatores:

- mineralogia – depende dos minerais constituintes (feldspato e quartzo apresentam uma maior condutividade térmica, conseqüentemente areias apresentam maiores condutividades térmicas)
- peso específico seco – quanto maior, maior a condutividade térmica, relacionado com o contato entre os grãos.
- distribuição granulométrica – solos bem graduados conduzem o calor melhor que solos uniformes (relação com o índice de vazios)
- quantidade de água na compactação- solos compactados úmidos e posteriormente secados para uma baixa umidade apresentam maior condutividade térmica que aqueles compactados a baixa umidade.
- temperatura – todos os minerais cristalinos no solo mostram um decréscimo na condutividade térmica com um aumento da temperatura. Entretanto a condutividade térmica da água aumenta significativamente com o aumento de temperatura, e a condutividade térmica de poros saturados de ar aumenta com o aumento de temperatura.

A temperatura num meio poroso depende de alguns fatores, tais como: diferença na intensidade de absorção de calor de um solo (relacionado à sua coloração), variações do calor específico do solo (composição mineralogia e umidade), e, diferenças na condutividade térmica (grau de compactação e umidade).

Em geral, experimentos tem mostrado um aumento da condutividade térmica devido ao aumento do peso específico seco, este acréscimo é especialmente importante no caso de solos secos. Um peso específico seco maior implica em maior quantidade de material sólido por volume de solo, e melhores contatos térmicos entre grãos.

Jonhansen (1975) propôs uma equação com base em observações empíricas para estimar a condutividade térmica em função de seu peso específico seco, de acordo com:

$$\lambda = \frac{0,135\gamma_d + 64,7}{2700 - 0,947\gamma_d} \pm 20\% \quad (8)$$

onde:

γ_d – peso específico seco (kg/m^3)

e λ – condutividade térmica (W/m.K)

Quando o vazio que estava ocupado pelo ar é ocupado pela água a condutividade térmica tende a crescer, a magnitude de crescimento irá depender do tipo de solo. Por exemplo, numa areia a condutividade térmica irá crescer rapidamente com um aumento da umidade. O aumento da condutividade térmica do solo devido a umidade, depende não somente da substituição da água pelo ar, como também nas mudanças da ligação água-solo, assim como nas características peculiares das interfaces físico-químicas da água.

Kersten (1949), como base em experimentos em 19 solos naturais propôs duas relações, uma para solos finos e outra para solos arenosos, que correlaciona a condutividade térmica linearmente com a umidade de acordo com:

$$\lambda = 0,1442(0,9 \log w - 0,2).10^{0,6243\gamma_d} \quad \text{solos finos} \quad (9)$$

$$\lambda = 0,1442(0,7 \log w + 0,4).10^{0,6243\gamma_d} \quad \text{solos arenosos}$$

onde:

γ_d – peso específico seco (g/cm^3)

λ – condutividade térmica (W/m.K)

w – umidade gravimétrica

Segundo o autor acima citado estas relações resultariam em resultados com $\pm 25\%$ de diferença encontrada. Farouki (1981) encontrou diferenças da ordem de $\pm 50\%$.

Jonhansen (1975) expressou a condutividade térmica de um solo não saturado como função da condutividade térmica seca (λ_{seco}) e saturada (λ_{sat}) para um mesmo peso específico seco. Introduzindo o conceito de condutividade térmica normalizada, chamada de número de Karsten (λ_e):

$$\lambda_e = \frac{\lambda - \lambda_{\text{seco}}}{\lambda_{\text{sat}} - \lambda_{\text{seco}}} \quad (10)$$

Ou seja a condutividade térmica de um solo não saturado será dada por:

$$\lambda = (\lambda_{\text{sat}} - \lambda_{\text{seco}})\lambda_e + \lambda_{\text{seco}} \quad (11)$$

onde: λ_{seco} é dado pela equação (8).

Com base nos dados de Kersten (1949), Jonhansen determinou as seguintes relações, para solos finos e grossos:

$$\lambda_e \cong \log S + 1 \quad \text{solos finos} \quad (12)$$

$$\lambda_e \cong 0,7 \cdot \log S + 10 \quad \text{solos grossos}$$

onde: S – grau de saturação

Nos casos de solos saturados, Jonhansen observou que variações na microestrutura apresentariam um efeito na condutividade térmica. Para se determinar a condutividade térmica saturada o autor propôs uma equação geométrica baseada nas condutividades térmicas e volumes relativos de seus constituintes:

$$\lambda_{\text{sat}} = \lambda_s^{(1-n)} \cdot \lambda_w^n \quad (13)$$

onde: λ_s - condutividade térmica do solo

λ_w - condutividade térmica da água

n – porosidade.

Para o cálculo da condutividade térmica saturada tem-se que conhecer a condutividade térmica do solo, esta pode ser estimada de acordo com:

$$\lambda_s = \lambda_q^q \cdot \lambda_o^{(1-q)} \quad (14)$$

onde: λ_q - condutividade térmica do quartzo (7,0 W/mK)

λ_o - condutividade térmica dos outros minerais (2,0W/m.K ou 3,0 W/m.K se houver menos de 20% de quartzo)

q – relação da quantidade de quartzo com a fração total dos sólidos.

Obtendo-se os valores da condutividade térmica seca (equação 8), condutividade térmica de Kersten (equação 12) e a condutividade térmica saturada (equação 13) pode-se determinar a condutividade térmica para um solo não saturado. Na literatura internacional recomenda-se o uso da formulação proposta por Jonhansen quando se quiser estimar o comportamento da condutividade térmica para solos finos.

3.2 Fenômenos de Transferência de Calor

Estudos teóricos da transferência de calor em solos geralmente consideram o solo com um meio homogêneo e assume que todos os processos de transferência de calor acontecem uniformemente no meio poroso (De Vries, 1958).

Na realidade a transferência de vapor e a convecção do ar são importante somente em vazios cheios de ar; e o movimento líquido somente em vazios repletos de água, enquanto que a evaporação e a condensação são associadas com interfaces ar/água.

Sobre algumas condições a transferência de calor por condução é o mecanismo predominante. Convecção e radiação são efeitos relativamente pequenos ou negligenciáveis, mas podem ter uma influência notável em certas situações.

Em solos não saturados ocorre a migração de calor pelo processo de evaporação seguido pela difusão do vapor e posterior condensação em outro local. Sendo este o processo que libera a transferência de calor, para estas circunstâncias.

- Processo de condução

A condução ocorre em todos os constituintes do solo: na parte sólida, na água (líquida, vapor ou gelo) e no ar.

A condução opera no ar e no vapor d'água pelo processo de colisão entre as moléculas e com um conseqüente aumento das suas energias cinéticas. Na fase líquida um mecanismo similar ao descrito anteriormente também é responsável pela transferência de calor. Entretanto, a transferência de energia também é feita por quebra e formação de pontes de hidrogênio nas moléculas de água. O fluxo de

calor nos sólidos cristalinos pode ser visualizado como a ocorrência do aumento das vibrações atômicas. A condução de calor pelo ar é relativamente desprezível. A quantidade de calor transferida por condução aumenta quando a densidade seca e o grau de saturação do solo aumentam.

- Processo de convecção

Convecção livre é o fenômeno de massa transportada devido a um gradiente de temperatura. Se há um injeção de vapor / água aquecida este mecanismo de transferência de calor se apresenta bastante relevante. A convecção é causada em fluídos devido a mudança de densidade do mesmo com a temperatura. Para altas temperaturas as densidades dos fluídos são menores, resultando num deslocamento ascendente. O fluído ao se deslocar carrega o calor consigo, criando uma distribuição de fluxo caracterizados por células poligonais (Farouki, 1986). Este processo de convecção livre resulta em correntes que se misturam facilitando a transferência de calor por condução.

Para um solo saturado existe um gradiente crítico de temperatura acima do qual ocorre a convecção. Quando este valor é atingido a transferência de calor cresce proporcionalmente com o quadrado do gradiente de temperatura. O parâmetro adimensional, número de Rayleigh, foi apontado como um critério significativo para meios porosos saturados (Johansen, 1975).

$$R_a = \frac{(\Delta T) \cdot a \cdot g \cdot h \cdot k}{D \cdot \nu} \quad (15)$$

onde:

ΔT – diferença de temperatura na camada do solo

h – espessura da camada

a – coeficiente de expansão do fluído

k – permeabilidade do material poroso

g - gravidade

ν - viscosidade cinemática do fluído

D – difusividade térmica do fluído

Se a espessura da camada de solo for muito grande, uma pequena diferença de temperatura irá resultar no mesmo R_a . Isto indica que o gradiente crítico de

temperatura é menor. A convecção aumenta a condutividade térmica efetiva e cresce proporcionalmente ao número de Rayleigh (Ra).

Em solos, a convecção através do ar e da água são usualmente negligenciáveis. Para tamanho médio de grãos do meio poroso menor que 1 mm a influência da convecção é mínima. O efeito de convecção se mostrou relevante para areias saturadas. (Johansen, 1975). Os poros (vazios) deveriam ser milimetricamente bem maiores para que o mecanismo de transferência convectiva pudesse ocorrer.

Outro fenômeno que pode acontecer é a convecção forçada. Esta ocorre quando correntes de ar ou água são forçadas a se mover através dos poros do solo por diferença de pressão. Um exemplo do efeito de convecção forçada ocorre no fluxo de água subterrânea. Esses efeitos de convecção forçada são usualmente encontrados em solos arenosos. Em areias finas este fenômeno pode causar um aumento da condutividade térmica em 20% (Johansen, 1975).

- **Processo de radiação**

A radiação ocorre através dos vazios do solo preenchidos com ar por propagação da energia de aquecimento, tais como ondas eletromagnéticas. Em solos, a radiação é normalmente negligenciada. Seu efeito em areias é menor que 1% da transferência total de calor a temperaturas atmosféricas normais. O efeito da radiação pode ser notado em materiais como o pedregulho.

- **Processo de evaporação/condensação**

Em solos não saturados, o aumento da temperatura em certas regiões causa a evaporação da água. Consequentemente a pressão de vapor local cresce e o vapor d'água se transporta através de difusão pelos poros interconectados a regiões de menor valor de pressão de vapor, se condensando nestas regiões. O coeficiente de difusão depende da temperatura.

Através do processo de evaporação/condensação uma quantidade significativa de calor pode ser transferida. A influência da difusão do vapor d'água aumenta com o decréscimo da massa específica seca (ρ_d) do meio poroso como causa do aumento dos vazios necessários no processo de transferência de calor.

3.3 Fluxos Acoplados

É assim denominado o fluxo de um certo tipo, tal como calor, governado por um gradiente potencial de outro tipo, tal como a água. Por exemplo, se é aplicado calor na extremidade de um corpo de prova, além do fluxo de calor, pode ocorrer paralelamente um fluxo de água devido ao gradiente de temperatura.

Em vários casos existem simultaneamente fluxos de diferentes tipos, até quando somente um gradiente de força está agindo. Por exemplo, quando a água contida nos poros de um solo contém elementos químicos e flui através da ação dos gradientes hidráulicos, existe simultaneamente um fluxo concorrente de ions através do solo. Pode-se dizer que um gradiente de um certo tipo pode causar fluxo de outro tipo, de acordo com:

$$J_i = L_{ij} \cdot X_j \quad (16)$$

onde:

L_{ij} – coeficiente acoplados

X_j – força governante (no fluxo de calor é o gradiente térmico)

Fluxos acoplados que podem ocorrer correlacionados com cargas hidráulicas e gradientes de temperatura estão listados na Tabela 6, juntamente com os termos comumente usados para descrevê-los. Termo-osmose é o fenômeno no qual ocorre um movimento de água devido a um gradiente de temperatura. Seu efeito é mais significativo em solos não saturados, sendo limitado nos solos saturados. A transferência de calor isotérmico é causada por fluxo de aquecimento juntamente com fluxo de água.

Tabela 6 - Fenômenos de fluxo acoplado e fluxo direto (Mitchell, 1993).

	Gradiente X_j	
Fluxo J_i	Carga Hidráulica	Temperatura
Fluído	Condução Hidráulica Lei de Darcy	Termo-osmose
Calor	Transferência Isotérmica de calor	Condução térmica Lei de Fourier

A teoria mais utilizada para fluxo acoplado de calor e umidade foi desenvolvida por Philip e de Vries (1957). Nesta teoria considera-se tanto o fluxo na fase líquida quanto a de vapor. Nobre e Thomson (1993) apresentam uma revisão detalhada sobre a formulação matemática para a análise de fluxo de umidade e calor em condições não isotérmicas em meios porosos não saturados.

O fluxo da fase vapor depende da difusividade de vapor térmica e isotérmica e é governado por gradientes de temperatura e de teor de umidade. Um aumento na temperatura causa um rápido aumento na pressão de vapor d'água, agindo como força diretora para a difusão do vapor nos vazios preenchidos com ar. O fluxo de vapor é particularmente importante em solos arenosos com baixos graus de saturação.

Já o fluxo da fase líquida depende das difusividades térmica e isotérmica do líquido e é governado por gradientes de temperatura e gravidade. A transferência de calor e umidade na fase líquida é particularmente importante para solos de granulometria fina. O aumento da temperatura faz com que a água adsorvida se torne água livre, simultaneamente a viscosidade da água é diminuída facilitando assim o seu movimento.

As equações que governam estes fluxos são as seguintes:

$$\text{para fluxo fase vapor: } \frac{q_{vap}}{\rho_w} = -D_{TV} \nabla_T - D_{\theta V} \nabla_\theta \quad (17)$$

$$\text{para fluxo fase líquida: } \frac{q_{liq}}{\rho_w} = -D_{TL} \nabla_T - D_{\theta L} \nabla_\theta - k_\theta i \quad (18)$$

onde:

q_{vap} – fluxo de vapor [$\text{g cm}^{-2} \text{s}^{-1}$]

ρ_w – densidade da água [g cm^{-3}]

T – temperatura [$^{\circ}\text{C}$]

θ - teor de umidade volumétrica [$\text{cm}^3 / \text{cm}^3$]

D_{TV} – difusividade térmica do vapor [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1} \text{ } ^{\circ}\text{C}^{-1}$]

$D_{\theta V}$ – difusividade isotérmica do vapor [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$]

q_{liq} – fluxo líquido [$\text{g cm}^{-2} \text{s}^{-1}$]

D_{TL} – difusividade térmica do líquido [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1} \text{ } ^{\circ}\text{C}^{-1}$]

$D_{\theta L}$ – difusividade isotérmica do líquido [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$]

k_{θ} - condutividade hidráulica não saturada [cm s^{-1}]

i – vetor unitário na direção vertical

A difusividade térmica do vapor é dada por:

$$D_{TV} = \left(\frac{D_0}{\rho_w} \right) \cdot v \cdot \alpha (a + \theta) \cdot h \xi \left(\frac{d\rho_0}{dT} \right) \quad (19)$$

A difusividade isotérmica do vapor é dada por:

$$D_{\theta V} = \left(\frac{D_0}{\rho_w} \right) \cdot v \cdot \alpha \cdot a \left(\frac{\rho_0 \cdot h \cdot g}{R \cdot T} \right) \left(\frac{\Psi}{d\theta} \right) \quad (20)$$

onde:

D_0 – difusividade molecular do vapor d'água no ar [L^2 / T] = $0,220 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ para pressão de 1 atm. e temperatura de 273.1K

v - fator fluxo massa = $P / (P-p)$

P – pressão total de gás nos vazios [mmHg]

p – pressão parcial do vapor de água nos vazios [mm Hg]

α - fator de tortuosidade para difusão de gases em solos $\cong 0,67$

a – umidade volumétrica do ar [$\text{cm}^3 / \text{cm}^3$]

h – umidade relativa do ar nos poros

ξ – razão da variação do gradiente de temperatura nos poros completamente ocupados por ar em relação ao gradiente de temperatura total (fator de correção incluído por Philip e de Vries (1957))

g – gravidade [L / T^2] = $9,81 \text{ m s}^{-2}$

R – constante universal dos gases [$\text{FL} / \text{M} / ^\circ\text{K}$] = $4,615 \times 10^6 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-2} \text{ K}^{-1}$

ρ_0 – densidade do vapor de água saturado [g cm^{-3}]

Ψ - sucção no solo [cm]

A difusividade térmica do líquido é dada por:

$$D_{TL} = k_{\theta} \left(\frac{\Psi}{\sigma} \right) \cdot \left(\frac{d\sigma}{dT} \right) \quad (21)$$

onde: σ - tensão superficial da água [F/L]

A difusividade isotérmica do líquido é dada por:

$$D_{\theta L} = k_{\theta} \left(\frac{d\Psi}{d\theta} \right) \quad (22)$$

O fluxo total q , de um solo não saturado devido à ação do gradiente de temperatura e seu resultante gradiente de umidade volumétrica é igual ao somatório dos movimentos da fase vapor e da fase líquida. Das equações 17 e 18 obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{q}{\rho_w} &= -(D_{TV} + D_{TL}) \cdot \nabla T - (D_{\theta V} + D_{\theta L}) \cdot \nabla \theta - k_{\theta} \cdot i \\ &= -D_T \cdot \nabla T - D_{\theta} \cdot \nabla \theta - k_{\theta} \cdot i \end{aligned} \quad (23)$$

onde:

$D_T = D_{TV} + D_{TL}$ difusividade térmica da água

$D_{\theta} = D_{\theta V} + D_{\theta L}$ difusividade isotérmica da água

A equação 23 governa o movimento de umidade devido a um gradiente térmico em solos não saturados. Diferenciando-se esta equação e aplicando-se a lei da condutividade resulta-se numa equação diferencial geral para fluxo de umidade:

$$\frac{\partial \theta}{\partial T} = \nabla(D_T \nabla T) + \nabla(D_{\theta} \nabla \theta) + \frac{\partial k_{\theta}}{\partial Z} \quad (24)$$

Já a equação de aquecimento para um solo é dada por:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \left(\frac{\lambda}{C} \cdot \nabla T \right) \quad (25)$$

onde:

λ – condutividade térmica [$\text{cal cm}^{-1} \text{s}^{-1} \text{°C}^{-1}$]

C – capacidade de aquecimento volumétrico [$\text{cal cm}^{-3} \text{°C}^{-1}$]

O uso das equações descritas acima requer o conhecimento de quatro relações que descrevem as propriedades do solo no sistema:

- condutividade hidráulica em função da umidade volumétrica
- condutividade térmica em função da umidade volumétrica
- capacidade de aquecimento volumétrico
- sucção em função do teor de umidade volumétrico

Tanto as distribuições de temperatura transiente quanto as estacionárias são calculadas utilizando-se da teoria de Philip e de Vries (1957).

O programa UNSATCHEM-2D, desenvolvido por Sophocleous (1979) é um programa para fluxo de calor. Nele o autor considera o fluxo de calor somente por convecção na fase líquida e por condução através dos grãos, desprezando o efeito da difusão do vapor de água, apresentando desta forma a seguinte equação para transporte de calor bidimensional:

$$C(\theta) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_{ij}(\theta) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - C_w \cdot q_i \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (26)$$

sendo: T – temperatura [°C]

k_{ij} – coeficiente de condutividade térmica do solo [$\text{cal cm}^{-1} \text{s}^{-1} \text{°C}^{-1}$]

$C(\theta)$ – capacidade de aquecimento volumétrica do meio poroso [$\text{cal cm}^{-3} \text{°C}^{-1}$]

C_w – capacidade de aquecimento volumétrica da fase líquida [$\text{cal cm}^{-3} \text{°C}^{-1}$]

Na equação 19, o primeiro termo representa o fluxo de calor por condução e o segundo termo o transporte de calor pelo fluxo de água. Não é considerado a transferência de calor latente por movimento de vapor, conforme descrito anteriormente.

De acordo com de Vries (1963) a capacidade de aquecimento volumétrico do meio poroso, $C(\theta)$ pode ser expressa por:

$$C(\theta) = C_n \cdot \theta_n + C_o \cdot \theta_o + C_w \cdot \theta + C_g \cdot \theta_a \cong (1,92\theta_n + 2,5\theta_o + 4,18\theta) \cdot 10^6 [J \cdot m^{-3} \cdot K^{-1}] \quad (27)$$

onde: θ - umidade volumétrica (os subscritos n, o, g, w representam a fase mineral, matéria orgânica, fase gasosa e fase líquida respectivamente).

Sophocleous (1979) estendeu para condições não-homogêneas e saturadas a teoria de Philip e de Vries (1957), apresentando uma analogia com o coeficiente de dispersão para transporte de solutos, escrevendo o coeficiente de condutividade térmica para meios não isotrópicos saturados como:

$$\lambda_{ij} = \lambda_T \cdot C_w \cdot |q| \cdot \delta_{ij} + (\lambda_L - \lambda_T) \cdot C_w \cdot \frac{q_i q_j}{|q|} + k_o \cdot (\theta) \cdot \delta_{ij} \quad (28)$$

onde:

$|q|$ - valor absoluto da velocidade real de Darcy $= \frac{v}{n}$

δ_{ij} - delta de Kronecker

λ_L e λ_T – condutividades térmicas longitudinais e transversais

Uma diferente formulação matemática é apresentada por Nobre (1991), Nobre e Thomson (1993) e Nobre et al. (1999) para a análise de fluxo de umidade e calor em condições não isotérmicas em meios porosos saturados e não saturados. Este modelo desenvolvido foi testado e simulado para diversos cenários, demonstrando que o tratamento de áreas degradadas com incremento de temperatura é viável.

Segundo os autores na investigação da influência da temperatura nos processos de transferência de massa, a interação entre gradientes transientes de temperatura e fluxo de umidade (tanto a água no estado líquido quanto no estado vapor) deve ser quantificada para o estabelecimento de um modelo físico conceitual.

Considerando-se que a transferência de umidade em meios porosos ocorre tanto na fase líquida quanto nas fases vapor e adsorvida, a equação de fluxo de umidade na fase líquida é obtida através da modificação da equação de Richards (1931) quando aplicada a sistemas não isotérmicos. Esta expressão modificada de acordo com Milly (1982) é dada por:

$$q_{li} = -\rho_l K_{\theta} \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} - \rho_w D_{Ta} \delta_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} - \rho_l K_{\theta} e_i e_j = \begin{cases} 0 & j = 1 \\ 1 & j = 2 \end{cases} \quad (29)$$

onde:

q_{li} - fluxo líquido ($\text{g cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)

ρ_w - densidade da água (g cm^{-3})

D_{Ta} - coeficiente relacionando com o aquecimento da água adsorvida ($\text{cm}^2 \text{s}^{-1} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$) -0,0013 para solos argilosos

K_{θ} - condutividade hidráulica não saturada do solo (cm s^{-1})

Ψ - carga de total de sucção (cm)

T - temperatura ($^\circ\text{C}$)

δ - delta de Kronecker.

A parte isotérmica da equação 29, a qual é dada pelo primeiro e último termo, difere da equação de Richards uma vez que esta é dada em termos de massa. A transferência de líquido na fase adsorvida é importante somente para materiais argilosos, sendo este termo muitas vezes desprezado, mesmo para estes materiais.

A variação do fluxo líquido como função da temperatura é proveniente dos efeitos da temperatura na viscosidade da água assim como na umidade volumétrica, através do termo da condutividade hidráulica. A obtenção do fluxo de umidade na forma de vapor é dada por:

$$q_{vi} = -\rho_l D_{\theta v} \delta_{ij} \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} - \rho_l D_{Tv} \delta_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (30)$$

onde: q_{vi} - fluxo de vapor [$\text{g cm}^{-2} \text{s}^{-1}$]

$D_{\theta v}$ - difusividade isotérmica do vapor [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$]

D_{Tv} - difusividade térmica do vapor [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$]

A equação de fluxo de umidade é obtida adicionando-se as equações de fluxo de umidade na fase líquida, Equação 29, e na fase de vapor, Equação 30, de forma a obter:

$$\frac{q_{mi}}{\rho_l} = -\left(K_\theta + D_{\theta v} \delta_{ij}\right)_l \frac{\partial \psi}{\partial x_j} - (D_{Ta} + D_{Tv}) \delta_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} - K_\theta e_j \quad (31)$$

O termo de armazenamento d'água θ_M é definido como sendo a quantidade total de água líquida e vapor por unidade de volume de meio poroso, ou seja:

$$\theta_m = \rho_l \theta + \rho_v \cdot a \quad (32)$$

onde:

θ - umidade volumétrica [$\text{cm}^3 / \text{cm}^3$]

a - umidade volumétrica do ar [$\text{cm}^3 / \text{cm}^3$]

ρ_v - densidade do vapor d'água [g cm^{-3}].

Ao aplicar-se o princípio da conservação de massa na equação de fluxo de umidade, obtém-se a equação geral que governa o fluxo de água transiente em um dado meio poroso, sob a influência de gradientes de temperatura e de pressão, ou seja:

$$\frac{\partial \theta_m}{\partial t} \frac{l}{\rho_l} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(K_\theta + D_{\theta v} \delta_{ij} \right)_l \frac{\partial \psi}{\partial x_j} - (D_{Ta} + D_{Tv}) \delta_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial K_\theta}{\partial x_i} e_j \quad (33)$$

Segundo Nobre et al. (1999) a expressão do fluxo de calor em meio poroso é dada pela extensão da equação da condução de calor de Fourier, considerando-se aquecimento convectivo e latente e por transferência de umidade. O fluxo total de calor num meio poroso parcialmente saturado, de acordo com Philip e de Vries (1957), e modificado por Milly (1982), se apresenta como:

$$q_{hi} = -\lambda_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} - \delta_l (L_\psi D_{\theta L} + \beta^{-1} g T D_{T_a}) \delta_{ij} \frac{\partial \psi}{\partial x_j} + c_{wl} (T - T_0) q_{mi} \quad (34)$$

onde:

λ_{ij} - condutividade térmica de um meio poroso úmido [$\text{cal cm}^{-1} \text{s}^{-1}$]

L - calor latente de vaporização da água [cal g^{-1}]

c_w - calor específico da água na fase líquida [$\text{cal g}^{-1} \text{°C}^{-1}$]

T_0 - temperatura de referência [°C]

β - fator de conversão de unidades ($4,2 \times 10^7$ para converter [$\text{cm}^2 \text{g s}^{-2}$] em [cal])

q_m - fluxo de umidade.

O primeiro termo da equação 34 considera o processo de transporte condutivo do calor, sendo este termo o mais significativo no mecanismo de transporte de energia térmica. O segundo termo representa a quantidade de calor latente transferida por movimento de vapor induzidos por gradientes de pressão, sendo relevante em regiões secas onde o fluxo de vapor é geralmente grande. Quando uma ínfima quantidade de água é adicionada a uma matriz de solo uma pequena quantidade de calor é descarregada e esta energia térmica é chamada de ‘calor de molhamento’. A transferência de ‘calor de molhamento’ é simbolizada no terceiro termo da equação 34 e somente é aplicada para materiais argilosos. O transporte convectivo de calor é representado pelo último termo da equação 34.

A quantidade total de energia térmica armazenada em um volume unitário de solo é definida por de Vries (1958) como sendo:

$$S_h = C_M (T - T_0) + L_0 \rho_v \theta_a - \rho_i \int_0^\theta W d\theta \quad (35)$$

onde:

S_h - teor térmico do meio poroso [cal cm^{-3}]

C_M - capacidade de aquecimento volumétrico do meio seco [$\text{cal cm}^{-3} \text{°C}^{-1}$]

L_0 - calor latente de vaporização numa dada temperatura de referência T_0

W - calor de molhamento diferencial [cal g^{-1}] - $W = -\beta^{-1} g \left(\psi - T \frac{\partial \psi}{\partial T} \right)$, onde β já

foi definido anteriormente.

A aplicação do princípio de conservação de energia térmica na equação de fluxo de calor (34) e na expressão do armazenamento (35), fornece a equação diferencial parcial que governa o fluxo de calor transiente em meios porosos, sob a influência de gradientes de temperatura e de pressão. Esta expressão é descrita por:

$$\frac{\partial S_h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[k_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} + \delta_l (LD_{\theta l} + \beta^{-1} gTD_{Ta}) \delta_{ij} \frac{\partial \psi}{\partial x_j} - c_l (T - T_0) q_{mi} \right] \quad (36)$$

As equações 33 e 36 formam um sistema acoplado de equações diferenciais parciais de segunda ordem com variáveis dependentes ψ e T , que governam a distribuição de temperatura e umidade num meio poroso, saturado ou não. Para completar o sistema de equações 33 e 36 as condições iniciais e de contorno tem que ser especificadas.